

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27

優先評価化学物質のリスク評価（一次）
生態影響に係る評価Ⅱ
リスク評価書簡易版

n-ヘキサン

優先評価化学物質通し番号 3



令和2年1月

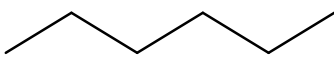
厚生労働省
経済産業省
環境省

評価の概要について

1 評価対象物質について

本評価で対象とした物質は表 1 のとおり。

表 1 評価対象物質の同定情報

| | |
|----------|---|
| 評価対象物質名称 | n-ヘキサン |
| 構造式 |  |
| 分子式 | C ₆ H ₁₄ |
| CAS 登録番号 | 110-54-3 |

2 物理化学的性状、濃縮性及び分解性について

本評価で用いた n-ヘキサンの物理化学的性状、濃縮性及び分解性は表 2 及び表 3 のとおり。

表 2 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ*

| 項目 | 単位 | 採用値 | 詳細 | 評価 I で用いた値(参考) |
|----------------------------|------------------------|----------------------------------|--|------------------------------------|
| 分子量 | — | 86.17 | — | 86.17 |
| 融点 | °C | -95.3 ^{1,2)} | 測定値か推計値については記載なし | -95.3 ^{1,2)} |
| 沸点 | °C | 68.73 ^{3,4)} | 標準圧力(1,013 hPa)での測定値の算術平均値 | 68.73 ^{3,4)} |
| 蒸気圧 | Pa | 1.62×10^4 ⁵⁾ | 複数の温度における測定値に基づく回帰式から 20 °C に内挿した値の平均値 | 1.43×10^4 ⁵⁾ |
| 水に対する溶解度 | mg/L | 12 ^{5,6)} | 20 °C での測定値 | 9.3 ⁷⁾ |
| 1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow) | — | 3.9 ^{2,5,8)} | 測定値 | 3.9 ^{2,8)} |
| ヘンリー係数 | Pa·m ³ /mol | 1.35×10^5 ⁵⁾ | 20 °C での測定値 | 1.68×10^5 ^{5,9)} |
| 有機炭素補正土壌吸着係数(Koc) | L/kg | 132 ⁵⁾ | KOCWIN ¹⁰⁾ による推計値(MCI 法) | 397 ^{9,11)} |
| 生物濃縮係数(BCF) | L/kg | 174 | BCFBAF ¹⁰⁾ による推計値 | 174 |
| 生物蓄積係数(BMF) | — | 1 | logPow と BCF から設定 ¹²⁾ | 1 |
| 解離定数(pKa) | — | — | 解離性の基を有さない物質 | - ¹³⁾ |

※平成 29 年度第 1 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議(平成 29 年 5 月 25 日)で了承された値

1) 環境省(2002)

2) PhysProp

3) CRC

4) CCD

5) Mackay(2006)

6) IUPAC

7) 通商産業省(1996)

8) HSDB

9) ATSDR(1999)

10) EPI Suite(2012)

11) EHC(1991)

12) MHLW, METI, MOE(2014)

13) 評価 I においては解離定数を考慮しない

1
2

表 3 分解に係るデータのまとめ*

| 項目 | | 半減期 (日) | 詳細 |
|---------------|---------------|------------|-------------------|
| 大気 | 大気における総括分解半減期 | | NA |
| | 機序別の半減期 | OHラジカルとの反応 | 3.1 ¹⁾ |
| | | オゾンとの反応 | NA |
| | | 硝酸ラジカルとの反応 | 315 ¹⁾ |
| 水中における総括分解半減期 | | | NA |
| 水中 | 機序別の半減期 | 生分解 | 5 ²⁾ |
| | | 加水分解 | - |
| | | 光分解 | - |
| 土壌における総括分解半減期 | | | NA |
| 土壌 | 機序別の半減期 | 生分解 | 5 |
| | | 加水分解 | - |
| 底質における総括分解半減期 | | | NA |
| 底質 | 機序別の半減期 | 生分解 | 20 |
| | | 加水分解 | - |

3 ※平成 29 年度第 1 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会
4 議（平成 29 年 5 月 25 日）で了承された値

5 1) Mackay (2006)

NA: 情報が得られなかったことを示す

6 2) 通商産業省(1996)

-: 無視できる

7 3 排出源情報

8 本評価で用いた化審法届出情報及び PRTR 届出情報等は図 1～図 2 及び表 4～表 5 のと
9 り。製造・輸入量は平成 24 年度以降ほぼ横ばいとなっている（図 1）。PRTR 制度に基づく排
10 出・移動量についても平成 22 年度以降ほぼ横ばいである（図 2）。

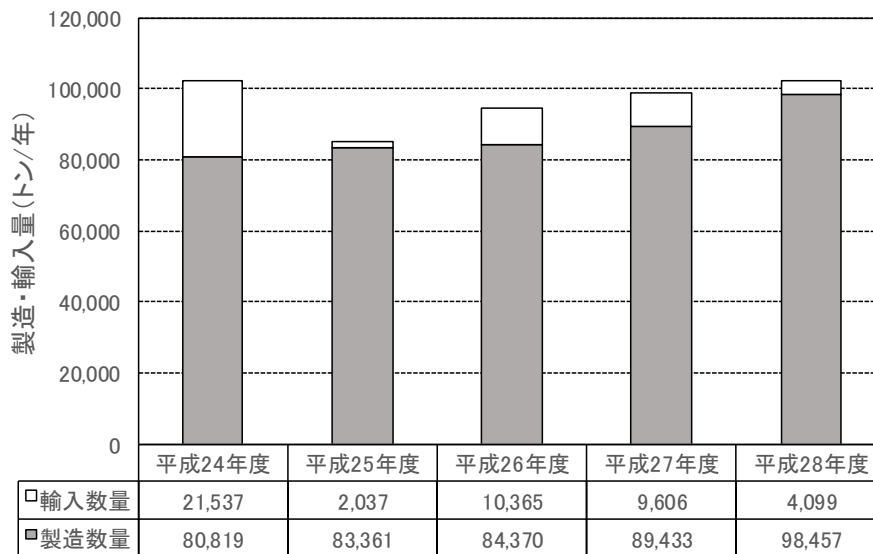


図 1 化審法届出情報

11
12

1
2

表 4 化審法届出情報に基づく評価Ⅱに用いる出荷数量と推計排出量

| 用途番号- 詳細用途 番号 | 用途分類 | 詳細用途分類 | 平成 28 年度 | |
|---------------------|--|-----------------------------------|----------------|--|
| | | | 出荷数量 (トン/年) | 推計排出量 (トン/年) ※()は、うち水域 への排出量 |
| | 製造 | | | 0.00015 (0.00010) |
| 01-a | 中間物 | 合成原料、重合原料、前駆重 合体 | 46,625 | 49(2.3) |
| 02-a | 塗料用・ワニス用・コーティング 剤用・印刷インキ用・複写用・殺 生物剤用溶剤 | 塗料用溶剤、塗料希釈剤 | 1,912 | 1,700(0.067) |
| 02-c | 塗料用・ワニス用・コーティング 剤用・印刷インキ用・複写用・殺 生物剤用溶剤 | ワニス用溶剤 | 1 | 0.9(0.000035) |
| 03-a | 接着剤用・粘着剤用・シーリン グ材用溶剤 | 接着剤用溶剤、粘着剤用溶剤 | 446 | 400(0.033) |
| 03-c | 接着剤用・粘着剤用・シーリン グ材用溶剤 | 接着用溶剤 | 1 | 0.9(0.000075) |
| 04-z | 金属洗浄用溶剤 | その他 | 134 | 2(0.0047) |
| 07-a | 工業用溶剤[#02-06 の溶剤を 除く] | 合成反應用溶剤 | 15,401 | 1,500(3.1) |
| 07-c | 工業用溶剤[#02-06 の溶剤を 除く] | 抽出溶剤、精製溶剤 | 3,911 | 1,600(0.78) |
| 07-d | 工業用溶剤[#02-06 の溶剤を 除く] | 希釈溶剤 | 1,761 | 1,300(0.35) |
| 08-z | エアゾール用溶剤 | その他 | 3 | 3(0) |
| 28-d※ | 合成ゴム、ゴム用添加剤、ゴム 用加工助剤[着色剤は#11] | 可塑剤、補強材(接着促進剤 等)、充填剤 | 81 | 10(8.9) |
| 47-a | 燃料、燃料添加剤 | 燃料 | 3 | 0.006(0.000006) |
| 47-c | 燃料、燃料添加剤 | 燃焼改良剤(燃焼促進剤、セタ ン価向上剤、アンチノック剤等) | 8,843 | 18(0.018) |
| 計 | | | 79,125 | 6700(16) |

3
4
5
6

※当該詳細用途番号における長期使用製品の使用段階からの推計排出量については、出荷先の事業者から企業秘密により排出実態の情報を得ることができなかつたため、化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表で定められた値(大気:0.01、水域:0.11)を用いて計算している。

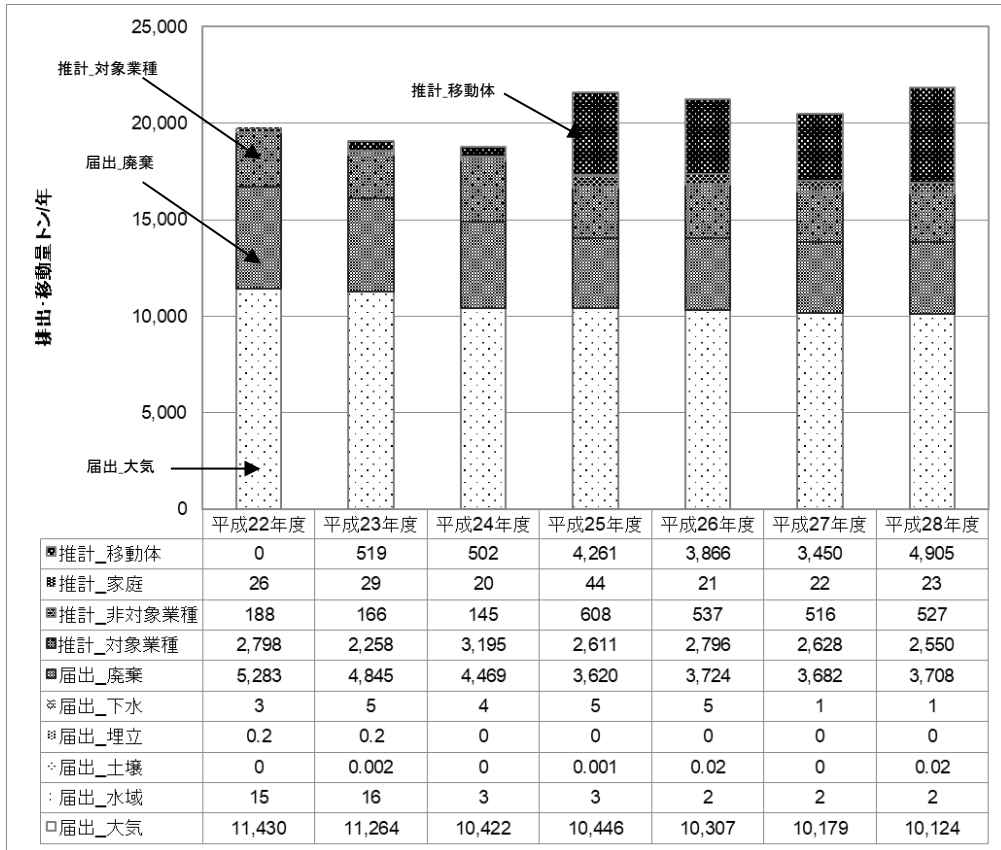


図 2 PRTR 制度に基づく排出・移動量の経年変化

表 5 PRTR 届出外排出量の内訳(平成 28 年度)

| | | 年間排出量(トン/年) | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-----|------------|-----------------|----|-----|-----|----|-------|----------|---------|--------|-------|-------|-----|-------|----|------|-----|----|----------|---------|--------|--------|-------|-------|
| | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 | 19 | 20 | 21 | 合計 | |
| | | 対象業種の事業者のすそ切り以下 | 農業 | 殺虫剤 | 接着剤 | 塗料 | 漁網防汚剤 | 洗浄剤・化粧品等 | 防虫剤・消臭剤 | 汎用エンジン | たばこの煙 | 自動車 | 二輪車 | 特殊自動車 | 船舶 | 鉄道車両 | 航空機 | 水道 | オゾン層破壊物質 | ダイオキシン類 | 低含有率物質 | 下水処理施設 | | |
| 大区分 | 移動体 | | | | | | | | | | | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | 4,905 | |
| | 家庭 | | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | | | | | | | | | ○ | ○ | ○ | | 23 | |
| | 非対象業種 | | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | | | | | | | | | | ○ | ○ | ○ | | 527 |
| | 対象業種(すそ切り) | ○ | ○ | | | | | | | | | | | | | | | | | ○ | ○ | ○ | ○ | 2,550 |
| 推計量 | | 2,545 | | | 117 | | | | | 433 | | 4,689 | | 216 | | | | | | | | | 5 | 8,004 |

1 4 有害性評価

2 本評価で用いた n-ヘキサン の生態影響に係る有害性情報は表 6～表 7 のとおり。

3
4

表 6 PNECwater 導出に利用可能な毒性値

| 栄養段階 (生物群) | 急性 | 慢性 | 毒性値 (mg/L) | 生物種 | | エンドポイント等 | | 暴露期間 | 出典 |
|------------------------------|----|----|---------------|--------------------------------|------------|------------------|------|------|-----|
| | | | | 種名 | 和名 | エンド ポイント | 影響内容 | | |
| 二次消費者 (又は捕食 者) (魚類) | ○ | | 2.5 | <i>Pimephales promelas</i> | ファットヘッドミノー | LC ₅₀ | MOR | 4 日 | 【1】 |

5 【エンドポイント】
6 LC₅₀ (Median Lethal Concentration) : 半数致死濃度
7 【影響内容】
8 MOR (Mortality) : 死亡
9
10

11

表 7 有害性情報のまとめ

| | 水生生物 | 底生生物 |
|----------------------|--|---|
| PNEC | 0.00025 mg/L | 0.0042 mg/kg dwt |
| キースタディの毒性値 | 2.5 mg/L ^[1] | - |
| UFs | 10000 | - |
| (キースタディの エンドポイント) | 二次消費者 (魚類) の 96 時間半数 致死濃度 (LC ₅₀) | 水生生物に対する PNECwater と Koc から平衡分配法により求めた |

12
13
14

1 5 リスク推計結果の概要

2 5-1 排出源ごとの暴露シナリオによる評価

- 3 ・ PRTR 届出情報を用いて、排出源ごとの暴露シナリオの推計モデル (PRAS-NITE Ver. 1.1.2)
- 4 により評価を行った。結果を表 8 に示す。
- 5 ・ PRTR 届出情報を用いた結果では、水生生物及び底生生物に対するリスク懸念箇所はどちら
- 6 も 8 箇所であった。

7
8 **表 8 PRTR 情報に基づく生態に係るリスク推計結果**

| | リスク懸念箇所数 | 排出源の数 |
|-----------------|----------|---------|
| 水生生物に対するリスク推計結果 | 8 | 14,893* |
| 底生生物に対するリスク推計結果 | 8 | 14,893* |

9 ※事業者コード 5930 の燃料小売業の事業所を含む。含まない場合の総排出源数は 1,227 で懸念箇所数には変化なし。
 10 ※届出事業所に加えて、移動先の下水道終末処理施設も排出源として考慮した。Simple Treat での推計結果により
 11 下水処理場での大気への移行率は 66.9%、水域への移行率は 3.5%とした。
 12

13 5-2 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオによる評価

- 14 ・ PRTR 届出排出量、PRTR 届出外排出量及び化審法届出情報と排出係数から推計した排出量を用
- 15 いて、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオによる推計モデル (G-CIEMS) により、水質
- 16 及び底質濃度の計算を行い、水域及び底質における評価対象地点 3,705 流域のリスク推計を
- 17 行った。
- 18 ・ 化審法届出情報に基づく推計排出量 (H28 年度) のうち、長期使用製品の使用段階からの排出
- 19 量は、PRTR の排出量に含まれていないと考えられる。その推計排出量は PRTR の排出量と比
- 20 較して少なくないことから、本評価では、これらの推計排出量を人口に比例して 3 次メッシ
- 21 ュに割り当てて PRTR の排出量に加えて G-CIEMS の濃度推計に用いた。
- 22 ・ 推計結果は表 9 のとおり。この結果、PECwater/PNECwater 比 ≥ 1 となるのは 72 流域、
- 23 PECsediment/PNECsediment 比 ≥ 1 となるのは 7 流域であった。

24
25 **表 9 G-CIEMS による濃度推計結果に基づく PEC/PNEC 比区分別地点数**

| PEC/PNEC 比の区分 | 水生生物 | 底生生物 |
|--------------------------------|-------|-------|
| $1 \leq \text{PEC/PNEC}$ | 72 | 7 |
| $0.1 \leq \text{PEC/PNEC} < 1$ | 791 | 454 |
| $\text{PEC/PNEC} < 0.1$ | 2,842 | 3,244 |

- 26
- 27 ・ なお、n-ヘキサンのうち、PRTR 届出外推計における汎用エンジン、自動車 (ホットスタート)、
- 28 自動車 (コールドスタート) 及び特殊自動車からの排出量については化審法適用範囲外である
- 29 ことから、それら届出外推計排出量を除外して推計を行った。推計結果は表 10 の通り。この
- 30 結果、PECwater/PNECwater 比 ≥ 1 となるのは 72 流域、PECsediment/PNECsediment 比 ≥ 1 とな
- 31 るのは 7 流域であり、化審法適用範囲外を含めた場合と変わらなかった。

表 10 G-CIEMS による濃度推計結果に基づく PEC/PNEC 比区分別地点数
(化審法適用範囲のみ)

| PEC/PNEC 比の区分 | 水生生物 | 底生生物 |
|--------------------------------|-------|-------|
| $1 \leq \text{PEC/PNEC}$ | 72 | 7 |
| $0.1 \leq \text{PEC/PNEC} < 1$ | 791 | 454 |
| $\text{PEC/PNEC} < 0.1$ | 2,842 | 3,244 |

5-3 環境モニタリングデータによる評価

- 平成 30 年度の n ヘキサンに係る水質及び底質モニタリングデータを用いて PEC/PNEC 比を求めたところ、水質及び底質について $\text{PEC/PNEC} \geq 1$ となる地点はなかった(表 11)。

表 11 環境モニタリングに基づく PEC/PNEC 比区分別地点数

| PEC/PNEC 比の区分 | 水生生物 | 底生生物 |
|--------------------------------|------------------|------------------|
| $1 \leq \text{PEC/PNEC}$ | 0 | 0 |
| $0.1 \leq \text{PEC/PNEC} < 1$ | 0 | 20 ^{※1} |
| $\text{PEC/PNEC} < 0.1$ | 25 ^{※2} | 1 ^{※3} |

※1: うち 20 地点で検出下限値未滿。

※2: うち 23 地点で検出下限値未滿。

※3: うち 1 地点で検出下限値未滿。

6 追加調査が必要となる不確実性事項等

不確実性解析結果を表 12 に示す。

表 12 n-ヘキサンのリスク評価の不確実性解析結果

| 項目 | 不確実性の要因 | 調査の必要性 | 評価に有用な情報 | 理由 |
|--------------|--|--------|------------|---|
| i) 評価対象物質 | ・評価対象物質と性状等試験データ被験物質との不一致等 | なし | — | ・評価対象物質と性状等の被験物質は一致している。 |
| ii) 物理化学的性状等 | ・推計値しかない場合等のリスク推計結果への影響等 | なし | — | ・Koc と BCF が推計値だが、リスク推計結果に及ぼす影響は大きくないと考えられる。 |
| iii) PRTR 情報 | ・化審法対象物質と PRTR 対象物質との不一致 ・化審法届出情報と PRTR 届出情報との不一致 ・PRTR 届出情報を用いた推計 | あり | ・PRTR 排出実態 | ・対象物質は、化審法と PRTR で一致している。 ・PRTR 届出外推計排出量における、燃料燃焼に伴う排出(ホットスタート、コールドスタート、特殊自動車)は化審法の対象ではない。 ・PRTR 排出量における食料品製造業からの排出は食品衛生法の添加物にあたるため、化審法の対象ではない。 |

| 項目 | 不確実性の要因 | 調査の必要性 | 評価に有用な情報 | 理由 |
|--------------|---------------------------------|-----------------------|---|---|
| | モデルによる PEC と環境モニタリングによる測定結果の不整合 | | | <ul style="list-style-type: none"> 化審法届出情報には、化審法届出不要物質のガソリンに含まれる当該物質が入っていないが、PRTR 届出情報には、ガソリンに含まれる当該物質も入っている。 化審法届出情報と PRTR 届出情報では不一致が見られるものの、リスク推計結果に影響を与えていないと考えられた。 PRTR 排出量が最も多い地点の下流域において、推計モデルによる PEC と環境モニタリングによる測定結果が不整合であったため、一部不確実性を有している。 |
| iv) 有害性 | 3つの栄養段階の信頼できる毒性値の不足 | あり | <ul style="list-style-type: none"> PNEC 値算出に活用できる毒性値 | <ul style="list-style-type: none"> 魚類の急性毒性値のみで PNEC を算出していることから、UFs が 10,000 と大きく、不確実性を有している。 |
| v) 排出量推計 | 化審法届出情報に基づく排出量推計の排出シナリオと実態との乖離等 | なし | — | <ul style="list-style-type: none"> iii) から、PRTR 届出情報を用いた推計モデルによる PEC と環境モニタリングによる測定結果に不整合がある箇所はあるが、点源に関する個別具体的な情報を有している PRTR 情報を用いた結果を優先してよいと考えられる。 |
| vi) 暴露シナリオ | 暴露シナリオと実態との乖離等 | ➤ 排出源ごとの暴露シナリオ | | |
| | | あり | <ul style="list-style-type: none"> リスク懸念地点の河川流量 | <ul style="list-style-type: none"> 排出先の河川流量等に置き換えできなかったため、デフォルトの河川流量を用いてモデル推計しており、不確実性を有している。 |
| | | なし | <ul style="list-style-type: none"> 大気から水域への移動量 | <ul style="list-style-type: none"> モデル推計では媒体間移動を考慮していないが、対象物質は環境中でほとんどが大気に存在していることから、大気から水域へ移動する量は非常に少ないと考えられる。従って、更なる調査は不要と考えられた。 |
| | | あり | <ul style="list-style-type: none"> 水域から大気への揮発 | <ul style="list-style-type: none"> 対象物質は水域から大気へ一定量移動すると考えられるが、モデル推計では媒体間移動（水中からの揮発）を考慮しておらず、水中濃度を過大に評価する可能性があり、不確実性を有している。 |
| | | ➤ 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ | | |
| | | あり | <ul style="list-style-type: none"> 長期使用段階からの排出実態 | <ul style="list-style-type: none"> 28-d 用途の長期使用製品の使用段階からの排出実態については、出荷先の事業者から企業秘密に該当するため情報を得ることができなかった。そのため、化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表で定められた値（大気：0.01、水域：0.11）を用いている。モデル推計に長期使用段階由来の環境排出量を加えた場合と加えない場合で、濃度は 1.0～230 倍程度異なっており、リスク懸念箇所も水中濃度で 72 地点と 3 地点、底質中濃度で 7 地点と 2 地点である。必ずしも実際の排出実態を反映したリスク評価ができていないか不明であり、不確実性を有している。 |
| ➤ 環境モニタリング情報 | | | | |

| 項目 | 不確実性の要因 | 調査の必要性 | 評価に有用な情報 | 理由 |
|----|---------|--------|--|---|
| | | あり | <ul style="list-style-type: none"> モデルに基づくリスク懸念箇所の環境モニタリングデータ | <ul style="list-style-type: none"> 水質及び底質において、採用した平成 30 年度の環境モニタリング情報では、最大濃度でリスク懸念なしとなっている。 PRTR 届出事業所のうち、公共用水域への排出量の多い事業所の周辺の河川での測定結果がある。一方、モデル推計によるリスク懸念箇所の中には、周辺での環境モニタリングの測定結果が得られていない箇所もあるため、不確実性を有している。 |

(概要は以上。)

7 付属資料

7-1 化学物質のプロファイル

表 13 化審法に係る情報

| | |
|---|-------------------|
| 優先評価化学物質官報公示名称 | n-ヘキサン |
| 優先評価化学物質通し番号 | 3 |
| 優先評価化学物質指定官報公示日 | 平成 23 年 4 月 1 日 |
| 官報公示整理番号、官報公示名称 | 2-6 : n-ヘキサン |
| 関連する物質区分 | 既存化学物質、旧第二種監視化学物質 |
| 既存化学物質安全性点検結果(分解性・蓄積性) | 良分解性 |
| 既存化学物質安全性点検結果(人健康影響) | 未実施 |
| 既存化学物質安全性点検結果(生態影響) | 未実施 |
| 優先評価化学物質の製造数量等の届出に含まれる その他の物質 ^(注) | なし |

(注)「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について」の「2. 新規化学物質の製造又は輸入に係る届出関係」により新規化学物質としては取り扱わないものとしたもののうち、構造の一部に優先評価化学物質を有するもの(例:分子間化合物、ブロック重合体、グラフト重合体等)及び優先評価化学物質の構成部分を有するもの(例:付加塩、オニウム塩等)については、優先評価化学物質を含む混合物として取り扱うこととし、これらの製造等に関しては、優先評価化学物質として製造数量等届出する必要がある。(「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について」平成 23 年 3 月 31 日薬食発 0331 第 5 号、平成 23-03-29 製局第 3 号、環企発第 110331007 号)

表 14 国内におけるその他の関係法規制

| 国内における関係法規制 | 対象 |
|---|--------------------------|
| 特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律(化管法) (平成 21 年 10 月 1 日から施行) | ノルマル-ヘキサン : 第一種 1-392 |
| (旧)化管法 (平成 21 年 9 月 30 日まで) | — |
| 毒物及び劇物取締法 | — |
| 労働安全衛 製造等が禁止される有害物等 | — |
| 生法 製造の許可を受けるべき有害物 | — |

| 国内における関係法規制 | | 対象 |
|------------------------|-------------------------|--|
| | 名称等を表示し、又は通知すべき危険物及び有害物 | ヘキサン 表示の対象となる範囲(重量%) ≥ 1 通知の対象となる範囲(重量%) ≥ 0.1 別表第9の520 |
| | 危険物 | ノルマルヘキサン、エチレンオキシド、アセトン、ベンゼン、メチルエチルケトンその他の引火点が零下三〇度以上零度未満の物：引火性の物 4 |
| | 特定化学物質等 | — |
| | 鉛等/四アルキル鉛等 | — |
| | 有機溶剤等 | ノルマルヘキサン：第二種有機溶媒等 39 |
| | 作業環境評価基準で定める管理濃度 | ノルマルヘキサン 64 管理濃度：40 ppm |
| | 強い変異原性が認められた化学物質 | — |
| 化学兵器禁止法 | | — |
| オゾン層保護法 | | — |
| 環境基本法 | 大気汚染に係る環境基準 | |
| | 水質汚濁に係る環境基準 | 人の健康の保護に関する環境基準 |
| | | 生活環境の保全に関する環境基準 |
| | 地下水の水質汚濁に係る環境基準 | |
| | 土壌汚染に係る環境基準 | |
| 大気汚染防止法 | | ヘキサン(別名:n-ヘキサン):有害大気汚染物質 中環審第9次答申の207 |
| 水質汚濁防止法 | | — |
| 土壌汚染対策法 | | — |
| 有害物質を含有する家庭用品の規制に関する法律 | | — |

1 出典：(独)製品評価技術基盤機構,化学物質総合情報提供システム(NITE-CHRIP),
2 URL：https://www.nite.go.jp/chem/chrip/chrip_search/systemTop,
3 令和元年11月6日にCAS登録番号110-54-3で検索
4

5 7-2 暴露評価と各暴露シナリオでのリスク推計

6 7-2-1 環境媒体中の検出状況

7 (1) 水質モニタリングデータ

8
9
10

表 15 近年の水質モニタリングにおける最大濃度

| 期間 | モニタリング事業名 | 最大濃度 (mg/L) |
|----------|-----------|----------------|
| 平成 30 年度 | 黒本調査 | 0.000012 |

表 16 過去 10 年間の年度別水質モニタリング調査結果

| 年度 | モニタリング事業名 | 濃度範囲 (mg/L) | 検出下限値 (mg/L) | 検出地点数 | PEC/PNEC1 超過地点数 |
|----------|-----------|---|--|-------|--------------------|
| 平成 30 年度 | 黒本調査 | $<2.4 \times 10^{-6} \sim 1.2 \times 10^{-5}$ | $2.4 \times 10^{-6} \sim 1.0 \times 10^{-5}$ | 2/25 | 0 |

(2) 底質モニタリングデータ

表 17 近年の底質モニタリングにおける最大濃度

| 期間 | モニタリング事業名 | 最大濃度 (mg/kg-dwt) |
|----------|-----------|---------------------|
| 平成 30 年度 | 黒本調査 | <0.0011 |

表 18 過去 10 年間の年度別底質モニタリング調査結果

| 年度 | モニタリング事業名 | 濃度範囲 (mg/kg-dry) | 検出下限値 (mg/kg-dry) | 検出地点数 | PEC/PNEC1 超過地点数 |
|----------|-----------|---------------------|----------------------|-------|--------------------|
| 平成 30 年度 | 黒本調査 | <0.0011 | 0.00033~0.0011 | 0/21 | 0 |

7-2-2 排出源ごとの暴露シナリオによる暴露評価とリスク推計

(1) PRTR 情報に基づく評価

① PRTR 排出量

表 19 PRTR 届出事業所情報ごとの排出量
(上位 10 箇所(PEC/PNEC 順))

| No. | 都道府県 | 大気排出量 [t/year] | 水域排出量 [t/year] | 合計排出量 [t/year] | 業種名等 | 排出先水域名称 |
|-----|------|-------------------|-------------------|-------------------|---------------|---------|
| 1 | A県 | 0.92 | 0.61 | 1.5 | 化学工業 | A川 |
| 2 | B県 | 200 | 0.25 | 200 | パルプ・紙・紙加工品製造業 | B川 |
| 3 | C県 | 0 | 0.47 | 0.47 | 化学工業 | C海域 |
| 4 | A県 | 0.021 | 0.042 | 0.063 | 化学工業 | D川 |
| 5 | A県 | 0 | 0.036 | 0.036 | 医薬品製造業 | E川 |
| 6 | D県 | 160 | 0.34 | 160 | 化学工業 | F海域 |
| 7 | E県 | 2 | 0.26 | 2.3 | 医薬品製造業 | G海域 |
| 8 | B県 | 1.9 | 0.02 | 1.9 | 輸送用機械器具製造業 | H川 |
| 9 | F県 | 0.064 | 0.0084 | 0.072 | 化学工業 | I川 |
| 10 | G県 | 3.8 | 0.067 | 3.9 | 倉庫業 | J海域 |

② リスク推計結果

表 20 PRTR 情報に基づく生態影響に係るリスク推計結果
(上位 10 箇所 PEC/PNEC 順)

| No. | 都道府県 | 業種名等 | 水域排出量 [t/year] | 水中濃度 [mg/L] | 底質中濃度 [mg/kg] | PNEC (水生生物) [mg/L] | PNEC (底生生物) [mg/kg] | PEC/PNEC (水生生物) | PEC/PNEC (底生生物) |
|-----|------|---------------|-------------------|----------------------|----------------------|--------------------------|---------------------------|--------------------|--------------------|
| 1 | A県 | 化学工業 | 0.61 | 7.7×10^{-3} | 1.3×10^{-1} | 0.00025 | 0.0042 | 31 | 31 |
| 2 | B県 | パルプ・紙・紙加工品製造業 | 0.25 | 3.2×10^{-3} | 5.3×10^{-2} | 0.00025 | 0.0042 | 13 | 13 |
| 3 | C県 | 化学工業 | 0.47 | 6.0×10^{-4} | 1.0×10^{-2} | 0.00025 | 0.0042 | 2.4 | 2.4 |
| 4 | A県 | 化学工業 | 0.042 | 5.3×10^{-4} | 8.9×10^{-3} | 0.00025 | 0.0042 | 2.1 | 2.1 |
| 5 | A県 | 医薬品製造業 | 0.036 | 4.5×10^{-4} | 7.6×10^{-3} | 0.00025 | 0.0042 | 1.8 | 1.8 |
| 6 | D県 | 化学工業 | 0.34 | 4.3×10^{-4} | 7.2×10^{-3} | 0.00025 | 0.0042 | 1.7 | 1.7 |
| 7 | E県 | 医薬品製造業 | 0.26 | 3.3×10^{-4} | 5.5×10^{-3} | 0.00025 | 0.0042 | 1.3 | 1.3 |
| 8 | B県 | 輸送用機械器具製造業 | 0.02 | 2.5×10^{-4} | 4.2×10^{-3} | 0.00025 | 0.0042 | 1 | 1 |
| 9 | F県 | 化学工業 | 0.0084 | 1.1×10^{-4} | 1.8×10^{-3} | 0.00025 | 0.0042 | 0.42 | 0.42 |
| 10 | G県 | 倉庫業 | 0.067 | 8.5×10^{-5} | 1.4×10^{-3} | 0.00025 | 0.0042 | 0.34 | 0.34 |

7-2-3 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおける暴露評価とリスク推計

(1) 環境中濃度等の空間的分布の推計 (PRTR 情報の利用)

① 推計条件

表 21 G-CIEMS の計算に必要なデータのまとめ

| 項目 | 単位 | 採用値 | 詳細 |
|------------------------------|------------------------|-----------------------|-------------------------------|
| 分子量 | — | 86.17 | — |
| ヘンリー係数 | Pa・m ³ /mol | 1.78×10^5 | 25°C 温度補正值 |
| 水溶解度 | mol/m ³ | 17.3 | 25°C 温度補正值 |
| 蒸気圧 | Pa | 2.29×10^4 | 25°C 温度補正值 |
| オクタノールと水との間の分配係数 (logKow) | — | 3.9 | 測定値 |
| 有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc) | L/kg | 132 | KOCWIN による推計値 (MCI 法) |
| 大気中分解速度定数 (ガス) | s ⁻¹ | 2.61×10^{-6} | 大気における機序別分解半減期の総括値 3.1 日の換算値 |
| 大気中分解速度定数 (粒子) | s ⁻¹ | 2.61×10^{-6} | 大気における機序別分解半減期の総括値 3.1 日の換算値 |
| 水中分解速度定数 (溶液) | s ⁻¹ | 1.60×10^{-6} | 水中における機序別分解半減期の総括値 5.0 日の換算値 |
| 水中分解速度定数 (懸濁粒子) | s ⁻¹ | 1.60×10^{-6} | 水中における機序別分解半減期の総括値 5.0 日の換算値 |
| 土壌中分解速度定数 | s ⁻¹ | 1.60×10^{-6} | 土壌中における機序別分解半減期の総括値 5.0 日の換算値 |
| 底質中分解速度定数 | s ⁻¹ | 4.01×10^{-7} | 底質中における機序別分解半減期の総括値 20 日の換算値 |
| 植生中分解速度定数 | s ⁻¹ | 2.61×10^{-6} | 大気における機序別分解半減期の総括値 3.1 日の換算値 |
| BCF | L/kg | 174 | BCFBAF による推計値 |

表 22 PRTR 排出量情報 (平成 28 年度) の全国排出量の内訳

| データ使用年度 | 平成 28 年実績 |
|---------|---|
| 排出量 | 全推計分の排出量を以下に示す。 ○届出推計量 : 10,172,063 kg/年 G-CIEMS 用大気排出量 : 10169828.9 kg/年 |

| | |
|--|---|
| | G-CIEMS 用水域排出量： 2,212 kg/年 G-CIEMS 用土壌排出量： 22 kg/年 ※ただし、一部沿岸域でG-CIEMSの水域に対応付かない排出が1,239kgある。 ○届出外推計量：8,004,474 kg/年 <PRTR 届出外排出量の全量を含める場合> G-CIEMS 用大気排出量：8,003,940 kg/年 G-CIEMS 用水域排出量：534 kg/年 ※ただし、一部沿岸域でG-CIEMSの水域に対応付かない排出が24kgある。 <PRTR 届出外排出量のうち化審法除外用途※を含めない場合> G-CIEMS 用大気排出量：3,329,002 kg/年 G-CIEMS 用水域排出量：534 kg/年 ※ただし、一部沿岸域でG-CIEMSの水域に対応付かない排出が24kgある。 |
|--|---|

1 ※汎用エンジン、自動車（ホットスタート）、自動車（コールドスタート）及び特殊自動車からの排出量

2
3
4

表 23 PRTR 排出量に加えて評価に用いる化審法届出情報に基づく推計排出量

| | |
|-----|---|
| 排出量 | ○化審法長期使用用途排出量：9,686 kg/年 G-CIEMS 用大気排出量：807 kg/年 G-CIEMS 用水域排出量：8,879 kg/年 ※ただし、一部沿岸域でG-CIEMSの水域に対応付かない排出が341kgある。 |
|-----|---|

5
6
7
8
9

②環境中濃度の推計結果

表 24 G-CIEMS の評価対象地点における水質濃度、底質濃度及び PEC/PNEC 比

| パー セン タイ ル | 順位 | 水生生物 | | | 底生生物 | | |
|---------------------|------|------------------------------|----------------------|---------------------------------|---------------------------------|----------------------------|-----------------------------|
| | | PECwater (水質濃度) [mg/L] | PNECwater [mg/L] | PECwater /PNECwater 比 [-] | PECsed (底質濃度) [mg/kg-dry] | PNECsed [mg/kg- dry] | PECsed /PNECsed 比 [-] |
| 0 | 1 | 4.9×10^{-11} | 2.5×10^{-4} | 2.0×10^{-07} | 3.3×10^{-10} | 4.2×10^{-3} | 7.9×10^{-08} |
| 0.1 | 4 | 1.8×10^{-10} | 2.5×10^{-4} | 7.2×10^{-07} | 1.2×10^{-09} | 4.2×10^{-3} | 2.9×10^{-07} |
| 1 | 37 | 1.1×10^{-09} | 2.5×10^{-4} | 4.3×10^{-06} | 7.3×10^{-09} | 4.2×10^{-3} | 1.7×10^{-06} |
| 5 | 185 | 5.6×10^{-08} | 2.5×10^{-4} | 2.2×10^{-04} | 3.8×10^{-07} | 4.2×10^{-3} | 9.0×10^{-05} |
| 10 | 371 | 2.5×10^{-07} | 2.5×10^{-4} | 9.9×10^{-04} | 1.7×10^{-06} | 4.2×10^{-3} | 4.0×10^{-04} |
| 25 | 926 | 1.1×10^{-06} | 2.5×10^{-4} | 4.4×10^{-03} | 7.4×10^{-06} | 4.2×10^{-3} | 1.8×10^{-03} |
| 50 | 1853 | 5.0×10^{-06} | 2.5×10^{-4} | 2.0×10^{-02} | 3.4×10^{-05} | 4.2×10^{-3} | 8.0×10^{-03} |
| 75 | 2779 | 2.3×10^{-05} | 2.5×10^{-4} | 9.2×10^{-02} | 1.6×10^{-04} | 4.2×10^{-3} | 3.7×10^{-02} |
| 90 | 3335 | 7.7×10^{-05} | 2.5×10^{-4} | 0.31 | 5.2×10^{-04} | 4.2×10^{-3} | 0.12 |
| 95 | 3520 | 1.4×10^{-04} | 2.5×10^{-4} | 0.54 | 9.2×10^{-04} | 4.2×10^{-3} | 0.22 |
| 99 | 3668 | 3.5×10^{-04} | 2.5×10^{-4} | 1.4 | 2.4×10^{-03} | 4.2×10^{-3} | 0.57 |
| 99.9 | 3701 | 7.0×10^{-04} | 2.5×10^{-4} | 2.8 | 4.8×10^{-03} | 4.2×10^{-3} | 1.1 |
| 99.92 | 3702 | 7.7×10^{-04} | 2.5×10^{-4} | 3.1 | 5.2×10^{-03} | 4.2×10^{-3} | 1.2 |
| 99.95 | 3703 | 9.3×10^{-04} | 2.5×10^{-4} | 3.7 | 6.3×10^{-03} | 4.2×10^{-3} | 1.5 |
| 99.97 | 3704 | 9.8×10^{-04} | 2.5×10^{-4} | 3.9 | 6.6×10^{-03} | 4.2×10^{-3} | 1.6 |
| 100 | 3705 | 1.9×10^{-02} | 2.5×10^{-4} | 77 | 0.13 | 4.2×10^{-3} | 31 |

10 ※PEC/PNEC 比の項目中の網掛けのセルは 0.1 以上 1 未満、白抜きセルは 1 以上を表す

11
12
13

表 25 G-CIEMS の評価対象地点における水質濃度、底質濃度及び PEC/PNEC 比
(化審法適用範囲のみ)

| パー セン タイ ル | 順位 | 水生生物 | | | 底生生物 | | |
|---------------------|-----|------------------------------|----------------------|---------------------------------|---------------------------------|----------------------------|-----------------------------|
| | | PECwater (水質濃度) [mg/L] | PNECwater [mg/L] | PECwater /PNECwater 比 [-] | PECsed (底質濃度) [mg/kg-dry] | PNECsed [mg/kg- dry] | PECsed /PNECsed 比 [-] |
| 0 | 1 | 2.0×10^{-11} | 2.5×10^{-4} | 2.0×10^{-07} | 1.4×10^{-10} | 4.2×10^{-3} | 3.2×10^{-08} |
| 0.1 | 4 | 1.6×10^{-10} | 2.5×10^{-4} | 7.2×10^{-07} | 1.1×10^{-09} | 4.2×10^{-3} | 2.5×10^{-07} |
| 1 | 37 | 8.5×10^{-10} | 2.5×10^{-4} | 4.3×10^{-06} | 5.7×10^{-09} | 4.2×10^{-3} | 1.4×10^{-06} |
| 5 | 185 | 5.5×10^{-08} | 2.5×10^{-4} | 2.2×10^{-04} | 3.7×10^{-07} | 4.2×10^{-3} | 8.8×10^{-05} |
| 10 | 371 | 2.5×10^{-07} | 2.5×10^{-4} | 9.9×10^{-04} | 1.7×10^{-06} | 4.2×10^{-3} | 4.0×10^{-04} |

| | | | | | | | |
|-------|------|-----------------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|-----------------------|
| 25 | 926 | 1.1×10^{-06} | 2.5×10^{-4} | 4.4×10^{-03} | 7.4×10^{-06} | 4.2×10^{-3} | 1.8×10^{-03} |
| 50 | 1853 | 5.0×10^{-06} | 2.5×10^{-4} | 2.0×10^{-02} | 3.4×10^{-05} | 4.2×10^{-3} | 8.0×10^{-03} |
| 75 | 2779 | 2.3×10^{-05} | 2.5×10^{-4} | 9.2×10^{-02} | 1.6×10^{-04} | 4.2×10^{-3} | 3.7×10^{-02} |
| 90 | 3335 | 7.7×10^{-05} | 2.5×10^{-4} | 0.31 | 5.2×10^{-04} | 4.2×10^{-3} | 0.12 |
| 95 | 3520 | 1.4×10^{-04} | 2.5×10^{-4} | 0.54 | 9.2×10^{-04} | 4.2×10^{-3} | 0.22 |
| 99 | 3668 | 3.5×10^{-04} | 2.5×10^{-4} | 1.4 | 2.4×10^{-03} | 4.2×10^{-3} | 0.57 |
| 99.9 | 3701 | 7.0×10^{-04} | 2.5×10^{-4} | 2.8 | 4.8×10^{-03} | 4.2×10^{-3} | 1.1 |
| 99.92 | 3702 | 7.7×10^{-04} | 2.5×10^{-4} | 3.1 | 5.2×10^{-03} | 4.2×10^{-3} | 1.2 |
| 99.95 | 3703 | 9.3×10^{-04} | 2.5×10^{-4} | 3.7 | 6.3×10^{-03} | 4.2×10^{-3} | 1.5 |
| 99.97 | 3704 | 9.8×10^{-04} | 2.5×10^{-4} | 3.9 | 6.6×10^{-03} | 4.2×10^{-3} | 1.6 |
| 100 | 3705 | 0.013 | 2.5×10^{-4} | 77 | 0.13 | 4.2×10^{-3} | 31 |

※PEC/PNEC 比の項目中の網掛けのセルは 0.1 以上 1 未満、白抜きセルは 1 以上を表す

③環境中分配比率等の推計結果

表 26 環境中の排出先比率と G-CIEMS で計算された環境中分配比率

| | | PRTR 排出量+ 化審法長期使用用途排出量 | PRTR 排出量(化審法適用範囲のみ)+ 化審法長期使用用途排出量 |
|-------------|----|---------------------------|--------------------------------------|
| 排出先 比率 | 大気 | 100% | 100% |
| | 水域 | <1% | <1% |
| | 土壌 | <1% | <1% |
| 環境中 分配比率 | 大気 | 100% | 100% |
| | 水域 | <1% | <1% |
| | 土壌 | <1% | <1% |
| | 底質 | 100% | 100% |

7-3 参照した技術ガイダンス

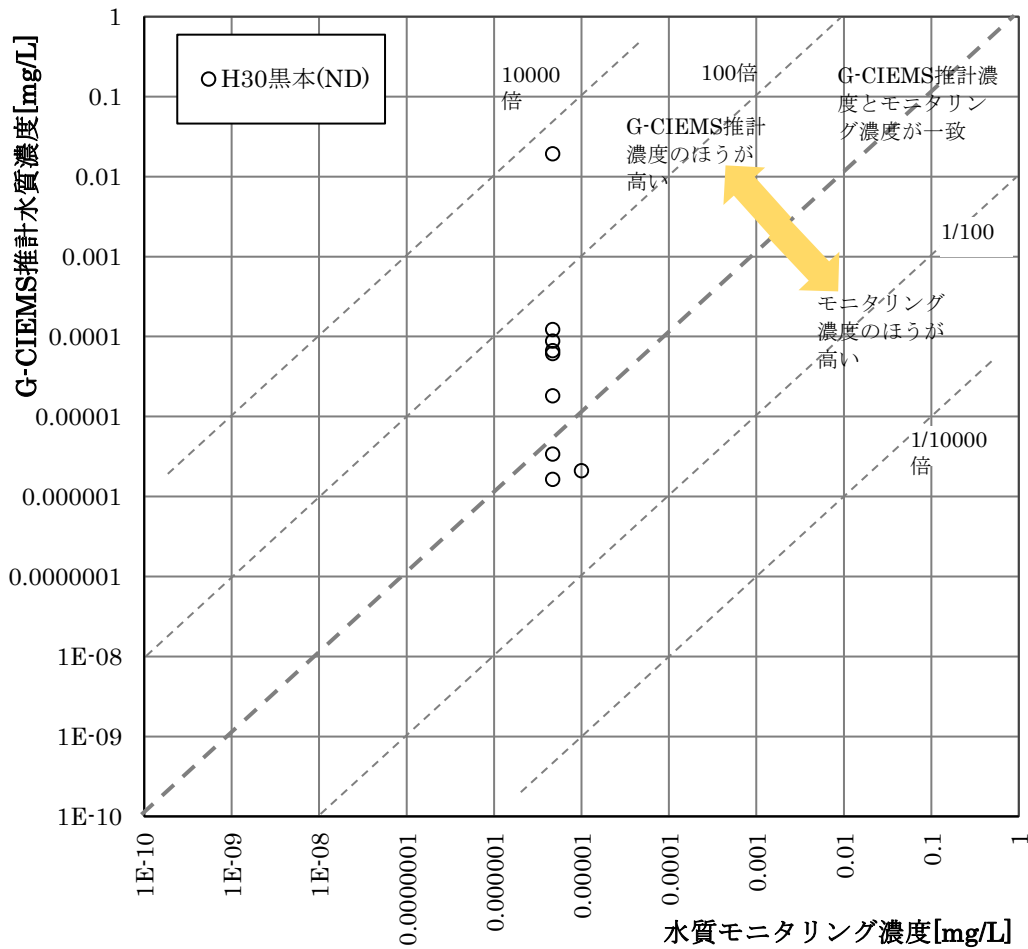
表 27 参照した技術ガイダンスのバージョン一覧

| 章 | タイトル | バージョン |
|------|---------------------------|-------|
| - | 導入編 | 1.0 |
| I | 評価の準備 | 1.0 |
| II | 人健康影響の有害性評価 | 1.1 |
| III | 生態影響の有害性評価 | 1.0 |
| IV | 排出量推計 | 1.1 |
| V | 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～ | 1.0 |
| VI | 暴露評価～用途等に応じた暴露シナリオ～ | 1.0 |
| VII | 暴露評価～様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ～ | 1.0 |
| VIII | 環境モニタリング情報を用いた暴露評価 | 1.0 |
| IX | リスク推計・優先順位付け・とりまとめ | 1.1 |

1 7-4 環境モニタリングデータとモデル推計結果の比較解析

2 7-4-1 地点別のモニタリング濃度と G-CIEMS のモデル推計濃度との比較

3



4
5
6
7

図 3 G-CIEMS 推計水質濃度 (PRTR 及び化審法長期使用用途排出量、平成 28 年度) と水質モニタリング濃度 (黒本調査平成 30 年度) の比較

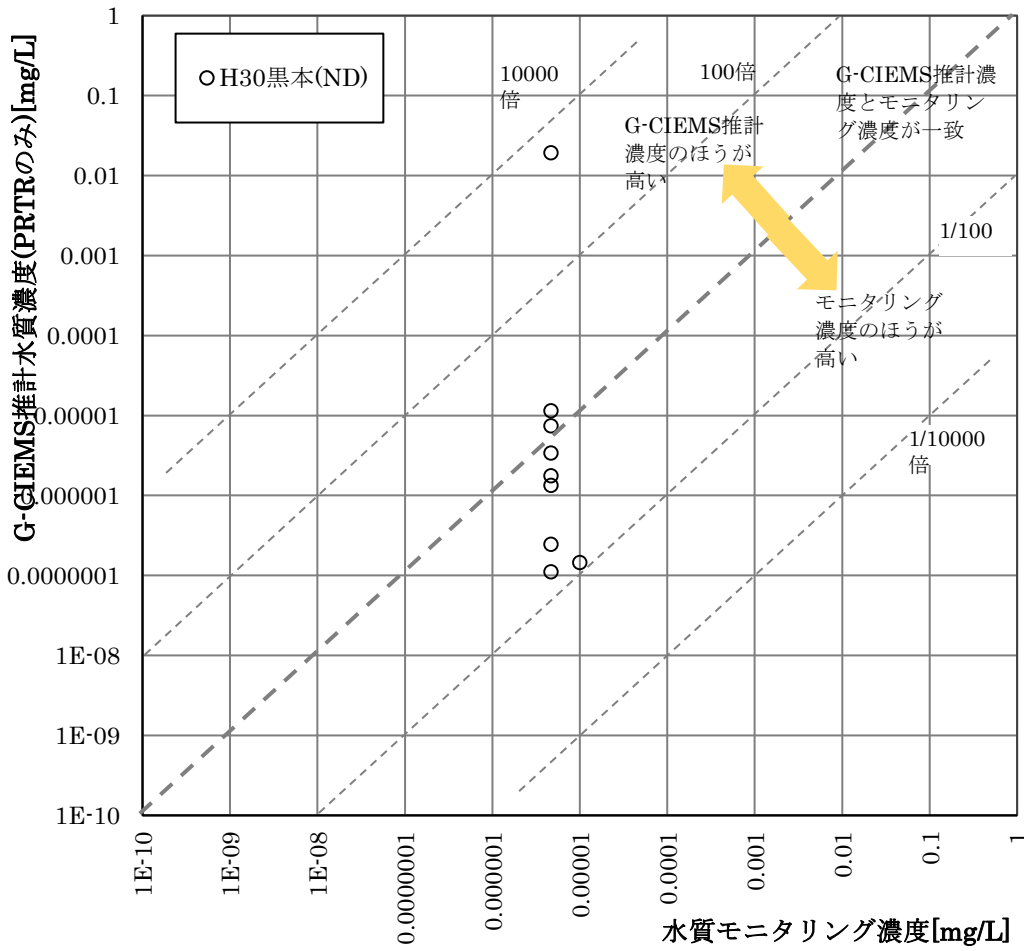


図 4 G-CIEMS 推計水質濃度 (PRTR 排出量のみ、平成 28 年度) と水質モニタリング濃度 (黒本調査平成 30 年度) の比較

1
2
3
4
5
6

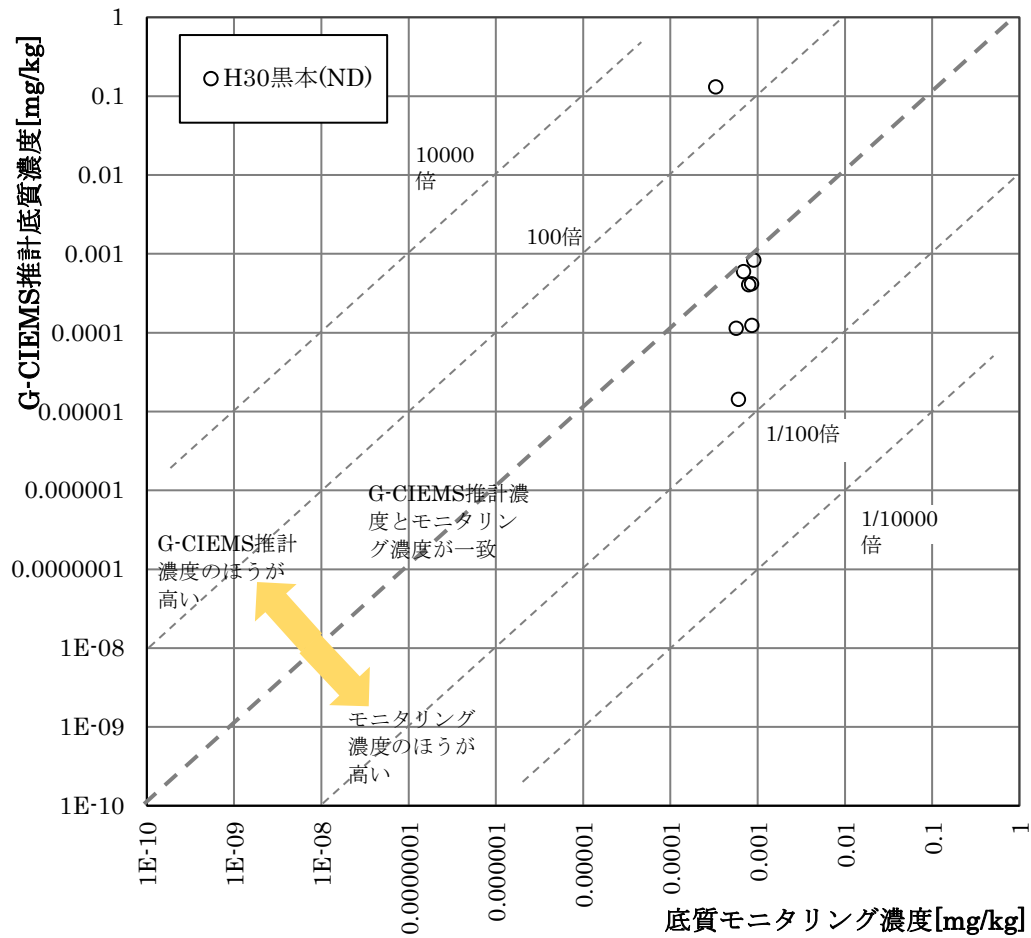
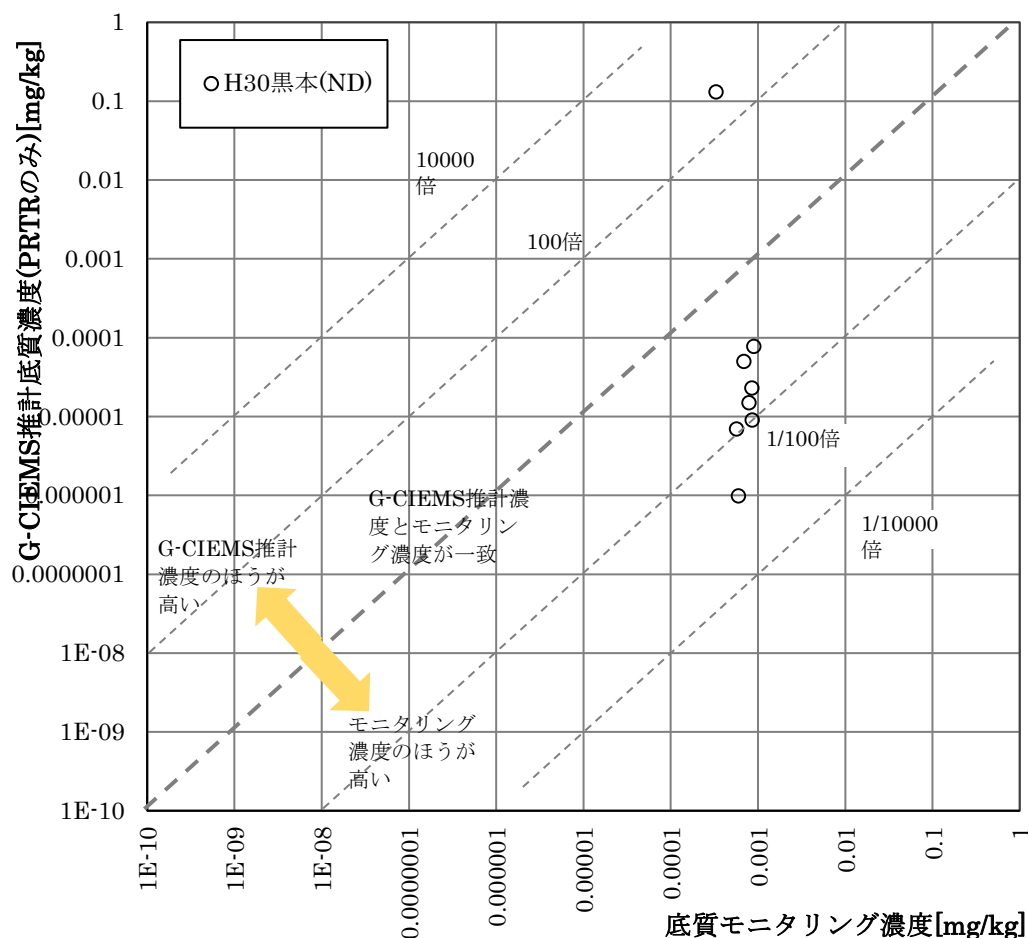


図 5 G-CIEMS 推計底質濃度(PRTR 及び化審法長期使用用途排出量、平成 28 年度)と底質モニタリング濃度(黒本調査平成 30 年度)の比較

1
2
3
4
5



1
2 **図 6 G-CIEMS 推計底質濃度(PRTR のみ、平成 28 年度)と底質モニタリング濃度(黒本調査平成 30**
3 **年度)の比較**

4
5 7-5 選択した物理化学的性状等の出典

6 ATSDR (1999): Agency for Toxic Substances and Disease Registry. "Toxicological Profile
7 n-Hexane", Toxicological Profiles. 1999.

8 CCD (2007): Richard J. Lewis Sr., Gessner Goodrich Hawley. Hawley's Condensed Chemical
9 Dictionary. 15th ed., 2007.

10 CRC: Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 94th ed., CRC Press,
11 2013-2014. EHC (1991): ENVIRONMENTAL HEALTH CRITERIA 122, n-Hexane,
12 International Programme on Chemical Safety

13 EPI Suite (2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11, 2012.

14 Hefer, G. T. (1986) Solubility System: Hexane with Water. IUPAC-NIST Solubility Database.
15 https://srdata.nist.gov/solubility/sol_detail.aspx?sysID=37_252;
16 https://srdata.nist.gov/solubility/IUPAC/SDS-37/SDS-37-pages_314.pdf (2017-03-03 閲覧)

17 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. [http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB)
18 [bin/sis/htmlgen?HSDB](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB), (2017-03-03 閲覧).

19 Mackay (2006): Mackay, D., Shiu, W. Y., Ma, K. C., & Lee, S. C. Handbook of physical-
20 chemical properties and environmental fate for organic chemicals. 2nd ed., CRC press, 2006.

- 1 MHLW, METI, MOE (2014): 化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイ
2 ダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.
- 3 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-03-07 閲覧).
- 4 環境省 (2002): 化学物質の環境リスク評価 第1巻, n-ヘキサン (平成14年3月)
- 5 通商産業省 (1996):
- 6 平成7年度化学物質安全対策費補助事業に係る安全性試験結果報告書, ヘキサン
- 7
- 8 7-6 選択した有害性情報の出典
- 9 【1】 Geiger, D.L., L.T. Brooke, and D.J. Call (1990): Acute Toxicities of Organic Chemicals to
10 Fathead Minnows (*Pimephales promelas*), Volume 5. Ctr. for Lake Superior Environ. Stud.,
11 Univ. of Wisconsin-Superior, Superior, WI: 332 p. (ECOTOX no. 3217)
- 12