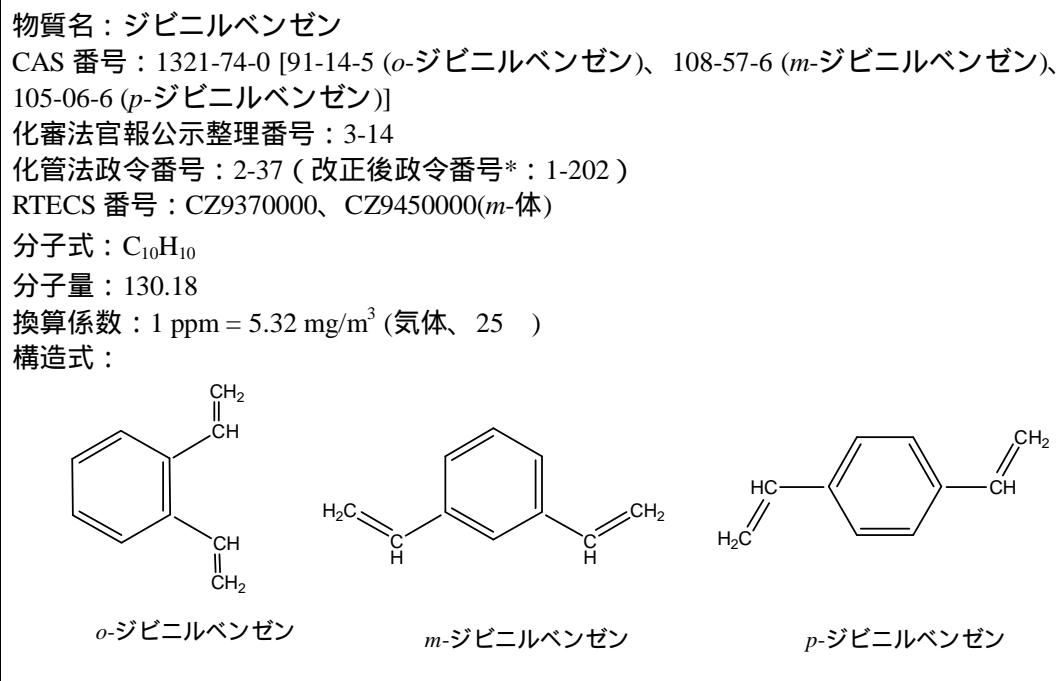


[4] ジビニルベンゼン

1. 物質に関する基本的事項

(1) 分子式・分子量・構造式



*注：平成 21 年 10 月 1 日施行の改正政令における番号

(2) 物理化学的性状

本物質は無色ないし淡黄色の透明液体である¹⁾。

融点	-20 (<i>o</i> -体、MPBPWIN ²⁾ により計算)、 -52.3 (<i>m</i> -体) ^{3),4)} 、31 (<i>p</i> -体) ³⁾
沸点	82 (<i>o</i> -体、14 mmHg) ³⁾ 、 121 (<i>m</i> -体、76 mmHg) ^{3),4)} 、 95 (<i>p</i> -体、18mmHg) ³⁾
密度	0.9325 g/cm ³ (<i>o</i> -体、22) ³⁾ 、 0.9294 g/cm ³ (<i>m</i> -体、20) ³⁾ 、 0.913 g/cm ³ (<i>p</i> -体、40) ³⁾
蒸気圧	0.66 mmHg (=88 Pa) (<i>o</i> -体、25 、MPBPWIN ²⁾ により計算)、 0.579 mmHg (=77.2 Pa) (<i>m</i> -体、25) ⁴⁾ 、 0.53 mmHg (=71 Pa) (<i>p</i> -体、25 、MPBPWIN ²⁾ により計算)
分配係数(1-オクタノール/水) (log Kow)	3.8 (<i>o</i> -体, <i>m</i> -体, <i>p</i> -体、KOWWIN ⁵⁾ により計算)
解離定数(pKa)	
水溶性(水溶解度)	53 mg/L (<i>o</i> -, <i>m</i> -, <i>p</i> -体、25 、WSKOWWIN ⁶⁾ により計算)

(3) 環境運命に関する基礎的事項

本物質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%、GC 1%(*m*-体)、GC 3%(*p*-体)、(試験期間：4週間、被験物質濃度：100 mg/L、活性汚泥濃度：30 mg/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： $54 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$ (*o*-、*m*-、*p*-体、25℃、AOPWIN⁶⁾により計算)
半減期：1.2～12時間(OHラジカル濃度を $3 \times 10^6 \sim 3 \times 10^5 \text{ 分子/cm}^3$ ⁸⁾と仮定して計算)

オゾンとの反応性(大気中)

反応速度定数： $4.2 \times 10^{-17} \text{ cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$ (*o*-、*m*-、*p*-体、25℃、AOPWIN⁶⁾により計算)
半減期：1.5～9.2時間(オゾン濃度を $3 \times 10^{12} \sim 5 \times 10^{11} \text{ 分子/cm}^3$ ⁸⁾と仮定して計算)

加水分解性

環境中で加水分解性の基をもたない⁹⁾。

生物濃縮性(蓄積性がないまたは低いと判断される化学物質¹⁰⁾注)

注)公報公表名称は *m*- (又は *p*-) ジビニルベンゼン

生物濃縮係数(BCF)：

- ・ピークA(*m*-体)
 - 219～415 (試験生物：コイ、試験期間：6週間、試験濃度：25 µg/L)⁷⁾
 - 264～433 (試験生物：コイ、試験期間：6週間、試験濃度：2.5 µg/L)⁷⁾
 - ・ピークB(*p*-体)
 - 206～402 (試験生物：コイ、試験期間：6週間、試験濃度：25 µg/L)⁷⁾
 - 229～385 (試験生物：コイ、試験期間：6週間、試験濃度：2.5 µg/L)⁷⁾
- (備考：*m*-ジビニルベンゼンをピークA、*p*-ジビニルベンゼンをピークBとし、被験物質の濃度表示は購入試料濃度で表示した⁷⁾)

土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc)：

1,700 (*o*-体、PCKOCWIN¹¹⁾により計算)
1,600 (*m*-体および*p*-体、PCKOCWIN¹¹⁾により計算)

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の平成19年度における化審法に基づき公表された製造・輸入数量は1,340 tである¹²⁾。

「化学物質の製造・輸入量に関する実態調査」によると、本物質の平成 16 年度における製造（出荷）及び輸入量は 1,000～10,000t/年未満である¹³⁾。本物質の国内生産量は、平成 9 年～18 年では 3,000t/年（平成 9～15 年は推定値）とされている¹⁴⁾。本物質の化学物質排出把握管理促進法（化管法）における製造・輸入量区分は 10t である¹⁵⁾。OECD に報告している本物質の生産量は 1,000～10,000t 未満である。

市販品は *m*-体が主成分であるとされている¹⁶⁾。

用 途

本物質の主な用途は、イオン交換樹脂、合成ゴム、イオン交換膜、ABS 樹脂、MBS 樹脂、不飽和ポリエステル樹脂などのスチレン系樹脂の架橋剤とされている¹⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

本物質については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：37）として指定されている。なお、平成 21 年 10 月 1 日施行の化管法の対象物質見直しにより、第二種指定化学物質から除外され、新たに第一種指定化学物質（政令番号：202）に指定されている。また、化学物質審査規制法第三種監視化学物質（通し番号：62）として指定されている。

2. ばく露評価

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基本的には水生生物の生息が可能な環境を保持すべき公共用水域における化学物質のばく露を評価することとし、データの信頼性を確認した上で安全側に立った評価の観点から原則として最大濃度により評価を行っている。

(1) 環境中への排出量

本物質は化学物質排出把握管理促進法（化管法）の対象物質見直し前においては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

化管法に基づく排出量及び下水道への移動量が得られなかったため、Mackay-Type Level III Fugacity Model¹⁾により媒体別分配割合の予測を異性体ごとに行った。結果を表 2.1.1~表 2.1.3 に示す。

表 2.1.1(o-体) Level Fugacity Model による媒体別分配割合 (%)

排出媒体	大気	水域	土壌	大気/水域/土壌
排出速度 (kg/時間)	1,000	1,000	1,000	1,000 (各々)
大気	90.7	0.9	0.1	0.3
水域	1.4	84.5	0.2	6.6
土壌	7.6	0.1	99.7	91.9
底質	0.2	14.5	0.0	1.1

注：数値は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の

表 2.1.2(m-体) Level Fugacity Model による媒体別分配割合 (%)

排出媒体	大気	水域	土壌	大気/水域/土壌
排出速度 (kg/時間)	1,000	1,000	1,000	1,000 (各々)
大気	89.7	0.9	0.1	0.2
水域	1.6	84.8	0.2	6.1
土壌	8.5	0.1	99.7	92.6
底質	0.3	14.2	0.0	1.0

注：数値は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の

表 2.1.3(p-体) Level Fugacity Model による媒体別分配割合 (%)

排出媒体	大気	水域	土壌	大気/水域/土壌
排出速度 (kg/時間)	1,000	1,000	1,000	1,000 (各々)
大気	88.9	0.9	0.1	0.2
水域	1.7	84.8	0.2	5.7
土壌	9.1	0.1	99.7	93.1
底質	0.3	14.2	0.0	1.0

注：数値は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の

(3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の環境中等の濃度について情報の整理を行った。媒体ごとに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 各媒体中の存在状況

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	測定年度	文献
公共用水域・淡水 μg/L	<0.002	<0.002	<0.002	<0.002	0.002	0/4	茨城県、 神奈川県、 和歌山県	2006	2)
公共用水域・海水 μg/L	<0.002	<0.002	<0.002	<0.002	0.002	0/1	香川県	2006	2)

(4) 水生生物に対するばく露の推定（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ばく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は概ね 0.002 μg/L 未満となり、海水域では 0.002 μg/L 未満の報告があった。

表 2.3 公共用水域濃度

水 域	平 均	最 大 値
淡 水	概ね 0.002 μg/L 未満(2006)	概ね 0.002 μg/L 未満(2006)
海 水	0.002 μg/L 未満の報告がある(2006)	0.002 μg/L 未満の報告がある(2006)

注：淡水は河川河口域を含む

3. 生態リスクの初期評価

水生生物の生態リスクに関する初期評価を行った。

(1) 水生生物に対する毒性値の概要

本物質の水生生物に対する毒性値に関する知見を収集し、その信頼性及び採用の可能性を確認したものを生物群(藻類、甲殻類、魚類及びその他)ごとに整理すると表 3.1 のとおりとなった。

表 3.1 水生生物に対する毒性値の概要

生物群	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	ばく露期間 [日]	試験の 信頼性	採用の 可能性	文献 No.
藻類			810 ^{*2}	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(AUG)	3	B ^{*1}	B ^{*1,2}	2) ^{*5}
			906	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)	3	B ^{*1}	B ^{*1}	3) ^{*4,5}
			1,730 ^{*2}	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(AUG)	3	B ^{*1}	B ^{*1,2}	2) ^{*5}
			1,830	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(RATE)	3	B ^{*1}	B ^{*1}	3) ^{*4,5}
甲殻類			353	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	B ^{*1}	B ^{*1}	2) ^{*5}
			1,870	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	B ^{*3}	B ^{*3}	2) ^{*5}
魚類			4,160	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4	B ^{*1}	B ^{*1}	2) ^{*5}
その他	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

毒性値(太字): PNEC 導出の際に参照した知見として本文中で言及したもの

毒性値(太字下線): PNEC 導出の根拠として採用されたもの

試験の信頼性: 本初期評価における信頼性ランク

A: 試験は信頼できる、B: 試験はある程度信頼できる、C: 試験の信頼性は低い、D: 信頼性の判定不可、
E: 信頼性は低くないと考えられるが、原著にあたって確認したものではない

採用の可能性: PNEC 導出への採用の可能性ランク

A: 毒性値は採用できる、B: 毒性値はある程度採用できる、C: 毒性値は採用できない

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、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る方法(面積法)

RATE: 生長速度より求める方法(速度法)

*1 界面活性作用のある助剤を用いているため試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした

*2 原則として速度法から求めた値を採用しているため、採用の可能性は「B」とし、PNEC 導出の根拠としては用いない

*3 界面活性作用のある助剤を用いており、公比が一定でなく濃度設定も適切でないことから、試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした

*4 文献2)をもとに、試験時の実測濃度(幾何平均値)を用いて速度法により0-48時間の毒性値を再計算したものを掲載

*5 被験物質として、純度80.2%の*m*-,*p*-異性体混合物(混合比不明)を使用

評価の結果、採用可能とされた知見のうち、生物群ごとに急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて最も小さい毒性値を予測無影響濃度（PNEC）導出のために採用した。その知見の概要は以下のとおりである。

1) 藻類

環境庁²⁾は OECD テストガイドライン No.201 (1984) に準拠して、緑藻類 *Pseudokirchneriella subcapitata* (旧名 *Selenastrum capricornutum*) を用いた生長阻害試験を GLP 試験として実施した。試験には密閉容器が使用され、被験物質として純度 80.2% の *m-,p-*異性体混合物（混合比不明）が用いられた。設定試験濃度は 0、0.300、0.490、0.810、1.30、2.20、3.60、6.00 mg/L（公比 1.6）であり、試験溶液は、2-メトキシエタノール 30 mg/L と界面活性作用のある硬化ひまし油（HCO-40）30 mg/L を助剤として調製された。被験物質の実測濃度は試験終了時において設定濃度の 53～61% であったため、毒性値の算出には実測濃度（試験開始時と終了時の幾何平均）が用いられた。0～48 時間の結果に基づき、速度法による 72 時間半数影響濃度（ EC_{50} ）は 1,830 $\mu\text{g/L}$ 、72 時間無影響濃度（NOEC）は 906 $\mu\text{g/L}$ であった³⁾。界面活性作用のある助剤を用いていたため試験の信頼性、採用の可能性は「B」とした。なお、面積法による毒性値はこれらより小さいが、本初期評価では原則として生長速度から求めた値を採用している。

2) 甲殻類

環境庁²⁾は OECD テストガイドライン No.202(1984) に準拠し、オオミジンコ *Daphnia magna* を用いた急性遊泳阻害試験を GLP 試験として実施した。試験は止水式（テフロンシート被覆）で行われ、被験物質には純度 80.2% の *m-,p-*異性体混合物（混合比不明）が用いられた。設定試験濃度は 0、1.00、1.20、1.60、2.20、3.00、5.60、10.00 mg/L（公比 1.2～1.9）であった。試験溶液の調製には試験用水として脱塩素水道水（硬度 63 mg/L、 CaCO_3 換算）が、助剤として 2-メトキシエタノール 10 mg/L と界面活性作用のある硬化ひまし油（HCO-40）10 mg/L が用いられた。被験物質の実測濃度は試験終了時において設定濃度の 72～83% であったため、毒性値の算出には実測濃度（試験開始時と終了時の幾何平均）が用いられた。48 時間半数影響濃度（ EC_{50} ）は 1,870 $\mu\text{g/L}$ であった。界面活性作用のある助剤を使用しており、公比が一定ではなく濃度設定も適切でないことから、試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした。

また、環境庁²⁾は OECD テストガイドライン No.211 (1997 年 4 月提案) に準拠し、オオミジンコ *Daphnia magna* を用いた繁殖試験を GLP 試験として実施した。試験は半止水式（テフロンシート被覆、週 3 回換水）で行われ、被験物質には純度 80.2% の *m-,p-*異性体混合物（混合比不明）が用いられた。設定試験濃度は 0、0.100、0.210、0.450、0.950、2.00 mg/L（公比 2.1）であった。試験溶液の調製には試験用水として脱塩素水道水（硬度 63 mg/L、 CaCO_3 換算）が、助剤としてジメチルホルムアミド（DMF）10 mg/L と界面活性作用のある硬化ひまし油（HCO-40）10 mg/L が用いられた。被験物質の実測濃度は換水前において設定濃度の 56～83% であったため、毒性値の算出には実測濃度（時間加重平均）が用いられた。繁殖阻害に関する 21 日間無影響濃度（NOEC）は 353 $\mu\text{g/L}$ であった。界面活性作用のある助剤を使用しているため試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした。

3) 魚類

環境庁²⁾は OECD テストガイドライン No.203 (1992) に準拠し、メダカ *Oryzias latipes* を用いた急性毒性試験を GLP 試験として実施した。試験は半止水式(テフロンシート被覆、24 時間毎換水)で行われ、被験物質には純度 80.2% の *m-,p-*異性体混合物(混合比不明)が用いられた。設定試験濃度は 0、1.00、2.00、4.00、8.00、16.0 mg/L (公比 2.0) であった。試験溶液の調製には試験用水として脱塩素水道水(硬度 63 mg/L、CaCO₃ 換算)が、助剤としてメチルセロソルブと界面活性作用のある硬化ひまし油(HCO-40)が、1 対 4 の割合で合わせて 80 mg/L 以下の濃度で用いられた。被験物質の実測濃度は 24 時間後においても設定濃度の 81% を維持しており、毒性値の算出には設定濃度が用いられた。96 時間半数致死濃度(LC₅₀)は 4,160 µg/L であった。界面活性作用のある助剤を使用しているため試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした。

(2) 予測無影響濃度(PNEC)の設定

急性毒性及び慢性毒性のそれぞれについて、上記本文で示した最小毒性値に情報量に応じたアセスメント係数を適用し、予測無影響濃度(PNEC)を求めた。

急性毒性値

藻類	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	生長阻害 ; 72 時間 EC ₅₀	1,830µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	遊泳阻害 ; 48 時間 EC ₅₀	1,870µg/L
魚類	<i>Oryzias latipes</i>	96 時間 LC ₅₀	4,160µg/L

アセスメント係数 : 100 [3 生物群 (藻類、甲殻類及び魚類) について信頼できる知見が得られたため]

これらの毒性値のうち最も小さい値(藻類の 1,830 µg/L)をアセスメント係数 100 で除することにより、急性毒性値に基づく PNEC 値 18 µg/L が得られた。

慢性毒性値

藻類	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	生長阻害 ; 72 時間 NOEC	906µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	繁殖阻害 ; 21 日間 NOEC	353µg/L

アセスメント係数 : 100 [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]
2 つの毒性値の小さい方の値(甲殻類の 353 µg/L)をアセスメント係数 100 で除することにより、慢性毒性値に基づく PNEC 値 3.5 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から得られた 3.5 µg/L を採用する。

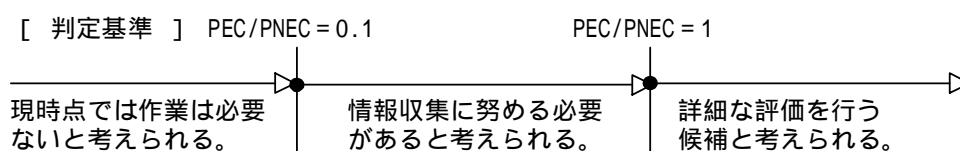
(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

水質	平均濃度	最大濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
公共用水域・淡水	概ね0.002 μg/L未満 (2006)	概ね0.002 μg/L未満 (2006)	3.5 μg/L	<0.0006
公共用水域・海水	0.002μg/L未満の報告がある(2006)	0.002μg/L未満の報告がある(2006)		<0.0006

注：1) 環境中濃度での () 内の数値は測定年度を示す

2) 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は概ね 0.002 μg/L 未満、海水域では 0.002 μg/L 未満の報告があり、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) も、淡水域、海水域ともに平均濃度と同様であった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域、海水域とも 0.0006 未満となるため、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) 化学工業日報社 (2008) : 15308 の化学商品.
- 2) U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.41.
- 3) Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- 4) 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: 188.
- 5) U.S. Environmental Protection Agency, KOWWIN™ v.1.67.
- 6) U.S. Environmental Protection Agency, WSKOWWIN™ v.1.41.
- 7) (独)製品評価技術基盤機構 : 既存化学物質安全性点検データ
(http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html, 2005.12.29 現在)
- 8) 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: xiv.
- 9) SRC. [Hazardous Substances Data Bank (<http://toxnet.nlm.nih.gov/>, 2005.12.19 現在)].
- 10) 通産省公報(1986.12.28)
- 11) U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWIN™ v.1.66.
- 12) 経済産業省(通商産業省) 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律(化審法)第二十三条第二項の規定に基づき、同条第一項の届出に係る製造数量及び輸入数量を合計した数量として公表された値.
- 13) 経済産業省(2007) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 16 年度実績)の確報値(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/jittaichousa/kakuhou18.html, 2007.4.6 現在).
- 14) 化学工業日報社 (1999):13599 の化学商品; 化学工業日報社 (2000):13700 の化学商品; 化学工業日報社 (2001) : 13901 の化学商品; 化学工業日報社 (2002) : 14102 の化学商品; 化学工業日報社 (2003) : 14303 の化学商品; 化学工業日報社 (2004) : 14504 の化学商品; 化学工業日報社 (2005) : 14705 の化学商品; 化学工業日報社 (2006) : 14906 の化学商品; 化学工業日報社 (2007) : 15107 の化学商品; 化学工業日報社 (2008) : 15308 の化学商品.
- 15) 環境省 PRTR インフォメーション広場 第二種指定化学物質総括表,
(http://www.env.go.jp/chemi/prtr/archive/target_chemi/02.html, 2007.8.14 現在) .
- 16) IPCS (1997): International Chemical Safety Cards. 0885. Divinylbenzene (Mixed Isomers), WHO.

(2) ばく露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPI Suite™ v.3.20.
- 2) 環境省環境安全課(2008) : 平成 18 年度化学物質環境実態調査.

(3) 生態リスクの初期評価

- 1) U.S.EPA「AQUIRE」; 該当なし
- 2) 環境庁(1998): 平成 9 年度 生態影響試験
- 3) (独)国立環境研究所(2006): 平成 17 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書