

[7] 塩化ベンジル

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：塩化ベンジル

(別の呼称：クロロメチルベンゼン、ベンジルクロリド、 α -クロロトルエン)

CAS 番号：100-44-7

化審法官報告示整理番号：3-102

化管法政令番号：1-297

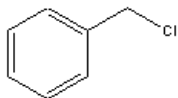
RTECS 番号：XS8925000

分子式：C₇H₇Cl

分子量：126.59

換算係数：1ppm=5.17mg/m³(気体、25°C)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は刺激性のかなり不快臭のある液体である¹⁾。

融点	-45°C ²⁾ 、-48~-43°C ³⁾ 、-39.2°C ⁴⁾
沸点	179°C ²⁾
密度	1.1004 g/cm ³ (20°C) ²⁾
蒸気圧	1.30mmHg(=1.73×10 ² Pa) (25°C) ⁴⁾
分配係数(1-オクタノール/水)(logKow)	2.30 ⁵⁾
解離定数(pKa)	解離基なし
水溶性(水溶解性)	0.493g/L(20°C) ⁶⁾ 、0.555g/L(30°C) ⁶⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

塩化ベンジル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> (分解性の良好な物質 ⁷⁾)
分解率：BOD 71% (試験期間：2 週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L) ⁸⁾
化学分解性
<u>OH ラジカルとの反応性</u> (大気中)
反応速度定数：2.95×10 ⁻¹² cm ³ /(分子・sec) (24.6±0.9°C、測定値) ⁹⁾
半減期：22~218 時間 (OH ラジカル濃度を 3×10 ⁶ ~3×10 ⁵ 分子/cm ³ ¹⁰⁾ と仮定して計算)
<u>オゾンとの反応性</u> (大気中)
反応速度定数：4.00×10 ⁻²⁰ cm ³ /(分子・sec) (25°C、AOPWIN ¹¹⁾ により計算)
半減期：67~401 日 (オゾン濃度を 3×10 ¹² ~5×10 ¹¹ 分子/cm ³ ¹⁰⁾ と仮定して計算)
<u>加水分解性</u>

半減期：15 時間（反応速度係数： $1.28 \times 10^{-5} \text{s}^{-1}$ (pH:7、25°C) を基に計算）¹⁰⁾

半減期：40 時間（反応速度係数： $2.90 \times 10^{-4} \text{min}^{-1}$ (pH:7、20°C) ⁹⁾ を基に計算）

生物濃縮性

生物濃縮係数(BCF)：11.8 (BCFWIN¹²⁾ により計算)

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

「化学物質の製造・輸入量に関する実態調査」によると平成 13 年度実績は 1,000～10,000 t 未満である¹³⁾。OECD に報告している生産量は 1,000～10,000t、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 1,000t である。

② 用途

本物質の主な用途は、中間物であり¹³⁾、具体的には有機合成、染料（例えばマラカイトグリーンローザミン、キノリンレッド、アリザリンエローA）、中間物（例えば N,N'-ジメチルアニリン、m-ジメチルアミノフェノール、キナルジン、イソキノリン、ピロガロール）、合成タンニン、調剤、写真現像薬、香料、ガソリン重合物生成防止剤、塩化ベンザルコニウム（殺菌性洗浄剤および柔軟剤）とされている¹⁴⁾。

(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：297）として指定されているほか、有害大気汚染物質に該当する可能性がある物質及び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

塩化ベンジルは化学物質排出把握管理促進法（化管法）の第一種指定化学物質である。同法に基づき集計された平成 13 年度の届出排出量・移動量及び届出外排出量を表 2.1 に示す。

表 2.1 平成 13 年度 PRTR データによる排出量及び移動量

	届出						届出外（国による推計）				総排出量（kg/年）		
	排出量（kg/年）				移動量（kg/年）		排出量（kg/年）				届出 排出量	届出外 排出量	合計
	大気	公共用水域	土壌	埋立	下水道	事業所外	対象業種	非対象業種	家庭	移動体			
全排出・移動量	533	105	0	0	1624	86563	258				638	258	896

業種別届出量(割合)

化学工業	347 (65.1%)	105 (100%)	0	0	1514 (93.2%)	84863 (98%)
医薬品製造業	182 (34.1%)	0	0	0	110 (6.8%)	1700 (2%)
農薬製造業	3 (0.6%)	0	0	0	0	0
プラスチック製品製造業	1 (0.2%)	0	0	0	0	0

総排出量の構成比 (%)	
届出	届出外
71	29

本物質の平成 13 年度における環境中への総排出量は 0.9 t と報告されており、そのうち届出排出量は 0.6 t で全体の 71%であった。届出排出のうち 0.5 t が大気へ、0.1 t が公共用水域へ排出されるとしており、大気への排出量が多い。その他に下水道への移動量が 1.6 t 届け出られている。主な届出排出源は、大気への排出では化学工業(65.1%)及び医薬品製造業(34.1%)であり、公共用水域への排出では化学工業(100%)である。

表 2.1 に示したように PRTR 公表データにおいて届出排出量は媒体別に報告され、その集計結果が公表されているが、届出外排出量の推定は媒体別には行われていない。別途行われている届出外排出量の媒体別配分の推定結果¹⁾と届出排出量を媒体別に合計したものを表 2.2 に示す。

表 2.2 環境中への推定排出量

		推定排出量(kg)
大	気	747
水	域	147
土	壌	0

(2) 媒体別分配割合の予測

本物質の環境中の媒体別分配割合を PRTR データ活用環境リスク評価支援システム（改良版）を用いて予測した²⁾。予測の対象地域は、平成 13 年度環境中への推定排出量が最大であった神奈川県（大気への排出量 0.2 t、水域への排出量 0.002 t）とした。予測結果を表 2.3 に示す。

表 2.3 媒体別分配割合の予測結果

		分配割合 (%)
大	気	35.9
水	域	61.8
土	壌	0.8
底	質	1.4

(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 2.4 に示す。

表 2.4 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	文献
公共用水域・淡水	µg/L	<0.05	<0.05	<0.05	0.05	0.05	1/65	全国	2001	3
		<0.2	<0.2	<0.2	<0.2	0.2	0/9	全国	1989~ 1990	4
公共用水域・海水	µg/L	<0.05	<0.05	<0.05	<0.05	0.05	0/11	全国	2001	3
		<0.2	<0.2	<0.2	<0.2	0.2	0/12	全国	1989	4
底質(公共用水域・淡水)	µg/g	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0/10	全国	1989~ 1990	4
底質(公共用水域・海水)	µg/g	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0/12	全国	1989	4

(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 2.5 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 0.05µg/L 程度、海水域では 0.05µg/L 未満となった。

表 2.5 公共用水域濃度

媒体	平均	最大値
水質		
公共用水域・淡水	0.05µg/L 未満(2001)	0.05µg/L 程度(2001)
公共用水域・海水	0.05µg/L 未満(2001)	0.05µg/L 未満(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		○	10,000	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(AUG)	3		○		2)
	○		19,300	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(AUG)	3		○		2)
甲殻類		○	100	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21		○		2)
	○		140	<i>Penaeus setiferus</i>	クルマエビ属	LC ₅₀ MOR	4		○		1)-875
	○		1,300	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	LC ₅₀ IMM	1		○		1)-707
	○		3,200	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2		○		2)
魚類	○		1,900	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4		○		2)
	○		5,000	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッドミノ	LC ₅₀ MOR	4		○		1)-5735
	○		7,300	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッドミノ	LC ₅₀ MOR	2		○		1)-875
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) 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

なお文献 2) の試験では界面活性作用のある分散剤を用いているため、信頼性は b 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 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 19,300μg/L、甲殻類では *Penaeus setiferus* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 140μg/L、魚類では *Oryzias latipes* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 1,900μg/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低い値 (甲殻類の 140μg/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 1.4 μg/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 72 時

間無影響濃度（NOEC）が 10,000 $\mu\text{g/L}$ 、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 100 $\mu\text{g/L}$ が得られた。慢性毒性値について 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、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低い値（甲殻類の 100 $\mu\text{g/L}$ ）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 1.0 $\mu\text{g/L}$ 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 1.0 $\mu\text{g/L}$ を採用する。

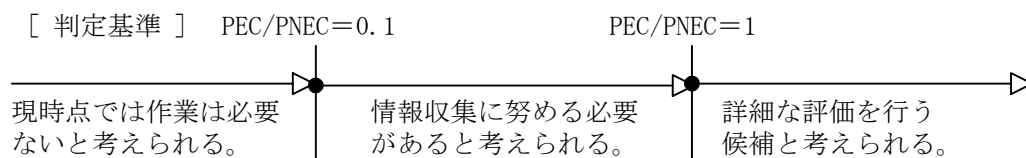
(3) 生態リスクの初期評価結果

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	0.05 $\mu\text{g/L}$ 未満(2001)	0.05 $\mu\text{g/L}$ 程度(2001)	1.0	0.05
	公共用水域・海水	0.05 $\mu\text{g/L}$ 未満(2001)	0.05 $\mu\text{g/L}$ 未満(2001)	$\mu\text{g/L}$	<0.05

注) : 1) 環境中濃度での () 内の数値は測定年を示す。

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、海水域とも 0.05 $\mu\text{g/L}$ 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、淡水域が 0.05 $\mu\text{g/L}$ 程度、海水域は 0.05 $\mu\text{g/L}$ 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、淡水域が 0.05、海水域は 0.05 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) 東京化学同人 (1989) : 化学大辞典.
- 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. 3-35.
- 3) BUDAVARI, S., ed. (1996) *The Merck Index*, 12th ed., Whitehouse Station, Merck & Co.
- 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, p.149.
- 5) HANSCH, C., LEO, A., and HOEKMAN, D. (1995) *Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants*, Washington DC, ACS Professional Reference Book, p.29.
- 6) OHNISHI, R. and TANABE, K (1971) A New Method of Solubility Determination of Hydrolyzing Solute—Solubility of Benzyl Chloride in Water, *Bull. Chem. Soc. Japan*, **41**: 2647-2649.
- 7) 通産省公報 (1975.8.27)
- 8) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ、0086
- 9) EDNEY, E.O., KLEINDIENST, T.E., and CORSE, E.W. (1986) Room Temperature Rate Constants for the Reaction of OH with Selected Chlorinated and Oxygenated Hydrocarbons. *Int. J. Chem. Kinet.*, **18**: 1355-1371.
- 10) 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, pp.xiv, 344-345.
- 11) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v1.91
- 12) U.S. Environmental Protection Agency, BCFWIN™ v2.15
- 13) 経済産業省(2003) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成 13 年度実績) の確報値.
- 14) 化学工業日報社(2003) : 14303 の化学商品

(2) 暴露評価

- 1) 環境省環境リスク評価室、(社) 環境情報科学センター(2003) : PRTR データ活用環境リスク評価支援システム 2.0
- 2) 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 (2002) : 平成 12 年度要調査項目測定結果
- 4) 環境庁環境保健部保健調査室(1990) : 平成 2 年版化学物質と環境
- 5) 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

(3) 生態リスクの初期評価

- 1)- : U.S.EPA 「AQUIRE」

- 707 : Bringmann, G., and R. Kuhn (1982): Results of Toxic Action of Water Pollutants on *Daphnia magna* Straus Tested by an Improved Standardized Procedure. Z.Wasser-Abwasser-Forsch. 15(1):1-6.
- 875 : Curtis, M.W., T.L. Copeland, and C.H. Ward (1979): Acute Toxicity of 12 Industrial Chemicals to Freshwater and Saltwater Organisms. Water Res. 13(2):137-141.
- 2965 : Curtis, M.W., and C.H. Ward (1981): Aquatic Toxicity of Forty Industrial Chemicals: Testing in Support of Hazardous Substance Spill Prevention Regulation. J.Hydrol.51:359-367.
- 5303 : Bringmann, G., and R. Kuhn (1980): Comparison of the Toxicity Thresholds of Water Pollutants to Bacteria, Algae, and Protozoa in the Cell Multiplication Inhibition Test. Water Res. 14(3):231-241.
- 5735 : Curtis, M.W., T.L. Copeland, and C.H. Ward (1978): Aquatic Toxicity of Substances Proposed for Spill Prevention Regulation. In: Proc.Natl.Conf.Control of Hazardous Material Spills, Miami Beach, FL:93-103.
- 11037 : Wellens, H. (1982): Comparison of the Sensitivity of *Brachydanio rerio* and *Leuciscus idus* by Testing the Fish Toxicity of Chemicals and Wastewaters. Z.Wasser-Abwasser-Forsch. 15(2): 49-52.
- 2) 環境庁環境保健部環境安全課(1995): 平成 6 年度環境汚染物質の生態影響調査結果 [UNEP Chemicals: OECD Screening Information Data Set for High Production Volume Chemicals]