

1
2
3
4 **優先評価化学物質のリスク評価（一次）**
5 **人健康影響及び生態影響に係る評価Ⅱ**
6 **物理化学的性状等の詳細資料**

7
8
9 **二硫化炭素**

10
11 優先評価化学物質通し番号 1
12
13



17 平成 30 年 9 月
18

19 経済産業省
20
21

22
23
24
25
26
27
28
29
30
31

目 次

1 評価対象物質の性状 3

1-1 評価対象物質の設定.....3

1-2 物理化学的性状及び濃縮性.....3

1-3 分解性.....7

2 【付属資料】..... 12

2-1 物理化学的性状等一覧 12

2-2 出典 12

1 評価対象物質の性状

本章では、モデル推計に用いる物理化学的性状データ、環境中における分解性に係るデータを示す。

1-1 評価対象物質の設定

評価対象物質は、二硫化炭素(以下「CS₂」という。)とする。

表 1-1 評価対象物質の構造等

評価対象物質構造	$\text{S} \equiv \text{C} \equiv \text{S}$
評価対象物質名称	二硫化炭素
分子式	CS ₂
優先評価化学物質通し番号	1
CAS 登録番号	75-15-0

1-2 物理化学的性状及び濃縮性

下表にモデル推計に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。なお、表中の下線部は、評価Ⅱにおいて精査した結果、評価Ⅰから変更した値を示している。

表 1-2 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	—	76.15	—	76.15
融点	°C	-111.6 ^{1, 2)}	平均値	-111.6
沸点	°C	42.2 ³⁾	101.325 kPa に換算した測定値	42.2
蒸気圧	Pa	19,400 ³⁾	25 °Cでの測定値を 20 °Cに換算	19,424
水に対する溶解度	mg/L	2,900 ³⁾	20 °Cでの測定値	2,900
1-オクタールと水との間の分配係数(logPow)	—	<u>2.11</u> ⁴⁾	23±2 °Cでの測定値	2.7 ³⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	1,460 ^{2, 5)}	測定値	1,460
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	34 ³⁾	測定値	34
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	60 ^{2, 4, 6, 7)}	コイでの測定値	60
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ⁸⁾	1
解離定数(pKa)	—	—	解離基なし	— ⁹⁾

1) Merck (2013)

2) NITE (2005)

3) ECHA

4) MITI (1987)

5) PhysProp

6) HSDB

7) MOE (2005)

8) MHLW, METI, MOE (2014)

9) 評価Ⅰでは、解離定数は考慮しない

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

①融点

評価Ⅰで採用した値 (-111.6 °C)は、信頼性の定まった情報源¹である Merck (2013)、NITE (2005)に記載された値である。その他 Aldrich (2013)、ATSDR (1996)、CRC、EHC (1979)、HSDB、Mackay (2006)、MOE (2005)、PhysProp において示されている融点は、-112.1～-110.8 °Cの非常に狭い範囲にあり、その算術平均値も-111.6 °Cである。

よって、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、-111.6 °Cを採用する。

②沸点

評価Ⅰで採用した値 (42.2 °C)は、REACH 登録情報 (ECHA)の key study として記載されている。これは、997～998 hPa にて OECD TG 103 に従って測定(GLP)された結果を 101.325 kPa に換算した値である。その他標準圧力における値として、46.5 °C (NITE (2005))など 45.9～46.5 °Cの範囲にあるが、当該情報のみ測定値との記載がある。

よって、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、明確な試験方法で測定された 42.2 °Cを採用する。

③蒸気圧

評価Ⅰで採用した値 (19,424 Pa)は、REACH 登録情報 (ECHA)の key study として記載されている。これは、25 °Cにて OECD TG 104 に従って測定(GLP)された結果を 20 °Cに換算した値である。その他、Mackay (2006)には試験方法の記載はないものの測定値として 34,537 Pa (測定条件 24.582 °Cで 47,359 Pa を 20 °Cに換算した値)がある。

よって、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、明確な試験方法で測定された 19,424 Pa の有効桁数を考慮し、19,400 Pa として採用する。

④水に対する溶解度

評価Ⅰで採用した値 (2,900 mg/L)は、REACH 登録情報 (ECHA)の key study として記載されている。これは、20 °Cにて OECD TG 105 に従って測定(GLP)された結果である。その他、PhysProp には試験方法の記載はないものの測定値として 2,160 mg/L (測定条件 20 °C)がある。また、既存点検事業 (MITI (1988a))で OECD TG 105 に従って測定された結果は、1.78 g/L (測定条件 25±1 °C)であった。

よって、REACH 登録情報 (ECHA)及び既存点検事業 (MITI (1988a))の結果は共に OECD TG 105 に従っているが、ここでは、20～25 °Cで測定された試験であることを考慮し、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、2,900 mg/L を採用する。

¹ 「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」の「3.1 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報源のこと。

⑤log Pow

評価Ⅰで採用した値 (2.7)は、REACH 登録情報 (ECHA)の key study として記載されている。これは、25 °Cにて OECD TG 117 (HPLC 法)に従って測定(GLP)された結果である。その他、NITE (2005)、PhysProp には測定条件等に関する記載はないが測定値として 1.94 がある。なお、NITE (2005)は、EPI Suite (2012)の KowWin ver.1.66 の測定値を参照しているが、その値は PhysProp のデータである。また、既存点検事業で微生物の分解度試験 (MITI (1987))を行う際の参考として行われた OECD TG 107 (フラスコ振とう法)に従った測定結果(GLP)は、23±2 °Cで 2.11 であった。

よって、REACH 登録情報 (ECHA)及び既存点検事業 (MITI (1987))の結果は、OECD TG (117 及び 107)に従っているが、試験方法を考慮し、評価Ⅱにおいては、フラスコ振とう法で行われた既存点検事業 (MITI (1987))の 2.11 を採用する。

⑥ヘンリー係数

評価Ⅰで採用した値 (1460 Pa・m³/mol)は、NITE (2005)、PhysProp、HSDB に記載された測定値である。なお、NITE(2005)は EPI Suite (2012)の HenryWin ver.3.10 の測定値を採用しているが、その値は PhysProp のデータである。また、PhysProp 及び HSDB は、共に同じ文献 (Elliott S (1989)) を引用している。その他、Mackay (2006)では、1577 Pa・m³/mol (測定値)と記載されている。

よって、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、複数の情報源で採用されている 1460 Pa・m³/mol を採用する。

⑦Koc

評価Ⅰで採用した値 (34 L/kg)は、REACH 登録情報 (ECHA)の key study として記載されている。この値は、OECD TG 121 に従って行われた測定値(GLP)である。その他、ATSDR(1996)及び CICAD (2002)では、log Koc として 1.8 (Koc = 63.1 L/kg)、1.79 (Koc = 61.7 L/kg)との記載がある。また、EPI Suite (2012)の KocWin ver.2.00 による推定値では、前述の log Pow = 2.70 を用いた場合、MCI 法では 21.7 L/kg、log Pow 法では 67.7 L/kg となる。

よって、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、明確な試験方法で測定された 34 L/kg を採用する。

⑧BCF

評価Ⅰで採用した値 (60 L/kg)は、既存点検事業で調査された化審法に基づく試験 (MITI (1988b)) (GLP)の結果である。これは、コイを用いた 6 週間の化審法における濃縮度試験で、水中濃度が 0.05 mg/L 及び 0.005 mg/L における濃縮倍率はそれぞれ 6.1 未満及び 60 未満

であることから設定されている。その他、HSDB、MOE (2005)、NITE (2005)に情報があるが、全て既存点検事業の結果を採用している。

よって、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、60 L/kgを採用する。

⑨BMF

評価Ⅰで採用した値は、logPow (2.7)及び BCF (60 L/kg) から化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス（以下、「技術ガイダンス」という。MHLW, METI, MOE(2014))に従って設定したものである。

よって、BMF の測定値が得られなかったことから、評価Ⅱにおいては、logPow (2.11) 及び BCF (60 L/kg)の値から、技術ガイダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従って 1 を用いる。

⑩pKa

当該物質に解離基はない。

1-3 分解性

下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

表 1-3 分解に係るデータのまとめ

項目			半減期 (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期		9	対流圏における総合的反応機序による推定値 ^{1~3)}
	機序別の半減期	OH ラジカルとの反応	5.5	反応速度定数(測定値) ^{3~7)} から、OH ラジカル濃度を 5×10^5 molecule/cm ³ として算出
		オゾンとの反応	NA	
		硝酸ラジカルとの反応	41.8	反応速度定数(測定値) ⁸⁾ から、硝酸ラジカル濃度を 2.4×10^8 molecule/cm ³ として算出
水中	水中における総括分解半減期		NA	
	機序別の半減期	生分解	5	OECD TG 301D の結果からガイダンスに従い半減期に変換 ⁹⁾
		加水分解	365	加水分解反応を受ける化学結合はない ⁵⁾ が、pH13 における測定値を外挿 ^{1~6, 10)} し、OECD TG 111 ¹¹⁾ を参考に修正
		光分解	NA	
土壌	土壌における総括分解半減期		NA	
	機序別の半減期	生分解	5	OECD TG 301D の結果からガイダンスに従い半減期に変換 ⁹⁾
		加水分解	—	加水分解反応を受ける化学結合はない ⁵⁾ ことから、設定しない
底質	底質における総括分解半減期		NA	
	機序別の半減期	生分解	20	土壌中の生分解半減期の4倍値 ⁹⁾
		加水分解	—	加水分解反応を受ける化学結合はない ⁵⁾ ことから、設定しない

1) Mackay (2006)

2) Howard FATE (1989)

3) HSDB

4) CICAD (2002)

5) MOE (2003)

6) NITE (2005)

7) PhysProp

8) NIST

9) ECHA

10) MOE (2005)

11) OECD

NA:情報が得られなかったことを示す

上記分解項目について、精査概要を以下に示す。なお、「総括分解半減期」とは、分解の機序を区別しない環境媒体ごとのトータルの半減期のことを示す。

①大気

大気中での総括分解半減期に関し、Howard FATE (1989)、HSDB、Mackay (2006)に情報があった。Howard FATE (1989)及びHSDBでは、共に同じ文献を引用しており、光による直接的な分解減少はほぼ無視できるが、酸素存在下においては、一酸化炭素、硫化カルボニル、二酸化硫黄、ポリマーを形成し減少するとしている。また、対流圏における寿

命は、高高度にて濃度が急激に減少することが観測されており、これらの理由及び発生源の推計から、対流圏半減期は 8.9 日であるとしている。さらには、大気中で光化学的に生成された原子酸素及び OH ラジカルと CS₂ が反応することでの半減期が約 8.9 (= 9) 日と前述の値と同じであるとしている。Mackay (2006)では、Howard FATE を引用して 9 日としている。

よって、大気中における総括分解半減期は、対流圏における種々の反応等の機序を総合的に考慮して推定された(9 日)を採用する。

大気中における総括分解半減期に対する補足情報として、機序別の半減期に関する情報を以下に示す。

①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

大気中における OH ラジカルとの反応速度定数に関しては、 4.3×10^{-13} cm³/molecule/s (測定法等不明) (ATSDR (1996))、 $1.1 \times 10^{-12} \sim 2.9 \times 10^{-12}$ cm³/molecule/s (室温、相対法) (CICAD (2002)、MOE (2003))、 2.9×10^{-12} cm³/molecule/s (24 °C、相対法) (HSDB、NITE (2005)、PhysProp)、 8.0×10^{-12} cm³/molecule/s (-23 ~ 27 °C、引用文献推奨値) (MOE(2005))、 $2.0 \times 10^{-15} \sim 8.0 \times 10^{-12}$ cm³/molecule/s (複数の測定結果、NIST)が得られた。これらの反応速度定数の中で、最も多くの情報源で採用されている 2.9×10^{-12} cm³/molecule/s とした場合、大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従い 5×10^5 molecule/cm³ として半減期を算出すると 5.5 日となる。

①-2 オゾンとの反応の半減期

大気中におけるオゾンとの反応速度定数に関しては、情報が得られなかった。

①-3 硝酸ラジカルとの反応の半減期

大気中における硝酸ラジカルとの反応速度定数に関しては、測定値として 4.00×10^{-16} cm³/molecule/s (絶対法、NIST)、各種文献レビュー及び推定値として $8.00 \times 10^{-16} \sim 1.89 \times 10^{-15}$ cm³/molecule/s (NIST)が記載されている。測定値である反応速度定数 4.00×10^{-16} cm³/molecule/s とした場合、大気中硝酸ラジカル濃度を技術ガイダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従い 2.4×10^8 molecule/cm³ として半減期を算出すると、41.8 日となる。

②水中

水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、生分解及び加水分解の各機序に関する情報が得られた。

なお、CS₂ が環境水中へ排出された場合、そのヘンリー係数及び蒸気圧を考慮すると、水面から CS₂ は揮発すると考えられ、水中での半減期は 11 分、モデル河川(水深 1 m、流速

1 m/sec、風速 3 m/sec)での半減期が 2.6 時間、モデル湖沼 (水深 1 m、流速 0.05 m/sec、風速 0.5 m/sec)での半減期が 3.5 日と推定されている(ATSDR (1996)、CICAD (2002)、Howard FATE (1989)、HSDB、NITE (2005))。

②-1 生分解の半減期

水中における生分解について、既存点検試験 (MITI (1975))の環保業第 5 号・薬発第 615 号・49 基局 392 号の微生物等による化学物質の分解度試験 (GLP)では、分解度が酸素消費量による結果が 59.1 %、TOC 計では 0 %、吸光光度計では 39.0 %であるとの記載がある。この試験においては、水系での試料残留が極端に少なく 2 週間の試験期間中に揮発したと考察されている。また、既存点検試験 (1987) では、前述と同じく環保業第 5 号・薬発第 615 号・49 基局 392 号の微生物等による化学物質の分解度試験 (GLP)において、28 日間の GC 法で 0 ~ 5 %であるとの記載がある。この試験においては、CS₂と炭酸ガス吸収剤であるソーダライムとの反応及び CS₂の揮発が予想されたため、密閉びんを用いたソーダライム有り及び無しの系で水+被験物質系の保持試験を実施し、GC 分析により被験物質を定量している。この結果、CS₂はソーダライム存在下で残留が低く、ソーダライムと反応するものと考えられ、ソーダライムを用いる閉鎖系酸素消費量測定装置による生物化学的酸素要求量 BOD の測定は不可能であると判断し、GC 分析による直接定量法により分解度を算出したと考察されている。この既存点検試験 (MITI (1987))の結果を基に、分解度は 2 % (HSDB、NITE (2005)、MOE (2005))又は 0 % (MOE (2003))であるとの記載がある。一方で、REACH 登録情報 (ECHA)では、OECD TG 301 D (GLP)に基づき、80 %以上 (DOC removal)との記載がある。

以上の情報から、水中の生分解半減期については、試験条件等を考慮し、OECD TG 301 D の試験結果である分解度 80 %以上を採用し、これをガイダンスに従い生分解半減期へ換算した (5 日)を採用する。ただし、前述のように、生分解半減期と水中での揮発による半減期を比較すると、揮発による半減期は、最も期間が長いモデル湖沼においても 3.5 日であるため、水中の生分解半減期 5 日と比較すると短いことに留意する必要がある。

②-2 加水分解の半減期

水中における加水分解について、CS₂には加水分解されやすい化学結合がないとの記載がある (MOE (2003))。一方で、25 °C、pH 13 の環境において加水分解による半減期は 1 時間であり (測定値)、これを 25 °C、pH 9 の環境に外挿すると半減期が 1.1 年となるとの記載がある (ATSDR (1996))。また、この加水分解による半減期 1.1 年 (測定値の外挿、約 402 日)については、複数の情報源で採用されている (CICAD (2002)、Howard FATE (1989)、HSDB、Mackay (2006)、MOE (2003 及び 2005)、NITE (2005))。

よって、水中における加水分解の半減期については、測定値である 25 °C、pH 13 での半減期 1 時間を採用し、これを pH 7 の環境に外挿すると半減期が 41,667 日となる。ただし、

OECD TG 111 において、加水分解半減期が 1 年以上となる場合、加水分解的には安定であることからこれ以上の追加の試験を求めている。そのため、半減期 41,667 日は 1 年以上であることから、加水分解半減期を (365 日)とする。

②-3 光分解の半減期

水中における光分解の半減期に関しては、情報が得られなかった。

③土壌

土壌中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、生分解の機序別の半減期に関する情報が得られた。

③-1 生分解の半減期

土壌中における生分解については、情報が得られなかったが、CS₂は土壌消毒剤としてバクテリアに対して毒性を示すため、微生物分解は期待できないとの記載があり(NITE (2005))、また、蒸気圧及び土壌吸着性に基づき土壌からは速やかに揮発するとの記載がある(HSDB、CICAD (2002)、Howard FATE (1989))。

よって、土壌中における生分解については、情報が得られていないことから水中における生分解と同様に(5 日)とする。

ただし、前述のように、土壌からCS₂は速やかに揮発するものと考えられることから、生分解半減期5 日を迎える前に大気中へ揮発してしまう可能性があることに留意する必要がある。

③-2 加水分解の半減期

土壌中における加水分解については、情報が得られなかった。ただし、CS₂は加水分解反応を受ける化学結合はない(MOE (2003))との記載もあることから、評価Ⅱでは土壌中における加水分解の半減期は設定しない。

④底質

底質中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、生分解の機序別の半減期に関する情報が得られた。

④-1 生分解の半減期

生分解については、情報が得られなかった。

よって、底質中における生分解半減期については、情報が得られていないことから土壌中の生分解と同様の値を採用することとし、ガイダンスに従い、土壌中における生分解半減期の4倍の値 (20 日)とする。

ただし、CS₂は有機物質への吸着に対する親和性は低いと考えられることから、底質に分配及び残留する可能性は非常に低い(CICAD (2002))。また、前述のように CS₂は揮発性が高いことから、ほとんどの場合、種々の分解過程を経る前の段階で大気中に揮発する可能性があることに留意する必要がある。

③-2 加水分解の半減期

底質中の加水分解については、情報が得られなかった。ただし、CS₂は加水分解反応を受ける化学結合はない(MOE (2003))との記載もあることから、評価Ⅱでは底質中における加水分解の半減期は設定しない。

2 【付属資料】

2-1 物理化学的性状等一覧

収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

2-2 出典

Aldrich (2013): Sigma-Aldrich 試薬カタログ, 2013.

ATSDR (1996): U.S. DEPARTMENT OF HEALTH AND HUMAN SERVICES, Public Health Service, Agency for Toxic Substances and Disease Registry. Toxicological Profiles For Carbon Disulfide, 1996.

CICAD (2002): Concise International Chemical Assessment Document 46, Carbon Disulfide, 2002

CRC: Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 96th ed., CRC Press, 2015-2016.

ECHA: European Chemicals Agency. Information on Chemicals - Registered substances.

<http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>,
(2017-10-05 閲覧).

EHC (1979): World Health Organization. International Programme on Chemical Safety, Environmental Health Criteria 10, Carbon Disulfide, 1979.

EPI Suite (2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11, 2012.

Howard (1989): Howard, P. H. et al. Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. CRC Press, 1989.

HSDB: US National Institutes of Health. Hazardous Substances Data Bank (HSDB).

<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, (2017-10-05 閲覧).

Mackay (2006): Mackay, D., Shiu, W. Y., Ma, K. C., & Lee, S. C. Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. 2nd edition. Volume IV, CRC Press, 2006.

Merck (2013): The Merck Index, 15th Edition. Merck & Co. Inc.

MHLW, METI, MOE(2014): 化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイド
ンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

- 302 MITI (1975): 二硫化炭素 (試料 No.K-53) の分解度試験. 昭和 49 年度特定化学品安全対策
303 費補助金事業, 1975.
- 304 MITI (1987): 二硫化炭素 (被験物質番号 No.K-53) の微生物による分解度試験. 既存化学物
305 質点検, 1987.
- 306 MITI (1988a): 二硫化炭素 (被験物質番号 No.K-53) の物理化学性状の測定. 既存化学物質
307 点検, 1988.
- 308 MITI (1988b): 二硫化炭素 (被験物質番号 No.K-53) のコイにおける濃縮度試験. 既存化学物
309 質点検, 1988.
- 310 MOE (2003): 環境省. 化学物質の生態リスク初期評価 第 2 巻, 二硫化炭素. 2003.
- 311 MOE (2005): 環境省. 化学物質の環境リスク初期評価 第 4 巻, 二硫化炭素. 2005.
- 312 NIST: The National Institute of Standards and Technology (NIST). NIST Chemistry WebBook.
313 <http://webbook.nist.gov/chemistry/>, (2017-10-05 閲覧).
- 314 NITE (2005): NITE. 化学物質の初期リスク評価書, 二硫化炭素. Ver. 1.0, No. 10, 2005.
- 315 PhysProp: Syracuse Research Corporation (SRC). SRC PhysProp Database. (2017-10-05 閲覧).
- 316