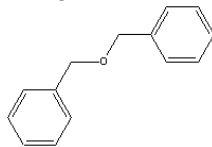


[14] ジベンジルエーテル

1. 物質に関する基本的事項

(1) 分子式・分子量・構造式

物質名：ジベンジルエーテル
(別の呼称：ベンジルエーテル)
CAS 番号：103-50-4
化審法官報告示整理番号：3-1082
化管法政令番号：2-41
RTECS 番号：DQ6125000
分子式：C₁₄H₁₄O
分子量：198.25
換算係数：1ppm=8.10mg/m³(気体、25℃)
構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色透明な¹⁾油状液体で²⁾、刺激性がある³⁾。弱いアニス様の甘い香気を有する合成香料である¹⁾。

融点	3.6℃ ⁴⁾
沸点	298℃ ⁴⁾
密度	1.043 g/cm ³ (20℃) ⁴⁾
蒸気圧	1.03 × 10 ⁻³ mmHg(=1.37 × 10 ⁻¹ Pa) (25℃) ⁵⁾
分配係数(1-オクタノール/水)(logKow)	3.31 ⁶⁾
解離定数(pKa)	
水溶性(水溶解度)	40mg/L(35℃) ⁵⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

ジベンジルエーテルの分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性

好氣的分解

分解率：BOD 0%、HPLC 7% (試験期間：2週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L)⁷⁾

化学分解性

OHラジカルとの反応性(大気中)

反応速度定数：2.11 × 10⁻¹¹ cm³/(分子・sec) (25℃、AOPWIN⁸⁾により計算)

半減期：3.0～30時間 (OHラジカル濃度を3 × 10⁶～3 × 10⁵ 分子/cm³⁹⁾と仮定して計算)

生物濃縮性(濃縮性がない又は低いと判断される物質¹⁰⁾)

生物濃縮係数(BCF)：171～429(試験期間：8週間、試験濃度：0.2mg/L)⁷⁾、187～345(試

験期間：8週間、試験濃度：0.02mg/L) ⁷⁾

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の化学物質排出把握管理促進法（化管法）の製造・輸入量区分は10tである。

② 用途

本物質の主な用途は、染色キャリアー、香料、溶剤とされている¹¹⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

化学物質排出把握管理促進法第二種指定化学物質（政令番号：41）として指定されているほか、水質汚濁に係る要調査項目として選定されている。

2. 暴露評価

生態リスクの初期評価のため、水生生物の生存・生育を確保する観点から、実測データをもとに一般環境等からの暴露を評価することとし、安全側に立った評価の観点から高濃度側のデータによって暴露評価を行った。データの信頼性を確認した上で最大濃度を評価に用いている。

(1) 環境中への排出量

ジベンジルエーテルは化学物質排出把握管理促進法（化管法）第一種指定化学物質ではないため、排出量及び移動量は得られなかった。

(2) 媒体別分配割合の予測

PRTR データが得られなかったため、Level III Fugacity Model¹⁾による媒体別分配割合予測の結果²⁾を表 2.1 に示す。

表 2.1 Level III Fugacity Model による媒体別分配割合（％）

排出先	大気	水	土壌	大気/水/土壌
排出速度 (kg/時間)	1000	1000	1000	1000 (各々)
大気	72.7	0.1	0.0	1.7
水	12.7	98.2	0.4	38.5
土壌	14.3	0.0	99.6	59.1
底質	0.2	1.7	0.0	0.7

(注) 環境中で各媒体別に最終的に分配される割合を質量比として示したもの。

(3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の水質及び底質中の濃度について情報の整理を行った。各媒体でのデータの信頼性が確認された調査例のうち、より広範囲の地域で調査が実施されたものを抽出した結果を表 2.2 に示す。

表 2.2 水質及び底質中の存在状況

媒体	幾何 平均値	算術 平均値	最小値	最大値	検出 下限値	検出率	調査 地域	測定年	文献
公共用水域・淡水 $\mu\text{g/L}$	<0.03	<0.03	<0.005	<0.03 ¹⁾	0.005～ 0.03	1/2	神奈川県、 新潟県	1984	3
公共用水域・海水 $\mu\text{g/L}$	<0.03	<0.03	<0.005	<0.03	0.005～ 0.03	0/5	全国	1984	3
底質(公共用水域・淡水) $\mu\text{g/g}$	<0.0066	<0.0066	<0.0005	<0.0066 ²⁾	0.0005～ 0.0066	1/2	神奈川県、 新潟県	1984	3
底質(公共用水域・海水) $\mu\text{g/g}$	<0.0066	<0.0066	<0.0005	<0.0066 ³⁾	0.0005～ 0.0066	2/5	全国	1984	3

注：1) 検出値として $0.006 \mu\text{g/L}$ が報告されているが、不検出データの検出下限値が検出データを大きく上回るため、不検出データの最大検出下限値未満をもって最大値とした。

2) 検出値として $0.0007 \mu\text{g/g}$ が得られているが、不検出データの検出下限値がこの値より大きく上回るため、

不検出データの最大検出下限値未満をもって最大値とした。

- 3) 検出値として最大 $0.0026 \mu\text{g/g}$ が得られているが、不検出データの検出下限値がこの値より大きく上回るため、不検出データの最大検出下限値未満をもって最大値とした。

(4) 水生生物に対する暴露の推定（水質に係る予測環境中濃度：PEC）

本物質の水生生物に対する暴露の推定の観点から、水質中濃度を表 2.3 のように整理した。水質、底質ともに現時点の生態リスク評価に耐えるデータは得られなかった。

表 2.3 公共用水域濃度

媒体	平均	最大値
水質 公共用水域・淡水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった (過去には最大値として $0.006\mu\text{g/L}$ が検出されている (1984))
公共用水域・海水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった

注) 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。

3. 生態リスクの初期評価

生態リスクの初期評価として、水生生物に対する化学物質の影響についてのリスク評価を行った。

(1) 生態毒性の概要

本物質の水生生物に対する影響濃度に関する知見の収集を行い、その信頼性を確認したもののについて生物群、毒性分類別に整理すると表 3.1 のとおりとなる。

表 3.1 生態毒性の概要

生物種	急性	慢性	毒性値 [μg/L]	生物名	生物分類	エンドポイント/ 影響内容	暴露期間 [日]	信頼性			Ref. No.
								a	b	c	
藻類		○	320	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO (AUG)	3		○		1)
		○	1,000	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO (RATE)*	3		○		1)
	○		1,600	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (AUG)	3		○		1)
	○		4,100	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (RATE)*	3		○		1)
甲殻類		○	98	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21		○		1)
	○		770	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2		○		1)
魚類	○		6,800	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4		○		1)
その他	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—

太字の毒性値は、PNEC 算出の際に参照した知見として本文で言及したもの、下線を付した毒性値は PNEC 算出の根拠として採用されたものを示す。

信頼性) a : 毒性値は信頼できる値である、b : ある程度信頼できる値である、c : 毒性値の信頼性は低いあるいは不明
 エンドポイント) EC₅₀ (Median Effective Concentration) : 半数影響濃度、LC₅₀ (Median Lethal Concentration) : 半数致死濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration) : 無影響濃度

影響内容) GRO (Growth) : 生長 (植物)、成長 (動物)、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、RATE: 生長速度、REP (Reproduction) : 繁殖、再生産

() 内) 試験結果の算出法: AUG (Area Under Growth Curve) 生長曲線下の面積により求めた結果、RATE 生長速度より求めた結果

*) : 文献 1) をもとに、試験時の設定濃度を用いて 0-48 時間の毒性値を再計算したもの²⁾。

なお、文献 1) の試験では界面活性作用のある分散剤を使用していることから、信頼性は b とした。

(2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて、信頼できる知見のうち生物群ごとに値の最も低いものを整理し、そのうち最も低い値に対して情報量に応じたアセスメント係数を適用することにより、予測無影響濃度 (PNEC) を求めた。

急性毒性値については、藻類では *Pseudokirchneriella subcapitata* に対する生長阻害の速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 4,100 μg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する遊泳阻害の 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 770 μg/L、魚類では *Oryzias latipes* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 6,800 μg/L であった。急性毒性値について 3 生物群 (藻類、甲殻類及び魚類) の信頼できる知見が得られたため、アセスメント係数として 100 を用いることとし、上記の毒性値のうち最も小さい値 (甲殻類の 770 μg/L) にこれを適用することにより、急性毒性値による PNEC として 7.7 μg/L が得られた。

慢性毒性値については、藻類では *Pseudokirchneriella subcapitata* に対する生長阻害の速度法による 72 時間無影響濃度 (NOEC) が 1,000 µg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する繁殖阻害の 21 日間無影響濃度 (NOEC) が 98 µg/L であった。慢性毒性値について 2 生物群 (藻類及び甲殻類) の信頼できる知見が得られたため、アセスメント係数として 100 を用いることとし、上記の毒性値のうち最も小さい値 (甲殻類の 98 µg/L) にこれを適用することにより、慢性毒性値による PNEC として 0.98 µg/L が得られた。

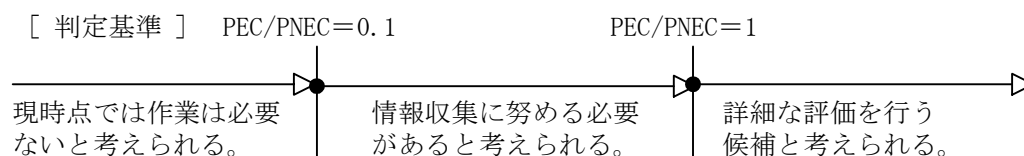
本物質の PNEC としては、甲殻類の慢性毒性値をアセスメント係数 100 で除した 0.98 µg/L を採用する。

(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

媒体		平均濃度	最大値濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
水質	公共用水域・淡水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった (過去には最大値として 0.006µg/L が検出されている (1984))	0.98 µg/L	—
	公共用水域・海水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった		—

注：公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。



現時点では評価に耐える環境中濃度の情報が得られなかったため、生態リスクの判定はできない。

本物質の化管法の製造・輸入量区分は 10t であり、本物質が水環境中に高濃度で存在する可能性は低いと推測されるが、甲殻類に対する慢性毒性から求めた PNEC は 0.98 µg/L と低い値を示しているため、生産量、使用量等の推移を見守るとともに、それを受けて環境中濃度を把握する必要性について検討する必要がある。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 講談社サイエンティフィック (1985) : 有機化合物辞典.
- 2) 化学大辞典編集委員会 (1963) : 化学大辞典 (縮刷版)、8、共立出版、pp.467-468.
- 3) 東京化学同人 (1989) : 化学大辞典.
- 4) LIDE, D.R., ed. (2002-2003) *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 83rd ed., Boca Raton, London, New York, Washington DC, CRC Press, p. 3-58.
- 5) HOWARD, P.H. and MEYLAN, W.M., ed. (1997) *Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals*, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers, p.161.
- 6) HANSCH, C., LEO, A., and HOEKMAN, D. (1995) *Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants*, Washington DC, ACS Professional Reference Book, p.121.
- 7) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ、0488
- 8) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWINTM v1.91
- 9) HOWARD, P.H., BOETHLING, R.S., JARVIS, W.F., MEYLAN, W.M., and MICHALENKO, E.M. ed. (1991) *Handbook of Environmental Degradation Rates*, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers, p.xiv.
- 10) 通産省公報 (1981.12.25)
- 11) 化学工業日報社(2003) : 14303 の化学商品

(2) 暴露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPIWINTM v3.11
- 2) (独) 国立環境研究所 (2004) : 平成 15 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書
- 3) 環境庁環境保健部保健調査室(1985) : 昭和 60 年版化学物質と環境

(3) 生態リスクの初期評価

- 1) 環境庁(1996):平成 7 年度 生態影響試験実施事業報告
- 2) (独) 国立環境研究所 (2004) : 平成 15 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書