

[2 4] フタル酸ジイソブチル

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：フタル酸ジイソブチル

(別の呼称：フタル酸ジブチル、ジイソブチル=フタラート)

CAS 番号：84-69-5

化審法官報告示整理番号：3-1303

化管法政令番号：2-60

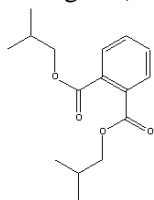
RTECS 番号：TI1225000

分子式：C₁₆H₂₂O₄

分子量：278.35

換算係数：1ppm=11.38mg/m³(気体、25℃)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は液体である¹⁾。

融点	-58℃ ²⁾ 、-64℃ ³⁾
沸点	296.5℃ ^{4), 5)}
密度	1.0490g/cm ³ (15℃) ⁴⁾
蒸気圧	8.82 × 10 ⁻⁵ mmHg(=1.18 × 10 ⁻² Pa) (25℃) ⁵⁾ , 6.65 × 10 ⁻³ mmHg(=8.86 × 10 ⁻¹ Pa) (25℃) ⁶⁾
分配係数(1-オクタノール/水)(logKow)	4.11 ^{5), 7)}
解離定数 (pKa)	
水溶性 (水溶解度)	1.4mg/L(25℃) ⁸⁾ 、6.2mg/L(24℃) ⁹⁾ 、20.3mg/L(20℃) ¹⁰⁾ , ⁵⁾ 、5.06mg/L(25℃、WSKOW ¹¹⁾ による計算値)

(3) 環境運命に関する基礎的事項

フタル酸ジイソブチ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 (難分解性ではないと判断される物質 ¹²⁾)
分解率：BOD 98%、HPLC 100% (試験期間：4 週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L) ¹³⁾
嫌氣的分解
分解率：0~30%(下水汚泥および湿地水を用いた系で 56 日)、0~30%(海水の底質を用いた系で 96 日) ¹⁴⁾
化学分解性
<u>OH ラジカルとの反応性 (大気中)</u>
反応速度定数：9.26 × 10 ⁻¹² cm ³ /(分子・sec) (25℃、AOPWIN ¹⁵⁾ により計算)

半減期：6.9～69 時間（OH ラジカル濃度を $3 \times 10^6 \sim 3 \times 10^5$ 分子/cm³ ¹⁶⁾ と仮定して計算)

加水分解性

半減期：約 195 日（pH8、推定値）¹⁷⁾

生物濃縮性

生物濃縮係数（BCF）：800(推定値)¹⁸⁾、291.5（BCFWIN¹⁹⁾ により計算)

(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、可塑剤とされている²⁰⁾。

(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：60）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

フタル酸ジイソブチ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	30.6	0.0	0.0	2.6
水	9.1	92.4	0.1	35.6
土壌	59.6	0.0	99.9	58.8
底質	0.7	7.6	0.0	2.9

(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 µg/L	<0.02	<0.02	<0.02	0.03	0.02	2/30	全国	2002~ 2003	3
	<0.01	<0.01	<0.01	0.06	0.01	22/65	全国	2001	4
	<0.2	<0.2	<0.2	<0.2	0.2	0/6	全国	1996	5
公共用水域・海水 µg/L	<0.02	<0.02	<0.02	<0.02	0.02	0/10	全国	2002	3
	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0.01	1/11	全国	2001	4
	<0.2	<0.2	<0.2	<0.2	0.2	0/5	全国	1996	5
底質(公共用水域・淡水) µg/g	<0.003	0.0042	<0.003	0.017	0.003	3/14	全国	2002~ 2003	3
	<0.026	<0.026	<0.026	<0.026 ¹⁾	0.026	0/6	全国	1996	5
底質(公共用水域・海水) µg/g	<0.003	0.0032	<0.003	0.018	0.003	1/10	全国	2002	3
	<0.026	<0.026	<0.026	<0.026	0.026	0/5	全国	1996	5

注：1) 統一検出下限値以下の値として 0.0023µg/g が報告されている。

(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。水質について安全側の評価値として予測環境中濃度（PEC）を設定すると、公共用水域の淡水域では 0.06 $\mu\text{g/L}$ 程度、同海水域では 0.01 $\mu\text{g/L}$ 程度となった。

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	0.01 $\mu\text{g/L}$ 未満 (2001)	0.06 $\mu\text{g/L}$ 程度 (2001)
公共用水域・海水	0.01 $\mu\text{g/L}$ 未満 (2001)	0.01 $\mu\text{g/L}$ 程度 (2001)

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		○	<u>370</u>	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO (RATE)*	3		○		2)
		○	370	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO (AUG)	3		○		2)
		○	640	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (AUG)	3		○		2)
		○	<u>1,800</u>	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (RATE)*	3		○		2)
甲殻類		○	270	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21			○	2)
		○	3,000	<i>Nitocra spinipes</i>	ソコムジンコ目	LC ₅₀ MOR	4			○	1)-5185
		○	<u>6,710</u>	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2		○		2)
魚類	○		<u>3,040</u>	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4		○		2)
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、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2)をもとに、試験時の実測濃度 (幾何平均値) を用いて0-72時間の毒性値を再計算したもの³⁾

なお文献 2)の試験では、界面活性作用を有する分散剤が用いられているため、原則として信頼性を b とした。同文献のオオミジンコ繁殖試験では、助剤対照区の産仔数が少なかったため、信頼性を c 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 1,800 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 6,710 µg/L、魚類では *Oryzias latipes* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 3,040 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 (藻類の 1,800 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 18 $\mu\text{g/L}$ 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 370 $\mu\text{g/L}$ であった。慢性毒性値について 1 生物群 (藻類) 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、藻類の毒性値 (370 $\mu\text{g/L}$) 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 3.7 $\mu\text{g/L}$ が得られた。

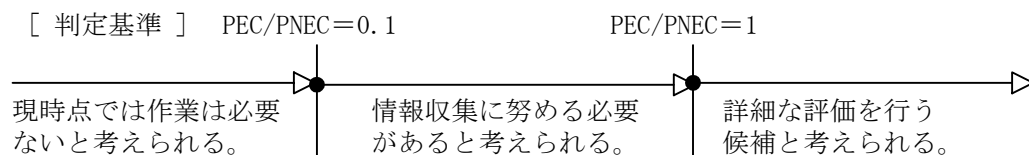
本物質の PNEC としては、藻類の慢性毒性値をアセスメント係数 100 で除した 3.7 $\mu\text{g/L}$ を採用する。

(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	0.01 $\mu\text{g/L}$ 未満 (2001)	0.06 $\mu\text{g/L}$ 程度 (2001)	3.7 $\mu\text{g/L}$	0.02
	公共用水域・海水	0.01 $\mu\text{g/L}$ 未満 (2001)	0.01 $\mu\text{g/L}$ 程度 (2001)		0.003

注：公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。



本物質の公共用水域における濃度は、平均濃度で見ると淡水域、海水域ともに 0.01 $\mu\text{g/L}$ 未満であり、検出下限値未満であった。安全側の評価値として設定された予測環境中濃度 (PEC) は、淡水域で 0.06 $\mu\text{g/L}$ 程度、海水域で 0.01 $\mu\text{g/L}$ 程度であった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域で 0.02、海水域では 0.003 となるため、現時点では作業は必要ないと考えられる。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 化学大辞典編集委員会 (1963) : 化学大辞典 (縮刷版)、7、共立出版、p.824.
- 2) STAPLES, C.A., ed. (2003) *Phthalate Esters*, The Handbook of Environmental Chemistry, Vol.3 Anthropogenic Compounds Part Q, Springer.
- 3) Clayton, G. D. and F. E. Clayton (eds.). *Patty's Industrial Hygiene and Toxicology: Volume 2A, 2B, 2C: Toxicology*. 3rd ed. New York: John Wiley Sons, 1981-1982. 2345. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 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. 3-39.
- 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.88.
- 6) Daubert, T.E., R.P. Danner. *Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation*. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989. [HSDB]
- 7) LEYDER, F. and BOULANGER, P. (1983) Ultraviolet Absorption, Aqueous Solubility, and Octanol-Water Partition for Several Phthalates, *Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology*, 30: 152-157.
- 8) DEFOE, D.L., HOLCOMBE, G.W., HAMMERMEISTER, D.E., BIESINGER, K.E. (1990) Solubility and Toxicity of Eight Phthalate Esters to Four Aquatic Organisms. *Toxicology and Chemistry*, 9: 623-636.
- 9) HOLLIFIELD, H.C. (1979) Rapid Nephelometric Estimate of Water Solubility of Highly Insoluble Organic Chemicals of Environmental Interest. *Bull. Environm. Contam. Toxicol*, 23: 579-586.
- 10) LEYDER, F. and BOULANGER, P. (1983) Ultraviolet Absorption, Aqueous Solubility, and Octanol-Water Partition for Several Phthalates. *Bull. Environm. Contam. Toxicol*, 30: 152-157.
- 11) U.S. Environmental Protection Agency, WSKOW™ v1.41
- 12) 経済産業公報 (2002.3.26)
- 13) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ、1557
- 14) MADSEN, T., RASMUSSEN, H.B., and NILSSON, L. (1995), Anaerobic biodegradation potentials in digested sludge, a Freshwater Swamp and a Marine Sediment. *Chemosphere*, 31(10): 4243-4258
- 15) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v1.91
- 16) 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.
- 17) Mill T et al; Environmental Fate and Exposure Studies Development of a PC-SAR for Hydrolysis: Esters, Alkyl Halides and Epoxides. EPA Contract No. 68-02-4254. Menlo Park, CA: SRI International (1987). [HSDB]
- 18) HSDB

19) U.S. Environmental Protection Agency, BCFWIN™ v2.15

20) 朝倉書店 (1986) : 実用化学辞典

(2) 暴露評価

1) U.S. Environmental Protection Agency, EPIWIN™ 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) 環境省水環境部水環境管理課 (2004) : 平成 14 年度要調査項目測定結果

4) 環境省水環境部水環境管理課 (2002) : 平成 12 年度要調査項目測定結果

5) 環境庁環境保健部環境安全課(1998) : 平成 9 年版化学物質と環境

(3) 生態リスクの初期評価

1)- : U.S.EPA 「AQUIRE」

5185 : Linden, E., B.E. Bengtsson, O. Svanberg, and G. Sundstrom (1979): The Acute Toxicity of 78 Chemicals and Pesticide Formulations Against Two Brackish Water Organisms, the Bleak (*Alburnus alburnus*) and the Harpacticoid. *Chemosphere* 8(11/12):843-851.

2) 環境庁(1996):平成 7 年度 生態影響試験実施事業報告

3) (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