

## ペルフルオロ（オクタン-1-スルホン酸）及びその塩のリスク評価

独立行政法人 製品評価技術基盤機構  
化学物質管理センター リスク評価課

## 目次

1. 概要	1
2. 試算条件等	2
2.1 対象物質	2
2.2 リスク評価の対象と有害性情報	2
2.3 暴露評価に用いた物理化学的性状等	3
2.4 環境分配モデル	4
2.5 人と高次捕食動物の暴露シナリオ	5
2.6 推計排出量	6
2.7 環境中濃度の計算条件	8
3. 試算結果	8
3.1 環境中濃度推計結果	8
3.2 モデル推計濃度に基づくリスク評価結果	9
4. モデル推計濃度と環境モニタリング濃度との比較	10
5. 資料	13
5.1 参考資料	13
5.2 添付資料	14

## 1. 概要

ペルフルオロ（オクタン-1-スルホン酸）（別名 PFOS）及びその塩の例外的使用に係るリスクの試算を実施した。

PFOS 及びその塩を対象物質として、排出量を推計し、それを元に環境中濃度を推計し、人、高次捕食動物、水生生物それぞれの暴露量を数理モデルで推計した。排出量の推計は経済産業省指定の条件で行った（2.6 参照）。数理モデルの適用等については、以下の資料を主に参考にした（以下、「UK 評価書」と表記。）。

UK Environmental Agency, 2004, Environmental Risk Evaluation Report: perfluorooctanesulphonate (PFOS).  
[http://www.environment-agency.gov.uk/commondata/105385/pfos\\_rer\\_sept04\\_864557.pdf](http://www.environment-agency.gov.uk/commondata/105385/pfos_rer_sept04_864557.pdf)

モデル推計による環境中濃度の経年変化の予測では、当該物質は排出量が低減すると比較的速やかに環境中濃度も低減すると推計された。

モデル予測濃度を用いたリスク評価の結果では、高次捕食動物については、平成 20 年度までの排出量におけるリスク評価（魚類中濃度）では「リスク懸念」とされたものの、平成 22 年度以降においては「懸念なし」と推計された。また、人の健康、水生生物のリスク評価では、いずれの条件においても「懸念なし」と推計された。

モデル予測濃度と環境モニタリングデータの比較では、海水中濃度と底質濃度では、比較的良

く一致している一方で、魚類中濃度では乖離が見られており、この結果、モニタリング濃度に基づくリスク評価では、高次捕食動物についても、「リスク懸念なし」との結果が得られている。これは、モデル推計に適用したBCF及びBMFについては安全側に推計された値を用いたことによると考えられる。

以上を総合し、PFOSの例外的使用に関する本リスク試算では、人の健康、高次捕食動物、水生生物に対してリスク懸念はないと予測された。

## 2. 試算条件等

### 2.1 対象物質

PFOSに関連する第二種監視化学物質は4物質（スルホン酸、Li、Na、Kの塩）が指定されている。これらに経済産業省調査対象である物質群（アンモニウム塩を含むオニウム塩）を追加し、以下の物質群を「PFOS及びその塩」として評価対象物質とした。

対象物質一覧

通し番号	CAS番号	名称
681	1763-23-1	ペルフルオロオクタンスルホン酸
683	29457-72-5	リチウム=ペルフルオロオクタンスルホナート
684	4021-47-0	ナトリウム=ペルフルオロオクタンスルホナート
685	2795-39-3	カリウム=ペルフルオロオクタンスルホナート
—	29081-56-9	ペルフルオロオクタンスルホン酸アンモニウム
—	—	ペルフルオロオクタンスルホン酸のオニウム塩（アンモニウム塩を除く）

### 2.2 リスク評価の対象と有害性情報

- ✓ リスク評価の対象とそれに用いた有害性情報は以下の通り。
- ✓ 高次捕食毒物の評価には、鳥類の繁殖試験によるLOAEC 10ppm（PNEC換算 0.033 mg/kg 餌）とラット二世世代生殖発生毒性試験によるNOAEL 0.1 mg/kg/day（PNEC換算 0.067 mg/kg 餌）の二種類で試算をした。

リスク評価対象とリスク評価に用いる有害性情報

リスク評価対象	有害性データ	不確実係数積 (Ufs)	PNEC等 (NOEC/Ufs)	備考
人健康	<b>NOAEL 0.5 ppm</b> (K塩の104週混餌投与による発がん性試験で、雄ラットにみられた肝細胞肥大、NOAEL 0.5ppmより。Thomford, 2002)	100 種差 10× 個体差 10	<b>0.0003</b> <b>mg/kg/day</b> <b>y</b>	・環境省の初期評価のキースタディも同様(UK評価書は人の評価はしていない) ・摂取量への換算は、環境省環境リスク評価書と同じNOAEL0.03mg/kg/dayとしている。

高次捕食動物	<p><b>LOAEC 10 ppm</b>  (ウズラへの 21 週混餌投与(0, 10, 50, 150ppm) による長期繁殖試験で、ふ化 14 日雛の生存率の低下の LOAEC 10ppm より。  Newsted et al., 2007)</p>	<p>300  鳥類の長期毒性試験結果の NOEC に対する Assessment Factors 30 (種差と実験室から野外への外挿) と LOEC から NOEC の外挿 10 より (30×10)</p>	<p><b>0.033 mg/kg 餌</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Assessment Factors 30 は EU のリスク評価技術ガイダンスに基づく</li> <li>LOAEC から NOAEC への外挿は U.S.EPA より</li> <li>UK 評価書も 3M のデータとして掲載しているが UF は 30 としておりリスク評価には用いていない</li> </ul>
	<p><b>NOAEL 0.1mg/kg/day</b>  (SD ラットへの強制経口投与(0, 0.1, 0.4, 1.6, 3.2 mg/kg/day) による二世代生殖発生毒性試験で以下の影響の NOAEL 0.1mg/kg/day より</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>F0: 全体的影響</li> <li>F1: 開眼遅延 (用量依存)</li> <li>F2: 体重増加抑制 (OECD, 2002)</li> </ul>	<p>30  哺乳類の長期毒性試験結果の NOEC に対する Assessment Factors 30 (種差と実験室から野外への外挿) より</p>	<p><b>0.067 mg/kg 餌</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>UK 評価書は人健康に用いた肝細胞肥大の NOAEL (NOAEC 換算 0.017mg/kg 餌) を採用しているが生態の評価には over-conservative との認識も示し、本 NOAEC を Alternative proposed としている</li> <li>Assessment Factors 30 は EU のリスク評価技術ガイダンスに基づく</li> <li>餌中濃度に換算</li> </ul>
水生生物	<p><b>NOEC 0.232 mg/L</b>  (以下 3 種の最小値、いずれも K 塩による)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>藻類慢性 NOEC: 5.3 mg/L (緑藻類、4 日間、生長阻害(細胞数)、Boudreau et al., 2003)</li> <li>甲殻類慢性 NOEC: 0.232 mg/L (アミ科、35 日間、繁殖阻害、OECD, 2002)</li> <li>魚類慢性 NOEC: 0.278 mg/L (ファットヘッドミノー(胚)、47 日間、死亡、OECD, 2002)</li> </ul>	<p>10  (3 種の慢性毒性値が得られているため。野外への外挿)</p>	<p><b>0.023 mg/L</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>環境省の初期評価のキースタディも同様</li> <li>淡水と海水の区別はしていない</li> </ul>

なお、底生生物に対するリスク評価については、「EU のリスク評価技術ガイダンスにある平衡分配法は PFOS の性状からみて適用できない」との OECD のハザード評価書の考察に基づき、ここでは行わなかった。

### 2.3 暴露評価に用いた物理化学的性状等

- ✓ 物理化学的性状は K 塩で得られており、「PFOS 及びその塩」をこの性状で代表させた (UK 評価書と同様の扱い)。
- ✓ いずれも出典は UK 評価書だが、底質-水分配係数と浮遊物質-水分配係数については、ここで使用したモデル (SAFECAS) の設定に合わせ、換算しなおした。

モデル推計に使用した物理化学的性状等一覧

項目	記号	値	単位	備考
分子量	MW	538	—	
蒸気圧	VP	$3.31 \times 10^{-4}$	Pa	実測値だが不純物の影響が示唆されており、UK 評価書では limitation 付で採用されている
水溶解度	WS	519	mg/L	20°C
ヘンリー則定数	H	$3.19 \times 10^{-4}$	Pa·m <sup>3</sup> /mol	蒸気圧と水溶解度による計算値
底質-水分配係数	K <sub>sed-water</sub>	9.2	—	実測値より換算
浮遊物質-水分配係数	K <sub>susp-water</sub>	2.64	—	実測値より換算
魚への生物濃縮係数	BCF <sub>fish</sub>	2796	L/kg	実測からの推計値
生物蓄積係数	BMF	2	—	EU の技術ガイダンスのデフォルト設定より
環境中分解速度		ゼロ		

実測の底質固相と間隙水の分配係数 K<sub>psed</sub>（平衡状態の底質固相中濃度と間隙水中濃度の比 [L/kg]）を底質（もしくは浮遊物質）バルクの平衡分配係数にするため、EU-TGD の以下の式で換算した。

$$K_{\text{sed-water}} = F_{\text{water}} + F_{\text{solid}} \times K_{\text{psed}} \times \text{RHO}_{\text{solid}} / 1000$$

K<sub>sed-water</sub> : 底質バルクの平衡分配係数 [-]

K<sub>psed</sub> : 底質固相と間隙水の分配係数 = 8.7 [L/kg] (UK 評価書より)

F<sub>water</sub> : 底質中の水の体積比 = 0.5 (SAFECAS の設定より)

F<sub>solid</sub> : 底質中の固体の体積比 = 0.5 (SAFECAS の設定より)

RHO<sub>solid</sub> : 固体の密度 = 2000 [kg/m<sup>3</sup>] (SAFECAS の設定より)

$$K_{\text{susp-water}} = F_{\text{water}} + F_{\text{solid}} \times K_{\text{psed}} \times \text{RHO}_{\text{solid}} / 1000$$

K<sub>susp-water</sub> : 浮遊粒子バルクの平衡分配係数 [-]

K<sub>psed</sub> : 底質固相と間隙水の分配係数 = 8.7 [L/kg] (UK 評価書より)

F<sub>water</sub> : 浮遊物質の水の体積比 = 0.9 (SAFECAS の設定より)

F<sub>solid</sub> : 浮遊物質の固体の体積比 = 0.1 (SAFECAS の設定より)

RHO<sub>solid</sub> : 固体の密度 = 2000 [kg/m<sup>3</sup>] (SAFECAS の設定より)

## 2.4 環境分配モデル

- ✓ 東京湾を想定した水域と底質の 2 コンパートメントモデル SAFECAS (Simplified Approach for Fate Evaluation of Chemicals in Aquatic Systems) を使用した。ただし、非定常計算ができるように改良した。

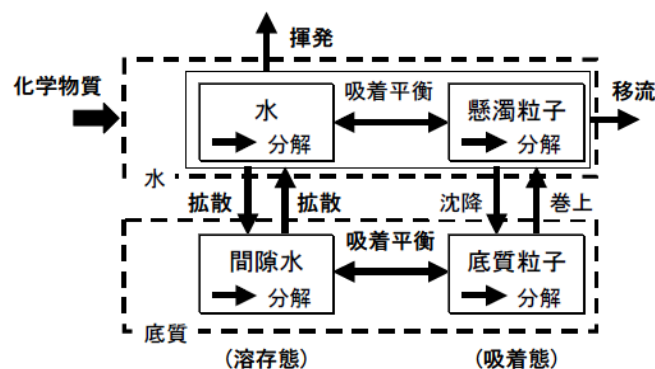


図8 検討に用いた2コンパートメントモデル

(化学物質審議会安全対策部会第3回安全対策小委員会 参考資料2より)

- ✓ SAFECAS は、化学物質審議会安全対策部会安全対策小委員会における監視化学物質の環境中濃度の推計や、平成15年の化審法改正における少量新規の数量設定のためのシミュレーション等において、適用実績がある（東京湾及び瀬戸内海を想定した設定で使用された）。
- ✓ SAFECAS の東京湾のパラメータは、国土技術政策総合研究所の東京湾内湾のデータ (<http://www.meic.go.jp/kowan/main.html>) に更新した。

東京湾のパラメータ

項目	外湾	内湾（本計算で使用）
評価面積 [m <sup>2</sup> ]	1.38×10 <sup>9</sup>	9.22×10 <sup>8</sup>
水域面積 [m <sup>2</sup> ]	1.38×10 <sup>9</sup>	9.22×10 <sup>8</sup>
水深 [m]	45	16
水域体積 [m <sup>3</sup> ]	6.21×10 <sup>10</sup>	1.48×10 <sup>10</sup>
滞留時間 [day]	45.6	45

- ✓ SAFECAS のようなボックスモデルでは、上図のような物質収支に基づくボックス毎の物質残存量を計算し、ボックス体積で割ることで濃度を算出するため、ボックス体積（環境の大きさ）を例えば2倍にすれば、（他の条件がすべて同じの場合）予測濃度は2分の1になるという関係がある（MNSEM2もEUSESといった他のボックスモデルも同様）。
- ✓ PFOS及びその塩はlogKowが測定できないため、環境分配モデルの適用においては、logKowやlogKocの代わりに、底質-水分配係数等で数式を置き換え、モデルを適用した（UK評価書と同様のアプローチ）。

## 2.5 人と高次捕食動物の暴露シナリオ

下図のような暴露シナリオを想定し、2.4のモデルによる推計水中濃度を用いて人と高次捕食動物の暴露量を推計した。