

大気中において容易に化学反応する可能性がある物質の取扱いについて

1. 経緯・調査内容

健康リスク総合専門委員会（第 10 回）においては、有害大気汚染物質に該当する可能性がある物質リスト（以下「物質リスト」という。）から、大気中で容易に化学反応する物質として、無水フタル酸及び無水マレイン酸を除外することとしたが、委員からの御指摘を踏まえ、その他の物質において、大気中で容易に化学反応する物質が無いか確認した。

具体的には、評価書・データベース等（OECD の SIAR や WHO/IPCS の EHC、CICADs 等の国際的にレビューされた評価書や、環境省の環境リスク初期評価、NEDO/NITE 初期リスク評価書等の国内評価書、その他委員から御提供いただいた文献等）の文献値を中心に、水との反応速度に関する情報を整理し、その結果をもとに、水中での水との反応による半減期が無水フタル酸と同様であり、大気中において容易に化学反応する可能性がある物質を調査した。

2. 確認結果

確認の結果、無水フタル酸と同様に大気中において水蒸気共存下で速やかに化学反応する可能性があると考えられた 12 物質について、反応速度等に関する情報を別表 1 に整理した。

今回の調査においては、①水中での水との反応による半減期が短いこと、②大気中で速やかに水と反応すること、③反応生成物について有害性が無いと考えられることの 3 点の該当性について文献による確認を行った。

3. 物質リストの見直しについて

今回調査した結果から、水中での水との反応による半減期が短く、大気中において水蒸気共存下で化学反応する可能性があると考えられる物質について、反応速度が十分に解明されていないことや反応生成物に有害性があることを勘案すると、物質リストから除外すべき物質は無かった。

一方、無水マレイン酸については、前回専門委員会資料においては、物質リストから除外することとしていたが、湿度等の条件によっては大気中で水と反応しないとの情報があることから、物質リストから除外しないこととする。

別表1 大気中において水蒸気共存下で短時間で化学反応する可能性があると考えられる物質

構造分類	物質名	水中での水との反応速度に関する情報	大気中での水との反応速度に関する情報	反応生成物
無水物	無水フタル酸	25°C pH5 における水との反応速度定数(Hawkins 1975)より、半減期は約 1.5 分。(NITE 初期リスク評価書)	大気中に粉じんとして排出された場合、雨滴と接触すると速やかに反応してフタル酸となり、雨滴と共に降下すると推定される。(NITE 初期リスク評価書)	フタル酸
	無水マレイン酸	25°C pH7 における水との反応による半減期は 22 秒。(NITE 初期リスク評価書)	大気中に粉じんとして排出された場合、雨滴と接触すると速やかに反応する。(引用元:NITE 初期リスク評価書) 相対湿度 96%大気中では 21 時間で完全に反応するが、相対湿度 50%の大気中では反応しないとの報告もある。(Rosenfeld, J.M and Murphy, C.B.(1967)Hydrolysis study of organic acid anhydrides by differential thermal analysis-II)	マレイン酸
	テトラヒドロメチル無水フタル酸	(無水フタル酸と同様の構造を持つテトラヒドロメチル無水フタル酸の水との反応による半減期も同程度(1.5分)と推定される。(NITE 初期リスク評価書))	大気中に排出され、雨滴と接触すると速やかに反応してテトラヒドロメチルフタル酸になり、雨滴と共に降下すると推定される。(NITE 初期リスク評価書)	テトラヒドロメチルフタル酸
	1,2,4-ベンゼントリカルボン酸 1,2-無水物	(無水フタル酸と同様の構造を持つ 1,2,4-ベンゼントリカルボン酸 1,2-無水物の水との反応による半減期も同程度(1.5分)と推定される。(NITE 初期リスク評価書))	大気中に粉じんとして排出された場合には、雨滴と接触すると速やかに反応して 1,2,4-ベンゼントリカルボン酸になり、雨滴と共に降下すると推定される。(NITE 初期リスク評価書)	1,2,4-ベンゼントリカルボン酸
イソシアネート類	トルエンジイソシアネート(別名:トリレンジイソシアネート)	水中での半減期は 1.7 時間~0.5 秒(TDI の水との反応は、複雑なものであり、試験条件により結果が大きく異なるとされている。) (引用元:NITE 初期リスク評価書)	TDI の濃度が 0.034 ppm の場合、24°C、相対湿度 80%での TDI の半減期は 8 秒未満。(引用元:NITE 初期リスク評価書) 大気中での分解性が低いという情報もある。(Dennis C. Allport ら、MDI&TDI : Safety, Health and the Environment(2003))	トルエンジアミン(物質リスト該当)及びポリウレア
	ヘキサメチレン=ジイソシアネート	・濃度が 200 mg/L の場合、半減期は、20°Cでは 5 分であり、4°Cでは 25 分であった(GDCh BUA, 1997)。 ・また、ヘキサメチレンジイソシアネートの分解反応速度は速く、半減期は 10 分以下と推定されている(SRC:HydroWin, 2005)。(引用元:NITE 初期リスク評価書)	大気中に排出され、雨滴と接触すると速やかに反応してヘキサメチレンジアミン及びポリウレアから成る混合物となり、雨滴と共に降下すると推定される。(引用元:NITE 初期リスク評価書)	ヘキサメチレンジアミン(物質リスト該当)及びポリウレア
	3-イソシアナトメチル-3,5,5-トリメチルシクロヘキシル=イソシアネート	(水との反応速度に関する情報無し)	(水との反応速度に関する情報無し)	(推定) 3-(アミノメチル)-3,5,5-トリメチルシクロヘキシルアミンの塩
	3,3'-ジメチルピフェニル-4,4'-ジイソシアネート			(推定) o-トリジン(別名:3,3'-ジメチルベンジン)(物質リスト該当)
	1,5-ナフタレンジイソシアネート			(推定) 1,5-ナフタレンジアミン

	メチレンビス(4,1-シクロヘキシレン)=ジイソシアネート			4,4'-メチレンビス(4-シクロヘキシルアミン)と二酸化炭素
	メチレンビス(4-フェニルイソシアネート)(別名:メチレンビス(4,1-フェニレン)=ジイソシアネート)			4,4'-メチレンジアニリン(物質リスト該当)及びポリウレア
ハロゲン化ベンゼン	ベンゾトリクロライド(別名:ベンジリジン=トリクロリド)	加水分解半減期 19 秒 (GERI 既存化学物質安全性(ハザード)評価シート)	(水との反応速度に関する情報無し)	安息香酸及び塩酸

