環境における化学物質の運命評価とそのモデル

吉田喜久雄

三菱化成安全科学研究所

Mathematical Models for Evaluation of Fate of Chemicals in the Environment

KIKUO YOSHIDA

*Yokohama Laboratory, Mitsubishi-Kasei Institute of Toxicological
and Environmental Sciences, 1000 Kamoshida-cho, Midori-ku,
Yokohama 227, Japan*

For assessing the potential hazard of the chemicals to human and other organisms, it is required to evaluate ambient concentrations of the chemicals in air, water, and soil media.

Mathematical models have been developed and used for estimating the fate and concentrations of chemicals released into the environment. The principal approaches of the models are based on the mass balance equations expressed in terms of;

- load into the environment,
- equilibrium and rate constants for transport, transfer, and transformation processes,
- environmental conditions.

They are classified into three types of modelling approaches;

- partition equilibrium model,
- simplified fate simulation model,
- detailed fate simulation model.

It may be possible to estimate the amount of the chemicals exposed to human and environmental organisms, based on the model outputs, combined with environmental monitoring data.

Keywords — environmental fate; mathematical model; hazard assessment; exposure analysis

1. はじめに

化学工業の発展に伴い、様々な化学物質が開発され各種用途に用いられている。これらの化学物質の多くは我々を取り巻く自然環境中には存在しない異物であり、農薬のように意図的に環境に放出される化学物質だけでなく、各種一般化学品の多くも製造、使用、廃棄等の過程で環境に放出される。

環境中を化学物質が移動し、消失する前に、人や環境生物はその暴露を受ける。暴露 (exposure) とは化学物質が生物の外部・内部界面と接触する度合であり、通常は大気、食物、水中の化学物質濃度で表現される。¹⁾ 人や陸上動物が化学物質と接する重

要な界面は呼吸器官、消化管、皮膚であり、魚類では、えらと消化管である。

生物が化学物質の暴露を受け、生体内の各種臓器に吸収され、また移行して、始めて生体への影響が引き起こされる可能性が生ずる。

環境中に意図的又は非意図的に放出された化学物質の人や環境生物への有害性 (hazard) を評価するためには、Fig. 1 に示すように化学物質の人体健康影響あるいは環境生態系への影響 (effect) に関する知見だけでなく、暴露 (exposure) についても考慮する必要がある。²⁾

しかし、化学物質は環境を構成する大気、水、土

Fig. 1. Hazard Assessment of Chemicals in the Environment

TABLE I. Transfer, Transport and Transformation Processes, and Related Environmental Conditions

Process	Environmental media	Environmental condition
Transfer		
Volatilization	Water, soil → air	Turbulence, reaeration coefficient, soil organic carbon content
Fallout	Air → water, soil	Wind velocity, particulate concentration
Runoff	Soil → water	Precipitation rate
Transport		
Advection	Air, water	Wind velocity, flow velocity
Leaching	Soil	Soil organic carbon content
Transformation		
Photodegradation	Air, water	Solar irradiance, transmissivity of air or water
Oxidation	Air, water	Oxidants concentration
Hydrolysis	Water, soil, sediment	pH, soil or sediment basicity or acidity
Biodegradation	Water, soil, sediment	Microorganisms population, acclimation level

壤等の複数の媒体に放出され、放出源から離れた地点まで大気や水の移動に伴い輸送 (transport) される。そしてその間に化学物質は大気、水、土壌等の媒体間を移動 (transfer) し、それらの媒体中で他の物質に変換 (transformation) され消失する。このような化学物質の環境中運命に関連する輸送、移動及び変換プロセスは Table I に示すように数多くあり、環境中運命に関与するプロセスは化学物質の特性と環境条件に依存する。

環境経路による化学物質の、人や環境生物への有害性を評価する際、時間的、空間的に変動する環境中濃度を把握するためには各種環境媒体を実際に分析する環境調査が確実である。しかし、環境調査にも以下のような欠点がある。

1) 微量レベルの分析方法の確立には時間と労力を

要し、多くの化学物質の環境中濃度を迅速に把握できない。

- 2) 測定地点以外の情報は得られず、空間的な濃度分布を把握するためには、測定地点を数多く設定する必要がある。
- 3) 時間的な濃度傾向は、1回の測定では明らかにできず、経時的な測定が必要である。
- 4) 製造又は輸入を予定している新規化学物質には適用できない。
- 5) 環境中の運命に大きな寄与をするプロセスが明らかにできない。

2. 数学的モデル

環境調査の欠点を補うため、数学的モデル (mathematical model) が開発され、化学物質の環境中運命と環境中濃度の推定に使用されている。環境調査

Fig. 2. Model Input and Output

とこのモデルを併用することにより、上記の環境調査の欠点が補われ、有害性評価対象地域の人体や環境生物の暴露推定が容易になる。更にこのモデルにより暴露推定が環境調査地域以外に外挿できる。

2.1 モデルの考え方 数学的運命評価モデルは Fig. 2 に示すように、化学物質の特性、環境条件及び環境放出に関するパラメータで表現される物質収支式から、挙動と濃度を推定する。モデルの物質収支式は一般に以下の式で表現される。

$$dM_i/dt = Q_i - \sum_j A_{i,j} - T_i + \sum_j I_{j,i} \quad (1)$$

ここで、上式の左辺は媒体 (i) 中の化学物質質量 (M_i) の時間変化を示している。一方、右辺の Q_i はその媒体への放出量、 $\sum_j A_{i,j}$ は他の媒体への移動量、 T_i は変換プロセスによる消失量、 $\sum_j I_{j,i}$ は他の媒体からの移動量を示す。

媒体毎に組み立てられた連立微分方程式で表現される物質収支式を解くことにより、環境中の化学物質質量や濃度の時間変化が求められる。

しかし、多くの一般化学品の環境放出は連続的であり、定常状態成立が仮定でき、式(1)は媒体中の化学物質質量に関する連立方程式となり、容易に濃度が推定できる。

$$Q_i - \sum_j A_{i,j} - T_i + \sum_j I_{j,i} = 0 \quad (2)$$

上記のような物質収支を表現するため、モデルは以下のようなパラメータを必要とする。

- 1) 化学物質の特性：物性（水溶解度、蒸気圧及び分配係数）、平衡定数（ヘンリー則定数、土壌有機炭素吸着定数、生物濃縮倍率）、速度定数（揮

発、大気/水中拡散係数、気相/液相質量移動係数、酸化、光分解、加水分解、微生物分解等）。

- 2) 環境条件：（媒体の容積、高さ/深さ、温度、風速、雨量、流量、有機炭素量、懸濁粒子濃度、大気/水透過率、オキシダント濃度、pH、微生物濃度等）。

- 3) 放出：（放出媒体、生産量、使用形態、放出量/放出速度）。

式(1)や式(2)の移動量や消失量は、上記のそれらのプロセスの速度定数で媒体中の化学物質質量と関係づけられる。例えば、変換プロセスによる消失量は、変換プロセスの1次速度定数で式(3)のように表現される。

$$T_i = \sum k_{rec} M_i \quad (3)$$

ここで、 $\sum k_{rec}$ は媒体内での変換プロセスの1次速度定数の和である。変換プロセスとしては、大気中での酸化、水中での光分解、加水分解、微生物分解、土壌や底質中での加水分解、微生物分解等が多くの化学物質に一般的である。これらの速度定数は経済協力開発機構 (OECD)、米国環境保護庁 (EPA) 等のテストガイドライン^{3,4,5)} に従って2次速度定数として測定され、環境条件に応じて一次速度定数に直される。

モデルは物質収支式に必要な輸送、移動、変換プロセスに対する平衡定数や速度定数を環境条件の関数として入力することで、環境条件の異なる様々な地点での濃度が推定できる利点を有する。

- 2.2 モデルの分類 現在、多くのモデルが化学

TABLE II. Environmental Fate Models

Multi-media (Air/water/soil/sediment/aquatic biota)	Aquatic environment (Water/sediment/aquatic biota)
Partition	
Fugacity model level I, II (Mackay, 1979) ⁶⁾	SRI model (Smith, <i>et al.</i> , 1977) ⁹⁾
Klöpffer's model (Klöpffer, 1982) ⁷⁾	
Non-steady state equilibrium model [NSEM] (Yoshida, <i>et al.</i> , 1983) ⁸⁾	Non-steady state equilibrium model [NSEM] (Yoshida, <i>et al.</i> , 1983) ⁸⁾
Kinetic	
Simplified	
Fugacity model level III, IV (Mackay, 1979) ⁶⁾	Exposure analysis modeling system [EXAMS] (Burns, <i>et al.</i> , 1981) ¹³⁾
Environmental partitioning model [ENPART] (Wood, 1982) ¹⁰⁾	Simplified lake and stream analysis [SLSA] (DiToro, <i>et al.</i> , 1982) ¹⁴⁾
Multi-compartmental model [MCM] (Cohen and Ryan, 1985) ¹¹⁾	Quantitative water, air, sediment interaction fugacity model [QWASI] (Mackay <i>et al.</i> , 1984) ¹⁵⁾
Multi-phase non-steady state equilibrium model [MNSEM] (Yoshida, <i>et al.</i> , 1987) ¹²⁾	Simplified approach for fate evaluation of chemicals in aquatic systems [SAFE CAS] (Yoshida, <i>et al.</i> , 1987) ¹⁶⁾
Detailed	
TOX-SCREEN (Hetrick and McDowell -Boyer, 1984) ¹⁷⁾	Hydrological simulation program-FORTRAN [HSPF] (Johnson, <i>et al.</i> , 1984) ¹⁹⁾
Unified transport model for toxic materials [UTM-TOX] (Patterson, <i>et al.</i> , 1984) ¹⁸⁾	

物質の複数媒体で構成される環境中挙動と濃度を推定するため使用されている。Table II にそれらの中の代表的なモデルを示す。これらのモデルは対象とする環境、あるいは環境媒体間の化学物質の移動の取り扱い等により分類することができる。

対象とする環境で分類した場合、モデルは、

- 1) マルチメディアモデル (multi-media model) : 大気、水、土壌等の媒体で構成される環境 (マルチメディア) を対象とする。
- 2) 水系環境モデル (aquatic environment model) : 河川、池、湖等の水と底質で構成される水系を対象とする。

に分類できる。

一方、環境媒体間の移動プロセスの表現方法の違いにより、以下のように分類できる。

- 1) 分配平衡モデル (partition model) : 平衡定数 (ヘンリー則定数、土壌有機炭素吸着定数、生物濃縮倍率) で大気、水、土壌、水生生物等の媒体間の移動を表現する。
- 2) 速度論モデル (kinetic model) : 質量移動係数や拡散係数で大気、水、土壌、水生生物等の媒体間の移動を表現する。

両モデルとも環境中の輸送及び変換プロセスを速度論的に取り扱う点では共通である。

マルチメディアモデルである fugacity model⁶⁾ の

level I, II や水系環境モデルである SRI model⁹⁾ 等のように、モデル開発の初期には分配平衡モデルの報告が多かった。

しかし、化学物質の現実的な挙動評価と環境濃度推定には、媒体間で分配平衡が成立すると仮定する分配平衡モデルより、速度論モデルが適している。更に、

- 1) OECD や EPA で環境中運命評価モデルの検討、開発が開始された。
 - 2) 高性能のマイクロコンピュータ (パソコン) が普及し、プログラム作成が容易になった。
- 等の理由で、モデル開発に拍車がかかり、1980 年代に入り、マルチメディアや水系環境に対する多くの速度論モデルが発表された。また、モデルに必要なパラメータに対する OECD, EPA 等のテストガイドラインが整備され、更に推算法の報告も多くなり、²⁰⁾ モデルの使用が容易になった。

2.3 分配平衡モデル 分配平衡モデルは環境媒体間の化学物質の移動を、比較的測定が容易な水溶解度、蒸気圧、分配係数から推算できる 3 種類の平衡定数 (ヘンリー則定数、有機炭素吸着定数、生物濃縮倍率) で表現する。したがって、環境中での分解性に関する知見がなくても、環境中で化学物質が分布し易い媒体を選択できる。

環境中での化学物質の移動及び変換プロセスは先

に述べたように数多くあるが、分配平衡モデルにより化学物質が分布し易い媒材が明らかにできれば、優先的に速度定数を整備すべき移動、変換プロセスを少なくすることができる。

Fugacity model level I と II は、大気、水、土壌、底質、懸濁粒子、水生生物の 6 種類の媒体間の化学物質の移動をヘンリー則定数、有機炭素吸着定数、濃縮倍率で表現し、SRI model では水と底質の両媒体間の化学物質の移動を有機炭素吸着定数で表わす。

環境媒体間に化学物質の分配平衡が成立することを前提とする分配平衡モデルの適用はポリ塩化ビフェニル (PCB) のような難分解性物質の環境中濃度の推定に適する。すなわち、系外への輸送及び変換プロセスの速度が環境媒体間の移動プロセスの速度に比べて充分遅い場合には、分配平衡モデルでもかなり詳細な環境中挙動と濃度が推定できる。

Schwarzenbach らによる 1 年以上に亘る環境調査結果からスイスのチューリッヒ中央湖での 1,4-ジクロロベンゼンの収支と濃度が決定されている。²¹⁾ この 1,4-ジクロロベンゼンは脱臭剤等の家庭用品に主に使用され、湖への放出は上流からの流入水と 12ヶ所の排水処理場の排水と考えられている。

Table III に環境調査結果と分配平衡モデルの NSEM²²⁾ と速度論モデルの EXAMS²³⁾ による評価結果の比較を示す。モデル評価では、物性値から推算された有機炭素吸着定数と揮発速度定数及び湖の環境条件を用いた。両モデルの評価結果は測定値とよく一致しており、輸送や変換プロセスが移動プロセスに比べて遅い場合には、分配平衡モデルでもかなり詳細な環境中挙動と濃度が推定できる。

2.4 速度論モデル 速度論モデルは大気、水、土壌中の化学物質の輸送プロセスの取り扱いの程度により以下の 2 種類に分類される。²⁴⁾

1) simplified fate model

2) detailed dynamic fate model

これらには適切な日本語訳がないため、以後そのまま使用する。

Simplified Fate Model — Table II に示したマルチメディアモデルの fugacity model level III と IV,⁶⁾ ENPART,¹⁰⁾ MCM,¹¹⁾ MNSEM¹²⁾ や水系環境モデルの EXAMS,¹³⁾ SLSA,¹⁴⁾ QWASI¹⁵⁾, SAFECAS¹⁶⁾ がこのタイプのモデルに属する。

Simplified fate model は環境媒体間の移動を速度論的に取扱う点では detailed dynamic fate model と共通である。しかし、比較的広範囲に設定した環境中の化学物質の媒体間の移動と媒体中の変換を輸送プロセスに比べて重視し、気象条件や地域特性に大きく依存する輸送プロセスの速度定数や環境条件に平均的な値を用いる。したがって、比較的広い範囲での平均的な挙動と濃度を推定する。

Simplified fate model に必要な入力パラメータ数は detailed dynamic fate model に比べて少なく、OECD 等のテストガイドラインに従って測定可能な物性値、平衡定数、速度定数 (変換プロセス) がほとんどであり、一部のパラメータは構造等からの推算も可能である。また、詳細な環境条件データの入力是不要であり、移動プロセスの速度定数は通常、平衡定数や平均的な環境条件から推算するためほとんど考慮しないで挙動と濃度推定が可能である。したがって、有害性評価では環境中濃度をスクリーニング的に推定するモデルの役割を有する。

平均的な環境条件を有する仮想的な環境は evaluative environment と呼ばれ、SRI model の開発者の Smith らや Mackay により複雑な環境条件の把握からモデル利用者を解放する目的で提案された。

このように輸送プロセスや環境条件等に平均的な値を用いる簡略化されたモデルではあるが、環境中挙動及び濃度を推定する上の基本的なプロセスは全て物質収支式に組み込まれており、化学物質の有害性評価に使用できる充分な環境中濃度推定が可能である。

Table IV に、英国リバプール市での大気、水、底質及び魚中のトリクロロエチレン測定濃度と fugacity model level III,²⁵⁾ MCM,¹¹⁾ MNSEM²⁶⁾

TABLE III. Results of NSEM and EXAMS Simulation of the Behavior of 1,4-Dichlorobenzene in Lake Zurich, Switzerland

Method	Concentration (ng/l)	Mass (kg)	Volatilization (kg/year)	Advection (kg/year)
Measured	11.2	38.0	60.0	28.0
NSEM	10.7	36.5	60.2	27.8
EXAMS	10.7	36.5	59.4	28.2

TABLE IV. Results of Fugacity Model Level III, MCM, and MNSEM Simulation of the Behavior of Trichloroethylene in Liverpool, England

Method	Concentration (ng/m ³)				
	Air	Water	Soil	Sediment	Fish
Measured	6×10^3 (average)	6×10^6 (max.)	—	1×10^5 (average)	$10^5 - 10^7$
Fugacity Model III	1×10^3	9×10^4	6×10^5	5×10^5	9×10^5
MCM	1×10^4	3×10^4	6×10^4	9×10^4	6×10^5
MNSEM	3×10^3	8×10^3	6×10^4	1×10^5	1×10^6

Fig. 3. Comparisons of Estimated Concentrations with Average Concentrations Measured by Environmental Agency, Japan

- 1; aniline, water
- 2; aniline, sediment solid
- 3; chloroform, air
- 4; chlorobenzene, air
- 5; 1,4-dichlorobenzene, air
- 6; trichloroethylene, air
- 7; nitrobenzene, aquatic biota

により評価された濃度の比較を示す。MCMとMNSEMではトリクロロエチレンはすべて大気へ放出されるとするのに対し、fugacity modelでは90%が大気へ残り5%ずつが水と土壤に放出されるとしているため、水、土壤、底質、魚中の濃度が少し高めである。このような違いがあるがいずれのモデルも環境中濃度推定に適している。

また、著者らはMNSEMを用い8種類の化学物質の日本における平均濃度を評価し、Fig. 3に示すように測定値の平均とかなりよい一致を得ている。²⁷⁾

一方、広大で変化が激しい大気媒体を含まない水

系環境は環境条件の設定が容易であり、放出も水中に限られるため、水系環境モデルはマルチメディアモデルに比べ、詳細な水系環境中挙動評価が可能である。

分配平衡モデルは、直鎖アルキルベンゼンスルホン酸(LAS)のように変換プロセス(微生物分解)の速度が速い化学物質に対して、適切な環境中挙動評価と濃度推定ができない。一方、速度論モデルは分配平衡成立という前提条件がないため、すべての化学物質に適用できる。

米国のサウスダコタ州のRapid City近くの河川(Rapid Creek)へのLASの唯一の放出源は市内からの排水の処理場である。GamesはこのRapid CreekでのLASの水中及び底質中濃度を放出源から下流約90 kmまで測定している。²⁸⁾ この測定結果はEXAMS,²⁹⁾ SLISA,²⁹⁾ QWASI,³⁰⁾ SAFECAS²⁶⁾の環境中挙動評価能力の検証に用いられている。Fig. 4にSAFECASによる評価結果を示すが、その他のモデルも測定値をよく再現することが報告されている。

Simplified fate modelは新規化学物質の有害性評価の初期段階で平均的な環境中挙動及び濃度を推定するのに使用でき、更に、多くの既存化学物質の中から環境経由の人体への有害性評価を優先的に行うべき物質の選択にも有効なため、幅広く用いられている。例えば、Wolfeらは河川、池、富栄養湖、貧栄養湖の4種類の水系のevaluative environmentを用いて5種類のフタル酸エステルの運命を評価している。³¹⁾ また、著者らは3種類のpHの異なる水系のevaluative environmentを用い2,4,6-トリクロロフェノールのpH変動に伴う挙動の変化について評価した。¹⁹⁾ このような同一環境条件下での異なる化学物質間の挙動の比較や、異なる環境条件下での同一化学物質の挙動変化等の評価はsim-

Fig. 4. Concentration-Distance Profiles of LAS in the Rapid Creek, USA

—: concentration calculated, ○: concentration measured in water, ●: concentration measured in sediment.

plified fate model が最も得意とするところである。

更に、テストガイドラインに従って測定される物性、平衡定数、変換プロセスの速度定数を総合的に評価できる。環境中挙動及び濃度に大きな影響を及ぼす重要な変換プロセスが明らかになれば、環境中で生成が予想される主要構造変化物が推定できる。

Detailed Dynamic Fate Model — Simplified fate model が発表される以前から、大気汚染、水質汚染や土壌からの流出等の単一媒体中の物質輸送モデルが開発されていた。これらの輸送モデルは環境条件を詳細に入力して特定地域でのシミュレーションを行う。しかし、媒体間の移動、媒体中の変換プロセスがほとんど無視されており、様々な特性を有

する有機化学物質には適用できない状態であった。

しかし、大気拡散モデルや水系と土壌中の水理・水文学的な水輸送モデル等を連結し、化学物質の移動と変換プロセスも考慮して、化学物質の特定地域の複数媒体中の詳細な運命と濃度を評価する目的で TOX-SCREEN,¹⁷⁾ UTM-TOX,¹⁸⁾ HSPF¹⁹⁾ 等のモデルが開発されている。

例えば、TOX-SCREEN は大気、水系環境及び土壌の各サブモデルにそれぞれ Pasquill のブルーム拡散モデル、EXAMS, seasonal soil compartment model (SESOIL) を使用しており、環境条件には地域に特異的な月別の大気安定度、風向、風速、降雨量、地下水面までの 3 土壌層毎の水浸透係数等の詳細なパラメータが要求される。

したがって、有害性評価の初期段階ではなく、環境調査と同様に、具体的な特定地域を対象に環境中運命や濃度を評価する必要がある場合に使用される。

このような detailed dynamic fate model についても、環境調査結果との比較がなされはじめている。Bicknell らは米国オハイオ州南東部の大気、水及び土壌中のベンゾ[a]ピレン濃度の 1 年間に亘る変動を TOX-SCREEN で評価し、晴天時の各媒体中濃度を測定値と比較して、Table V に示す結果を得ている。³²⁾

このようなモデルに必要な種々の環境条件の詳細を短時間で把握することは実際困難ではあり、有害性評価の初期の段階での使用には適さないが、このようなモデルに必要な気象データ、環境条件等のデータベース化が進んでいるため、将来的には環境調査に代わり得るモデルとして、detailed dynamic fate model は有効に利用されるであろうと予想される。

3. 最後に

化学物質の環境経路による人や環境生物への有害性を評価するために開発され、利用されている数学

TABLE V. Results of TOX-SCREEN Simulation of the Behavior of Benzo[a]pyrene in Southeast Ohio Region, USA

Method	Concentration		
	Air (ng/m ³)	Water (ng/l)	Soil (µg/kg)
Measured	5 ^{a)}	28 ^{a)}	300—500
TOX-SCREEN ^{b)}	30—60	3—15	20—70

a) Average concentration.

b) Concentrations for non-rainy periods.

的モデルについて紹介した。モデルは環境を構成する各種媒体中の化学物質濃度を精度よく推定できる能力を有することがわかっていただけたと思う。

しかし、化学物質の特性や環境放出に関する情報等、モデルが必要とするパラメータは多くある。

化学物質の特性については、かなり既存データの蓄積があり、データ集が発刊されており、³³⁾更に米国の国立衛生研究所(NIH)とEPAの共同開発による数値データベースのChemical Information System(CIS)の中のファイル(ENVIROFATE)の利用も可能である。また、新規化学物質のモデルによる環境中運命と濃度の迅速な推定には、化学物質の特性に関する定量的な構造-反応性相関(structure-reactivity correlation)が必要不可欠であるが、CISには化学構造、物性値から量子論的あるいは熱力学的に計算するソフトを備えるファイル(CHEMLAB)が内蔵されている。ただ現時点では収録されている化学物質数がそれ程膨大でなく、今後の拡充を期待したい。

一方、環境放出に関してはいろいろ困難な面も多い。特に多種多様な使用形態を有する一般化学品の場合、トリクロロエチレン等注目を集めている物質を除き、年間生産量、用途、物性等から放出速度を推定せざるを得ず、環境への放出速度等の定量化が

なかなか困難なのが現実である。したがって、環境調査に置き換えて、数学的モデルで化学物質の環境中挙動の評価と濃度推定が行われるというよりも、今後とも環境調査と数学的モデルは併用されていくことも将来的に多いと思われる。

化学物質の環境経路の有害性評価の面から見れば、モデルは人や陸上生物の大気暴露濃度あるいは水生生物の水中暴露濃度が直接評価できる。しかし、人や陸上動物の暴露経路として重要な食物や飲料水中の化学物質濃度は、環境媒体中の化学物質濃度から更に推定する必要がある。したがって、今後はモデルにこれらの経路からの暴露量の推定手法を確立し、追加する必要があるだろう。

更に、吸入、経口及び経皮の経路毎の暴露量を推定し、環境経路の化学物質の取り込みに伴う人体中の分布、残留、代謝等をスムーズに評価するための生理学的薬物動力学モデルと、環境中運命評価モデルの間のインターフェースの開発も今後重要なテーマであろう。³⁴⁾

謝辞 本解説を発表する機会を与えてくださいました静岡県立大学薬学部富田勲教授に感謝いたします。

引用文献及び注

- 1) U.S. EPA, "Guidelines for Estimating Exposure," Federal Register, **51**, 34042 (1986).
- 2) R. Haque, "Dynamics, Exposure and Hazard Assessment of Toxic Chemicals," ed. by R. Haque, Ann Arbor Science Publishers, 1980, pp.1-4.
- 3) OECD, "Guidelines for Testing of Chemicals." 1981. 日本語訳としては、(勸化学品検査協会編, 「化学品テストガイドライン」第一法規出版 1981)がある。
- 4) U.S. EPA, "Chemical Fate Testing Guidelines," EPA 560/6-82-003, 1982.
- 5) T. Mill, W.R. Mabey, D.C. Bomberger, T.W. Chou, D.G. Hendry, J.H. Smith, "Laboratory Protocols for Evaluating the Fate of Organic Chemicals in Air and Water," SRI International, 1982, PB83-150888.
- 6) D. Mackay, *Environ. Sci. Technol.*, **13**, 1218 (1979).
- 7) W. Klöpffer, G. Rippen, R. Frische, *Ecotoxicol. Environ. Saf.*, **6**, 294 (1982).
- 8) K. Yoshida, T. Shigeoka, F. Yamauchi, *Ecotoxicol. Environ. Saf.*, **7**, 179 (1983).
- 9) J.H. Smith, W.R. Mabey, N. Bohonos, B.R. Holt, S.S. Lee, T.W. Chou, D.C. Bomberger, T. Mill, "Environmental Pathway of Selected Chemicals in Freshwater System Part I: Background and Experimental Procedures," SRI International, 1977, PB-274 548.
- 10) Chemical Fate Branch Team, "An Environmental Partitioning Model (draft)," U.S. EPA Office of Toxic Substances, 1980.
- 11) Y. Cohen, A. Ryan, *Environ. Sci. Technol.*, **19**, 412 (1985).
- 12) K. Yoshida, T. Shigeoka, F. Yamauchi, *Toxicol. Environ. Chem.*, **15**, 159 (1987).
- 13) L.A. Burns, D.M. Cline, R.R. Lassiter, : User's Manual and System Documentation "Exposure Analysis Modeling System (EXAMS)," U.S. EPA, 1981, EPA-600/3-82-023.
- 14) D.M. DiToro, D.J. O'Connor, R.V. Thomann, J.P. St. John, "Analysis of the Fate of Chemicals in Receiving Water, Phase I," HydroQual, 1981, CMA Project ENV-7-W.

- 15) D. Mackay, M. Joy, S. Paterson, *Chemosphere*, **12**, 981 (1983) : D. Mackay, S. Paterson, M. Joy, *ibid.*, **12**, 1193 (1983).
- 16) K. Yoshida, T. Shigeoka, F. Yamauchi, *Chemosphere*, **16**, 2531 (1987).
- 17) D.M. Hetrick, D.M. and L.M. McDowell-Boyer, "User's Manual for TOX-SCREEN," U.S. EPA, 1984, PB84-213750.
- 18) M.R. Patterson, T.J. Sworski, A.L. Sjoreen, M.G. Browman, C.C. Coutant, D.M. Hetrick, B.D. Murphy, R.J. Raridon, "A User's Manual for UTM-TOX, The Unified Transport Model," Oak Ridge National Laboratory, 1984, ORNL-6064.
- 19) R.C. Johanson, J.C. Imhoff, J.L. Kittle, A.S. Donigian, "User's Manual for Release 8.0: Hydrological Simulation Program -FORTRAN (HSPF)," U.S. EPA, 1984, EPA-600/3-84-066.
- 20) 例えば, W.J. Lyman, W.F. Reehl, D.H. Rosenblatt, "Handbook of Chemical Property Estimation Methods," McGraw-Hill Book, 1982 には 26 種類の物性値等の推算法が記載されている。
- 21) R.K. Schwarzenbach, E. Molnar-Kubica, W. Giger, S.G. Wakeham, *Environ. Sci. Technol.*, **13**, 1367 (1979).
- 22) ㈱三菱化成安全科学研究所, "化学物質環境運命予測手法開発調査別添資料," 日本環境協会, 1984, pp.4-14.
- 23) L.A. Burns, "Aquatic Toxicology and Hazard Assessment Sixth Symposium," ed. by W.E. Bishop, R.D. Cardwell, B.B. Heidolph, ASTM STP 802, 1983, pp.255-281.
- 24) K.L. Dickson, A.W. Maki, J. Cairns, Jr., "Modeling the Fate of Chemicals in the Aquatic Environment," Ann Arbor Science Publishers, 1982.
- 25) D. Mackay, S. Paterson, B. Cheung, W.B. Neely, *Chemosphere* **14**, 335 (1985).
- 26) 吉田喜久雄, "化学物質環境中運命手法の現状と課題," 日本環境協会, 1986, pp.355-422.
- 27) K. Yoshida, T. Shigeoka, F. Yamauchi, *Toxicol. Environ. Chem.*, **17**, 69 (1988).
- 28) L.M. Games, "Modeling the Fate of Chemicals in the Aquatic Environment," ed. by K.L. Dickson, A.W. Maki, J. Cairns, Jr., Ann Arbor Science Publishers, 1981, pp.325-346.
- 29) L.M. Games, "Aquatic Toxicology and Hazard Assessment Sixth Symposium," ed. by W.E. Bishop, R.D. Cardwell, B.B. Heidolph, ASTM STP 802, 1983, pp.282-299.
- 30) M. Holysh, S. Paterson, D. Mackay, M.M. Bandurraga, *Chemosphere* **15**, 3 (1986).
- 31) N.L. Wolfe, L.A. Burns, W.C. Steen, *Chemosphere* **9**, 393 (1980).
- 32) B.R. Bicknell, S.H. Boutwell, D. Watson, "Testing and Evaluation of TOX-SCREEN Model," U. S. EPA, 1985, EPA/600/3-85/001.
- 33) K. Verschuere, "Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals," 2nd ed., Van Nostrand Reinhold Company, 1982.
- 34) S. Paterson, D. Mackay, *J. Environ. Toxicol. Chem.* **6**, 395 (1987).