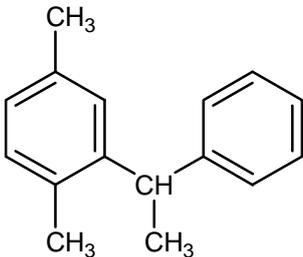


[4] 1,4-ジメチル-2-(1-フェニルエチル)ベンゼン

1. 物質に関する基本的事項

(1) 分子式・分子量・構造式

物質名：1,4-ジメチル-2-(1-フェニルエチル)ベンゼン
 CAS 番号：6165-51-1
 化審法官報公示整理番号：4-38 (1-フェニル-1-キシリルエタン)及び 4-244 (α -メチルベンジルキシレン)
 化管法政令番号：
 RTECS 番号：CZ7300000(ジメチル(1-フェニルエチル)ベンゼン)
 分子式：C₁₆H₁₈
 分子量：210.31
 換算係数：1 ppm = 8.60 mg/m³ (気体、25°C)
 構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色の液体である¹⁾。

融点	≦-50°C ¹⁾
沸点	310°C(MPBPWIN ²⁾ により計算)
密度	0.989 g/cm ³ (15°C) ¹⁾
蒸気圧	1.6×10 ⁻⁴ mmHg (=0.021Pa)(25°C) ¹⁾
分配係数(1-オクタノール/水) (log Kow)	5.39(25°C) ¹⁾
解離定数(pKa)	
水溶性(水溶解度)	0.96mg/L (25°C) ¹⁾

(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 (難分解性であると判断される物質³⁾)
 分解率：BOD 0%、HPLC 5% (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)⁴⁾

化学分解性
OH ラジカルとの反応性 (大気中)
 反応速度定数：22×10⁻¹² cm³/(分子・sec) (AOPWIN⁵⁾により計算)
 半減期：2.9～29 時間 (OH ラジカル濃度を 3×10⁶～3×10⁵ 分子/cm³⁶⁾と仮定し計算)

加水分解性

加水分解しない(pH=4, 7, 9、50°C、5日間)¹⁾

生物濃縮性（高濃縮性ではないと判断される物質³⁾）

生物濃縮係数(BCF)：

- ・分散剤（HCO-40）を試験溶液の調製に用いた濃縮度試験結果

310～930（試験生物：コイ、試験期間：6週間、試験濃度：1 µg/L）⁴⁾

420～1100（試験生物：コイ、試験期間：6週間、試験濃度：0.1 µg/L）⁴⁾

- ・溶媒（ジメチルスルホキシド）を試験溶液の調製に用いた濃縮度試験結果

420～690（試験生物：コイ、試験期間：6週間、試験濃度：0.1 µg/L）⁴⁾

- ・助剤を使用しない濃縮度試験結果

470～1200（試験生物：コイ、試験期間：6週間、試験濃度：0.1 µg/L）⁴⁾

土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc)： 3.5×10^4 (PCKOCWIN⁷⁾により計算)

(4) 製造輸入量及び用途**① 生産量・輸入量等**

本物質の化審法に基づき公表された製造・輸入数量の推移を表 1.1 に示す^{8),9)}。

表 1.1 製造輸入数量の推移

平成(年度)	18	19	20	21
製造・輸入数量(t)	724	816	494	351

注：製造数量は出荷量を意味し、同一事業所内での自家消費分を含んでいない値を示す

本物質を含む製品の 2002 年における生産量は約 8,000t であり¹⁾、市販製品中の含有率は約 10%である¹⁾。

② 用途

本物質の主な用途は PCB の代替溶媒であり、約 60%が感圧紙染料に用いる溶媒、約 40%が工業用コンデンサーオイルとして使用されている。また、少量がエポキシ樹脂及びウレタン樹脂の可塑剤、トリクロロエタンの代替溶媒として使用されている¹⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

本物質は化学物質審査規制法第二種監視化学物質（通し番号:879）、第三種監視化学物質（通し番号:9）に指定されている。

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）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行った。結果を表 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	0.3	0.0	0.0	0.0
水 域	0.1	10.9	0.0	0.1
土 壌	98.9	15.8	99.8	99.5
底 質	0.7	73.2	0.2	0.4

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

(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 ^{a)}	算術 平均値	最小値	最大値 ^{a)}	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	0.0027	0.0064	<0.0021	0.017	0.0021	1/3	北海道 茨城県	2008	2)
公共用水域・海水 μg/L	<0.0021	<0.0021	<0.0021	<0.0021	0.0021	0/4	全国	2008	2)
底質(公共用水域・淡水) μg/g	0.00031	0.0012	0.00004	0.0039	0.00002	5/5	全国	2008	2)
底質(公共用水域・海水) μg/g	0.0025	0.0074	0.00018	0.027	0.00002	8/8	全国	2008	2)

注：a) 最大値または幾何平均値の欄の**太字**で示した数字は、ばく露の推定に用いた値を示す

(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では概ね 0.017 µg/L、海水域では概ね 0.0021 µg/L 未満となった。

表 2.3 公共用水域濃度

水 域	平 均	最 大 値
淡 水	概ね 0.0027 µg/L (2008)	概ね 0.017 µg/L (2008)
海 水	概ね 0.0021 µg/L 未満 (2008)	概ね 0.0021 µg/L 未満 (2008)

注：1) () 内の数値は測定年度を示す

2) 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		○	370	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)	3	B* ¹	B* ¹	3)* ³
	○		>1,540	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(RATE)	3	B* ²	C* ²	3)* ³
甲殻類		○	9	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	B* ¹	B* ¹	2)-1
	○		250	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	B* ¹	B* ¹	2)-1
魚類		○	33.8	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ (胚)	NOEC GRO / MOR	40	B* ¹	B* ¹	2)-2
	○		310	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4	B* ¹	B* ¹	2)-1
	○		511	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4	B	B	4)-2009119
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 : 試験は条件付きで信頼できる、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 : 毒性値は条件付きで採用できる、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 (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

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 界面活性作用のある助剤を用いており、毒性値が溶解度を超過しているため、試験の信頼性を「B」、採用の可能性を「C」とした

*3 文献 2)-1 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 0-72 時間の毒性値を再計算したものを掲載

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⁾¹⁾は OECD テストガイドライン No. 201(1984)に準拠し、緑藻類 *Pseudokirchneriella subcapitata* (旧名 *Selenastrum capricornutum*) の生長阻害試験を GLP 試験として実施した。設定試験濃度 (追加試験) は 0 (対照区、助剤対照区)、0.72、1.30、2.34、4.21mg/L (公比 1.8) であった。試験溶液は、界面活性作用のある硬化ひまし油(HCO-50) 100mg/L を助剤として調製された。被験物質の実測濃度 (追加試験) は、試験終了時において設定濃度の 9.2~15.2%であり、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。速度法による 72 時間無影響濃度(NOEC)は 370 μ g/L であった³⁾。なお、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) 甲殻類

環境庁²⁾¹⁾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* の急性遊泳阻害試験を GLP 試験として実施した。試験は半止水式(24 時間換水)で行われ、設定試験濃度は 0 (対照区、助剤対照区)、0.05、0.10、0.17、0.31、0.56、1.00mg/L (公比 1.8) であった。試験溶液の調製には試験用水として Elendt M4 飼育水 (硬度 250mg/L、CaCO₃ 換算) が、助剤として界面活性作用のある硬化ひまし油(HCO-50) 10mg/L が用いられた。被験物質の実測濃度は、24 時間後の換水前において設定濃度の 62.0~78.4%であった。毒性値の算出には実測濃度 (試験開始時と 24 時間後の幾何平均) が用いられ、48 時間半数影響濃度(EC₅₀)は 250 μ g/L であった。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。

また環境庁²⁾¹⁾は、OECD テストガイドライン No. 211(1998)に準拠し、オオミジンコ *Daphnia magna* の繁殖試験を GLP 試験として実施した。試験は半止水式 (週 3 回換水) で行われた。設定試験濃度は 0 (対照区、助剤対照区)、0.013、0.024、0.043、0.077、0.140、0.250 mg/L (公比 1.8) であり、試験溶液の調製には試験用水として Elendt M4 飼育水 (硬度 249mg/L、CaCO₃ 換算) が、助剤として界面活性作用のある硬化ひまし油(HCO-50) 100mg/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 33.3~64.3%であり、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 (産仔数) に関する 21 日間無影響濃度(NOEC)は 9 μ g/L であった。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。

3) 魚類

環境庁²⁾¹⁾は OECD テストガイドライン No. 203(1992)に準拠し、メダカ *Oryzias latipes* の急性毒性試験を GLP 試験として実施した。試験は半止水式(24 時間毎換水)で行われ、設定試験濃度は 0 (対照区、助剤対照区)、0.38、0.69、1.20、2.20、4.00mg/L (公比 1.8) 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 41.0mg/L、CaCO₃ 換算) が、助剤として界面活性作用のある硬化ひまし油(HCO-50) 40mg/L が用いられた。被験物質の実測濃度は、24 時間後の換水前において設定濃度の 34.2~81.0%であり、毒性値の算出には実測濃度 (試験開始時と 24 時間後の幾何平均) が用いられた。96 時間半数致死濃度(LC₅₀)は 310 μ g/L であった。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。

また、環境省²⁾²⁾は OECD テストガイドライン No. 210 (1992)に準拠し、メダカ *Oryzias latipes* の胚を用いた魚類初期生活段階毒性試験を GLP 試験として実施した。試験は流水式（約 18 回換水/日）で実施された。設定試験濃度は 0（対照区、助剤対照区）、0.0060、0.016、0.042、0.11、0.30mg/L（公比 2.7）であり、試験溶液は、脱塩素水道水（硬度 67mg/L、CaCO₃ 換算）を試験用水として、ジメチルホルムアミド(DMF) 0.1mL/L 及び界面活性作用のある硬化ひまし油 (HCO-60) 0.6mg/L を助剤として調製された。被験物質の実測濃度(7 日毎)は、設定濃度の 76～102%であり、毒性値の算出には実測濃度(0、7、14、21、28、35 日後の算術平均値)が用いられた。成長阻害（体長）及び孵化後の死亡に関する 40 日間無影響濃度(NOEC)は、33.8μg/L であった。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) 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

甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	遊泳阻害；48 時間 EC ₅₀	250μg/L
魚類	<i>Oryzias latipes</i>	96 時間 LC ₅₀	310μg/L

藻類では採用できる値は得られなかったが、文献 No. 3)より、緑藻類 *Pseudokirchneriella subcapitata* に対する急性毒性値は溶解度超であると考えられる。したがって、アセスメント係数は 3 生物群の値が得られた場合の 100 を用いることとした。

2 つの毒性値の小さい方の値（甲殻類の 250μg/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 2.5μg/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	370μg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	繁殖阻害；21 日間 NOEC	9μg/L
魚類	<i>Oryzias latipes</i>	成長阻害／孵化後の死亡； 40 日間 NOEC	33.8μg/L

アセスメント係数： 10 [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（甲殻類の 9μg/L）をアセスメント係数 10 で除することにより、慢性毒性値に基づく PNEC 値 0.9μg/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 0.9μg/L を採用する。

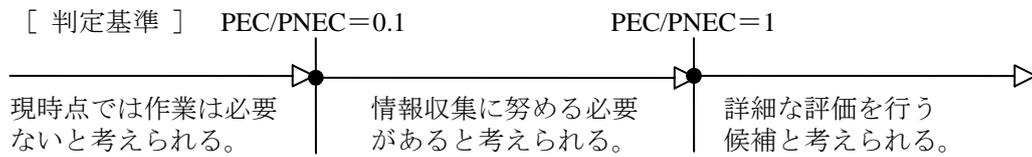
(3) 生態リスクの初期評価結果

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0.0027 $\mu\text{g/L}$ (2008)	概ね0.017 $\mu\text{g/L}$ (2008)	0.9 $\mu\text{g/L}$	0.02
公共用水域・海水	概ね0.0021 $\mu\text{g/L}$ 未満(2008)	概ね0.0021 $\mu\text{g/L}$ 未満(2008)		<0.002

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で概ね 0.0027 $\mu\text{g/L}$ 、海水域では概ね 0.0021 $\mu\text{g/L}$ 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、淡水域で概ね 0.017 $\mu\text{g/L}$ 、海水域では概ね 0.0021 $\mu\text{g/L}$ 未満であった。

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 0.002 未満となるため、現時点では作業の必要はないと考えられる。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) OECD High Production Volume Chemicals Program (2005): SIDS (Screening Information Data Set) Initial Assessment Report.
- 2) U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.43.
- 3) 経済産業公報 (2003.01.17).
- 4) 厚生労働省, 経済産業省, 環境省: 化審法データベース (J-CHECK)., (<http://www.safe.nite.go.jp/jcheck>, 2010.03.15 現在).
- 5) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.92.
- 6) 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.
- 7) U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWIN™ v.2.00.
- 8) 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.
- 9) 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)第二十五条の二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.

(2) ばく露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPI Suite™ v.4.00.
- 2) 環境省環境安全課 (2010): 平成 20 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) 環境省(庁) データ
 - 1: 環境庁(2000): 平成 11 年度 生態影響試験
 - 2: 環境省(2003): 平成 14 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
- 4) その他

2009119: 経済産業省 (2002): 1,4-ジメチル-2-(1-フェニルエチル)ベンゼンのコイにおける濃縮度試験. 化審法データベース (J-CHECK)., (<http://www.safe.nite.go.jp/jcheck>, 2010.11.29 現在).