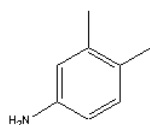


[16] 3,4-ジメチルアニリン

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： 3,4-ジメチルアニリン
(別の呼称：3,4-キシリジン、3,4-ジメチルベンゼンアミン)
CAS 番号：95-64-7
化審法官報告示整理番号：3-129
化管法政令番号：1-164
RTECS 番号：ZE9450000
分子式：C₈H₁₁N
分子量：121.18
換算係数：1ppm=9.95mg/m³(気体、25℃)
構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は板状または柱状晶である¹⁾。

融点	51℃ ²⁾
沸点	228℃ ²⁾
密度	1.076 g/cm ³ (18℃) ²⁾
蒸気圧	0.047mmHg(=6.27Pa) (25℃、推定値) ³⁾
分配係数(1-オクタノール/水) (logKow)	1.84 ⁴⁾
解離定数(pKa)	5.28 ⁴⁾
水溶性 (水溶解度)	3.8g/L(22℃) ⁵⁾

(3) 環境運命に関する基本的事項

3,4-ジメチルアニリンの分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性
<u>好氣的分解</u>
分解率：BOD 7%、GC 5% (試験期間：2週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L) ⁶⁾
<u>化学分解性</u>
<u>OH ラジカルとの反応性 (大気中)</u>
反応速度定数：2.00×10 ⁻¹⁰ cm ³ /(分子・sec) (25℃、AOPWIN ⁷⁾ により計算)
半減期：0.32～3.2時間 (OH ラジカル濃度を3×10 ⁶ ～3×10 ⁵ 分子/cm ³ ⁸⁾ と仮定して計算)
生物濃縮性 (濃縮性が無い又は低いと判断される物質 ⁹⁾)
生物濃縮係数(BCF)：1.9～3.3(試験期間：6週間、試験濃度：1mg/L)、<10(試験期間：6週間、試験濃度：0.1mg/L) ⁶⁾

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の国内生産量 (推定)¹⁰⁾の推移を表 1.1 に示す。

表 1.1 3,4-ジメチルアニリンの国内生産量(推定) (t)の推移

年	平成 8 年	9 年	10 年	11 年	12 年	13 年
生産量 (t)	200	200	200	200	200	200

② 用途

本物質の主な用途は、ビタミン B₂、その他とされている¹⁰⁾。

(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一種指定化学物質 (政令番号: 164) 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

3,4-ジメチルアニリンは化管法第一種指定化学物質であるが、平成13年度の排出・移動量は0であった。

(2) 媒体別分配割合の予測

PRTR 排出量データが0であったため、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	36.5	0.0	0.0	0.1
水	19.1	99.7	12.5	42.6
土壌	44.3	0.0	87.5	57.1
底質	0.1	0.3	0.0	0.1

(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 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	<0.7	<0.7	<0.06	<0.7	0.06~0.7	0/18	全国	1976~ 1977	3
公共用水域・海水	µg/L	<20	<20	<1	<20	1~20	0/2	愛知県、大 阪府 神奈川県、 大阪府	1977	4
		<0.7	<0.7	<0.06	<0.7	0.06~0.7	0/2		1977	3
底質(公共用水域・淡水)	µg/g	<0.004	<0.004	<0.001	0.022	0.001~ 0.004	4/18	全国	1976~ 1977	3
底質(公共用水域・海水)	µg/g	<4	<4	<0.25	<4	0.25~4	0/2	愛知県、大 阪府 神奈川県、 大阪府	1977	4
		<0.004	<0.004	<0.001	<0.004	0.001~ 0.004	0/2		1977	3

(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。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
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	○		24,000	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₅₀ BMS	2		○		1)-2997
	○		50,000	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO	2		○		1)-2997
甲殻類		○	16	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21		○		1)-847
	○		2,900	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	1			○	1)-847
魚類	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
その他	○		235,000	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属 (ミズケムシ目)	IGC ₅₀ POP	60 時間	○			1)-17313

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、IGC₅₀ (50% Inhibitory Growth Concentration) : 半数増殖影響濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration) : 無影響濃度
 影響内容) BMS (Biomass) : 生物量、GRO (Growth) : 生長 (植物)、成長 (動物)、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、POP (Population) : 個体群の組成変化、REP (Reproduction) : 繁殖、再生産

(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 *Scenedesmus subspicatus* に対する生長阻害の速度法による 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 50,000 μg/L、その他の生物ではテトラヒメナ属 *Tetrahymena pyriformis* に対する 60 時間半数増殖影響濃度 (IGC₅₀) が 235,000 μg/L であった。急性毒性値について 1 生物群 (藻類) 及びその他の生物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 1,000 を用いることとし、上記の毒性値のうちその他の生物を除いた最も低い値 (藻類の 50,000 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 50 μg/L が得られた。

慢性毒性値については、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 16 μg/L であった。慢性毒性値について 1 生物群 (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、慢性毒性値による PNEC として 0.16 μg/L が得られた。

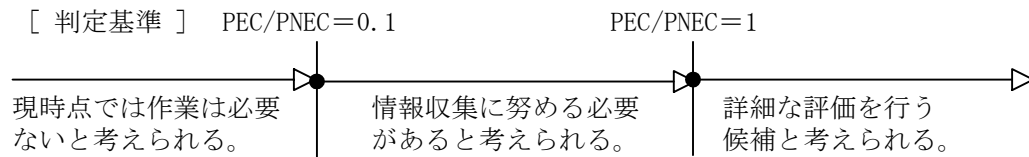
本物質の PNEC としては、以上により求められた PNEC のうち低い値である、甲殻類の慢性毒性値をアセスメント係数 100 で除した 0.16 μg/L を採用する。

(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	0.16 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十分なデータがないため、生態リスク評価の判定はできない。

本物質の平成 13 年度の国内生産量は 200t と推定されているが、13 年度の PRTR 排出・移動量は 0 であった。本物質は分解性が低く、水溶性が高く、水域に排出された場合には水域中に留まることが予測されている。また、生態毒性に関する知見が限られる中で甲殻類の繁殖に対する慢性毒性値から求めた PNEC 値は 0.16μg/L と小さい値を示している。したがって、本物質については生産量や PRTR 排出・移動量の推移を把握した上で、生態毒性及び環境中の存在状況の把握について検討する必要があると考えられる。

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)、2、共立出版、pp.725-726.
- 2) LIDE, D.R., ed. (2002-2003) *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 83rd ed., Boca Raton, London, New York, Washington DC, CRC Press, p. 3-22.
- 3) U.S. Environmental Protection Agency、MPVPWIN™ v1.41
- 4) JOHNSON, C.A. and WESTALL, J.C. (1990) Effect of pH and KCl Concentration on the Octanol-Water Distribution of Methylanilines. *Environ. Sci. Technol.*, **24**:1869-1875.
- 5) BEILSTEIN. ON-LINE DATABASE. BATCH RETRIEVAL DURING 1991. BEILSTEIN INFORMATION SYSTEMS, INC. (HTTP://WWW.BEILSTEIN.COM) [U.S. Environmental Protection Agency、WSKOW™ v1.41]
- 6) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ、0239
- 7) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v1.91
- 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, p.xiv.
- 9) 通産省公報 (1978.12.16)
- 10) 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, 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) 環境庁環境保健部保健調査室(1977) : 昭和 52 年版環境における化学性物質の存在
- 4) 環境庁環境保健部保健調査室(1978) : 昭和 53 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」
- 847 : Kuhn, R., M. Pattard, K. Pernak, and A. Winter (1989) : Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to *Daphnia magna* in the 21 Day Reproduction Test. *Water Res.* 23(4):501-510.
- 2997 : Kuhn, R., and M. Pattard (1990) : Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to Green Algae (*Scenedesmus subspicatus*) in the Cell Multiplication Inhibition Test. *Water Res.* 24(1):31-38.
- 17313 : Schultz, T.W., and B.A. Moulton (1984) : Structure-Activity Correlations of Selected Azaarenes, Aromatic Amines, and Nitroaromatics. In: K.L.E.Kaiser (Ed.), *QSAR in Environmental Toxicology*, Proc.of the Workshop held at McMaster University, Hamilton, Ont., Aug.16-18, 1983, D.Reidel Publ.Co., Dordrecht, Netherlands:337-357.