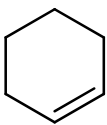


[2] シクロヘキセン

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：シクロヘキセン |
| CAS 番号：110-83-8 |
| 化審法官報公示整理番号：3-2234 |
| 化管法政令番号： |
| RTECS 番号：GW2500000 |
| 分子式：C ₆ H ₁₀ |
| 分子量：82.14 |
| 換算係数：1 ppm = 3.36 mg/m ³ (気体、25°C) |
| 構造式：  |

(2) 物理化学的性状

本物質は特異な臭気を有する無色の液体である¹⁾。

| | |
|-----------------------------|--|
| 融点 | -103.5°C ^{2),3),4),5)} 、-104°C ⁶⁾ |
| 沸点 | 83°C (760 mmHg) ^{3),4),5),6)} 、82.98°C (760 mmHg) ²⁾ |
| 密度 | 0.8110 g/cm ³ (20°C) ²⁾ |
| 蒸気圧 | 89.0 mmHg (=1.19×10 ⁴ Pa) (25°C) ^{4),5)} |
| 分配係数 (1-オクタノール/水) (log Kow) | 2.99 ⁵⁾ 、2.86 ^{2),4),7)} |
| 解離定数 (pKa) | |
| 水溶性 (水溶解度) | 250 mg/L(25°C) ⁵⁾ 、160 mg/1000g(25°C) ²⁾ 、 213 mg/L (25°C) ⁴⁾ 、213 mg/L (20°C) ⁶⁾ |

(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 |
| <u>好氣的分解</u> (難分解性であると判断される物質 ⁸⁾) |
| 分解率：BOD 0%、GC 0% (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) ⁹⁾ |
| 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：67.7×10 ⁻¹² cm ³ /(分子・sec) (25°C、測定値) ⁴⁾ |
| 半減期：0.95～9.5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：1.04×10 ⁻¹⁶ cm ³ /(分子・sec) (測定値) ¹¹⁾ |
| 半減期：0.62～3.7時間 (オゾン濃度を 3×10 ¹² ～5×10 ¹¹ 分子/cm ³ ¹⁰⁾ と仮定して計算) |

硝酸ラジカルとの反応性（大気中）

反応速度定数： $5.26 \times 10^{-13} \text{ cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$ （測定値）¹¹⁾

半減期：1.5 時間（硝酸ラジカル濃度を $2.4 \times 10^8 \text{ 分子/cm}^3$ ¹²⁾ 仮定して計算）

加水分解性

安定 (pH=4,7,9、50°C、5 日間) ⁵⁾

生物濃縮性

生物濃縮係数(BCF)：（高濃縮性ではないと判断される物質 ⁸⁾）

12～38(試験生物：コイ、試験期間：28 日間、試験濃度：100 $\mu\text{g/L}$)⁹⁾

23～45(試験生物：コイ、試験期間：28 日間、試験濃度：10 $\mu\text{g/L}$)⁹⁾

（備考：定常状態における BCF は、試験濃度 100 $\mu\text{g/L}$ で 14、試験濃度 10 $\mu\text{g/L}$ で 32）

土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc)：150 (PCKOCWIN¹³⁾により計算)

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の化審法の第三種監視化学物質として届出られた製造・輸入数量の推移¹⁴⁾を表 1.1 に示す。OECD に報告している本物質の生産量は 1,000～10,000t/年未満である。

表 1.1 製造・輸入数量の推移

| 平成（年） | 18 | 19 | 20 |
|-------------------------------|---------|---------|---------|
| 製造・輸入数量(t) ^{a), 14)} | 141,600 | 142,645 | 134,601 |

a) 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

② 用途

本物質の主な用途は、シクロヘキサノール、L-リジンの中間原料、特殊溶剤、シクロヘキセンオキサイドほか各種有機合成原料とされている¹⁵⁾。

(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三種監視化学物質（通し番号:8）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 壤 | 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 | 99.9 | 1.0 | 12.9 | 3.3 |
| 水 域 | 0.1 | 98.0 | 1.5 | 87.8 |
| 土 壤 | 0.0 | 0.0 | 85.6 | 8.0 |
| 底 質 | 0.0 | 1.0 | 0.0 | 0.9 |

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 | 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 | 0.00094 | 0.0028 | <0.00028 | 0.013 | 0.00028 | 5/6 | 全国 | 2007 | 2) |
| 公共用水域・海水 μg/L | <0.00028 | <0.00028 | <0.00028 | 0.00034 | 0.00028 | 1/5 | 全国 | 2007 | 2) |
| 底質(公共用水域・淡水) μg/g | 0.00075 | 0.00118 | <0.00055 | 0.0027 | 0.00055 | 1/5 | 全国 | 2007 | 2) |
| 底質(公共用水域・海水) μg/g | <0.00055 | <0.00055 | <0.00055 | <0.00055 | 0.00055 | 0/6 | 全国 | 2007 | 2) |
| 魚類(公共用水域・淡水) μg/g | | | | | | | | | |
| 魚類(公共用水域・海水) μg/g | | | | | | | | | |

(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 0.013 µg/L 程度、海水域では概ね 0.00034 µg/L となった。

表 2.3 公共用水域濃度

| 水 域 | 平 均 | 最 大 値 |
|-----|---------------------------|------------------------|
| 淡 水 | 0.00094 µg/L 程度(2007) | 0.013 µg/L 程度(2007) |
| 海 水 | 概ね 0.00028 µg/L 未満 (2007) | 概ね 0.00034 µg/L (2007) |

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 | | ○ | 3,570 ^{*5} | <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> | 緑藻類 | NOEC GRO(RATE) | 3 | B ^{*1} | B ^{*1} | 3) ^{*2} |
| | ○ | | > 3,570 ^{*5} | <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> | 緑藻類 | EC ₅₀ GRO (RATE) | 3 | B ^{*1} | B ^{*1} | 3) ^{*2} |
| | ○ | | 3,800 | <i>Chlorella pyrenoidosa</i> | 緑藻類 | EC ₅₀ GRO | 2 | B | B | 1)-15322 |
| | | ○ | 18,000 ^{*5} | <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> | 緑藻類 | NOEC GRO(AUG) | 3 | B ^{*3} | B ^{*3} | 2) |
| | ○ | | >18,000 ^{*5} | <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> | 緑藻類 | EC ₅₀ GRO(AUG) | 3 | B ^{*3} | B ^{*3} | 2) |
| 甲殻類 | | ○ | 740 | <i>Daphnia magna</i> | オオミジンコ | NOEC REP | 21 | B ^{*4} | B ^{*4} | 2) |
| | ○ | | 2,100 | <i>Daphnia magna</i> | オオミジンコ | EC ₅₀ IMM | 2 | B ^{*1} | B ^{*1} | 2) |
| | | ○ | 2,400 | <i>Daphnia magna</i> | オオミジンコ | NOEC REP | 15 | B | B | 1)-15322 |
| | ○ | | 5,300 | <i>Daphnia magna</i> | オオミジンコ | EC ₅₀ IMM | 2 | B | B | 1)-15322 |
| | ○ | | 720,000 | <i>Daphnia magna</i> | オオミジンコ | EC ₅₀ IMM | 1 | C | C | 1)-707 |
| 魚類 | ○ | | 5,800 | <i>Oryzias latipes</i> | メダカ | LC ₅₀ MOR | 4 | B ^{*1} | B ^{*1} | 2) |
| | ○ | | 7,100 | <i>Poecilia reticulata</i> | グッピー | LC ₅₀ MOR | 4 | B | B | 1)-15322 |
| 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、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 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
- *3 密閉容器内で試験をしているため0-48時間の結果から毒性値を算出した方がよいこと、また界面活性作用のある助剤を用いていることから、試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした
- *4 界面活性作用のある助剤を用いており、実測濃度の低下も大きいことから試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした
- *5 試験最高濃度区においても有意な毒性影響は見られなかった

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

環境省²⁾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*) 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、設定試験濃度は 0 (対照区、助剤対照区)、1.8、3.2、5.6、10、18mg/L (公比 1.8) であった。試験溶液は、アセトンと界面活性作用のあるポリオキシエチレンソルビット脂肪酸エステル³⁾の混合液 100 μ L/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 4~8% 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。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 (EC₅₀) は 3,570 μ g/L 超、72 時間無影響濃度 (NOEC) は 3,570 μ g/L であった³⁾。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

環境省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* 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、密閉容器使用) で行われ、設定試験濃度は 0 (対照区、助剤対照区)、1.0、1.5、2.2、3.2、4.6、6.8、10 mg/L (公比 1.5) であった。試験溶液は、脱塩素水道水 (硬度 81mg/L、CaCO₃ 換算) を試験用水として、アセトンと界面活性作用のあるポリオキシエチレンソルビット脂肪酸エステル³⁾の混合液 100 μ L/L を助剤として調製された。被験物質の実測濃度は、換水前 (24 時間後) において設定濃度の 54~81% であった。毒性値の算出には実測濃度 (0~24 時間の時間加重平均) が用いられ、48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は 2,100 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⁾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 (48 時間毎換水、密閉容器使用) で行われた。設定試験濃度は 0 (対照区、助剤対照区)、1.0、1.5、2.2、3.2、4.6、6.8、10mg/L (公比 1.5) であった。試験溶液は、脱塩素水道水 (硬度 81mg/L、CaCO₃ 換算) を試験用水として、アセトンと界面活性作用のあるポリオキシエチレンソルビット脂肪酸エステル³⁾の混合液 100 μ L/L を助剤として調製された。被験物質の実測濃度は、換水前に設定濃度の <1~19 % に減少しており、毒性値の算出には実測濃度 (21 日間の時間加重平均値) が用いられた。21 日間無影響濃度 (NOEC) は 740 μ g/L であった。界面活性作用のある助剤を用いており、実測濃度の低下も大きいことから試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした。

3) 魚類

環境省²⁾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、密閉容器使用)で行われ、設定試験濃度は 0 (対照区、助剤対照区)、3.2、4.2、5.6、7.5、10、13、18 mg/L (公比 1.3) であった。試験溶液は、脱塩素水道水 (硬度 76mg/L、CaCO₃ 換算) を試験用水として、アセトンと界面活性作用のあるポリオキシエチレンソルビット脂肪酸エステル³⁾の混合液 100μL/L を助剤として調製された。被験物質の実測濃度は換水前(24 時間後)において設定濃度の 45~83 % に減少しており、毒性値の算出には実測濃度(0~24 時間の時間加重平均) が用いられた。96 時間半数致死濃度(LC₅₀)は 5,800μg/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

| | | | |
|-----|--|-------------------------------|-------------|
| 藻類 | <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> | 生長阻害 ; 72 時間 EC ₅₀ | 3,570μg/L 超 |
| 甲殻類 | <i>Daphnia magna</i> | 遊泳阻害 ; 48 時間 EC ₅₀ | 2,100μg/L |
| 魚類 | <i>Oryzias latipes</i> | 96 時間 LC ₅₀ | 5,800μg/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 (甲殻類の 2,100μg/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 21μg/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 | 3,570μg/L |
| 甲殻類 | <i>Daphnia magna</i> | 繁殖阻害 ; 21 日間 NOEC | 740μg/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 740μg/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 7.4μg/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 7.4μg/L を採用する。

(3) 生態リスクの初期評価結果

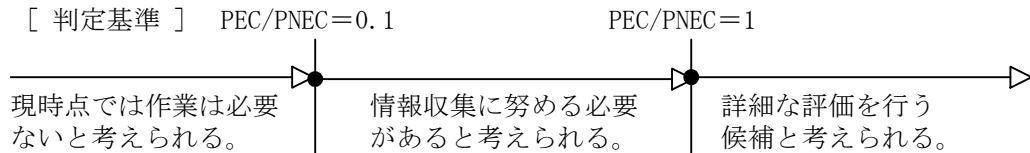
表 3.2 生態リスクの初期評価結果

| 水質 | 平均濃度 | 最大濃度(PEC) | PNEC | PEC/ PNEC 比 |
|----------|----------------------|--------------------|---------|----------------|
| 公共用水域・淡水 | 0.00094μg/L程度 (2007) | 0.013μg/L程度 (2007) | 7.4μg/L | 0.002 |

| 水質 | 平均濃度 | 最大濃度(PEC) | PNEC | PEC/ PNEC 比 |
|----------|-------------------------------------|----------------------------------|---------------------|----------------|
| 公共用水域・海水 | 概ね0.00028 $\mu\text{g/L}$ 未満 (2007) | 概ね0.00034 $\mu\text{g/L}$ (2007) | 7.4 $\mu\text{g/L}$ | 0.00005 |

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 0.00094 $\mu\text{g/L}$ 程度、海水域では概ね 0.00028 $\mu\text{g/L}$ 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 0.013 $\mu\text{g/L}$ 程度、海水域では概ね 0.00034 $\mu\text{g/L}$ 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 0.002、海水域では 0.00005 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) 講談社サイエンティフィック (1985) : 有機化合物辞典 : 378-379.
- 2) Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- 3) O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc. (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: 203.
- 5) OECD High Production Volume Chemicals Program (2005): SIDS (Screening Information Data Set) Initial Assessment Report.
- 6) Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).
- 7) Hansch, C., Leo, A., and Hoekman, D. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington D.C., ACS Professional Reference Book: 23.
- 8) 経済産業公報(2003.1.17).
- 9) 独立行政法人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, 2005.12.19 現在).
- 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: xiv.
- 11) U.S. Environmental Protection Agency, Phys Prop, EPI SuiteTM v.4.00.
- 12) Atkinson, R. and Carter, W. P. L. (1984) Kinetics and Mechanisms of the Gas-Phase Reactions of Ozone with Organic Compounds under Atmospheric Conditions. Chem Rev, 84: 437-470.
- 13) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWINTM v.2.00.
- 14) 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.
- 15) 化学工業日報社(2010) : 15710 の化学商品.

(2) ばく露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPI SuiteTM v.4.00.
- 2) 環境省環境安全課 (2009) : 平成 19 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」

707 : Bringmann, G., and R. Kühn (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.

15322 : Canton, J.H., and R.C.C. Wegman(1983):Studies on the Toxicity of Tribromoethene, Cyclohexene and Bromocyclohexane to Different Freshwater Organisms.Water Res. 17(7):743-747.

2) 環境省(2001) : 平成 12 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