

1				目	次		
2	1 評価対	対象	物質の性状			 	
3 4	1 - 1 1 - 2	L 4 2	が理化子的性仏及い展離性 }解性			 	1 1
5	2【付属	資	斗】			 	5
6	2 - 1	L 4	为理化学的性状等一覧			 	9
7	2-2	2 2	その他			 	10
8							
9							

1 1 評価対象物質の性状

2 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
 3 タを示す。

5 1-1 物理化学的性状及び濃縮性

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表 1-1 に示す。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 1-1 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*

					評価Ⅰで用		
	項目	単位	採用値	詳細	いた値(参		
					考)		
	分子量	—	93.13	-	93.13		
	融点	°C	-6. 2 ¹⁻⁵⁾	測定値	-6. 2 ¹⁾		
	沸点	S	184. 4 ²⁾	101.3 kPa での測定値	184. 4 ¹⁾		
	蒸気圧	Pa	40 ²⁾	20℃での測定値	40 ¹⁾		
	水に対する溶解度	mg/L	3. 5 × 10 ⁴ ²⁾	20℃での測定値	3. 5 × 10 ⁴ ¹⁾		
	1-オクタノールと水との間		0 012)	pH7.5、25℃での非解離体に対す	0.001)		
	の分配係数(logPow)	_	0.91	る測定値	0.90		
	ヘンリー係数	Pa⋅m³/mol	0. 205 ^{2, 6-8)}	測定値	0. 106 ¹⁾		
	有機炭素補正土壌吸	l /kg	110 ¹ , 2, 9)	5+焼での測字値	410 ¹⁾		
	着係数(Koc)	L/ Kg	410	5工場での別と値	410		
	生物濃縮係数(BCF)	L/kg	<u>2. 6</u> ^{1, 3, 9)}	ゼブラフィッシュでの測定値	3 . 16 ¹⁰⁾		
	生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPowとBCF から設定 ¹¹⁾	1		
	解離定数(pKa)	_	4 . 6 ^{3, 8)}	測定値	12)		
	※平成 29 年度第1回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビ:						
	ー会議(平成 29 年 5 月 25 日)で了承された値						
	1) ECB (2004)		7) NI	TE (2007)			
	2) ECHA		8) Ph	ysProp			
	3) EPA (2009)		9) Ma	ckay (2006)			
	4) IUCLID (2000)		10) E	PI Suite (2012)			
	5) MOE (2002)		11) M	HLW, METI, MOE(2014)			
	6) HSDB		12) 冨	平価!においては解離定数は考慮し	<i>.</i> ない		
	上記性状項目につい	て、精査概	要を以下に示す	0			
(1)	融点						
_	証価Ⅰで採田□た値	(-6.2°C))+	「信頼性の定う	ドッた信報酒1 である FCR (2004) ECHA		
	11 画 1 く沐刀 しに胆	<u>、 0.4</u> しれみ	、 IF 祝 Iエッノ 化 a		JUUHIN LUUIIA,		

23 EPA (2009)、IUCLID (2000)、MOE (2002)に記載された値である。ECHA 及び EPA (2009)で
 24 測定値と記載されており、評価Ⅱにおいてもこの値 (-6.2℃)を用いる。

26 ②沸点

27 評価 I で採用した値 (184.4℃)は、信頼性の定まった情報源である CCD、ECB (2004)、ECHA
28 に記載された標準圧力 (101.3 kPa)での値である。上記以外に標準圧力での値として、184.1℃
29 (CRC)、184~186℃ (NITE (2007))もあるが、ECHA のみが測定値と記載している。このため、

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。

- 1 評価Ⅱにおいてもこの値 (184.4℃)を用いる。
- 2
- 3 ③蒸気圧

4 評価 I で採用した値 (40 Pa)は、信頼性の定まった情報源である ECB (2004)、ECHA、HSDB、
5 Mackay (2006)、MOE (2002)及び NITE (2007)に記載された 20℃での値である。20℃の値とし
6 て 50 Pa (IUCLID (2000))、59.7 Pa (Mackay (2006);回帰式による 20℃内挿値)、42.9 Pa (Mackay
7 (2006);回帰式による 20℃内挿値)もあるが、40 Pa は ECHA で測定値と記載されている。こ
8 のため、評価 II においてもこの値 (40 Pa)を用いる。

- 9
- 10 ④水に対する溶解度

評価 I で採用した値 (3.5×10⁴ mg/L)は、ECB (2004)に記載された 20℃での値である。20℃
 の測定値として、3.5×10⁴ mg/L (ECHA)、3.6×10⁴ mg/L (EPA (2009))、25℃の測定値として、
 3.6×10⁴ mg/L (MITI(1993a)、PhysProp)、3.622×10⁴ mg/L、3.867×10⁴ mg/L (ともに Mackay

14 (2006))との記載もある。これらの 25℃の測定値から 20℃の値を 3.5×10⁴ mg/L とすることに 15 問題ないいままとれてため、証価単にないてきこの値(2.5×104 mg/L)な思いて

15 問題ないと考えられるため、評価Ⅱにおいてもこの値 (3.5×104 mg/L)を用いる。

- 16
- 17 ⑤logPow

18 評価 I で採用した値 (0.90)は、ECB (2004) に記載された値 (20℃、フラスコ振とう法)であ る。他には、0.89 (測定 pH: 5.6、フラスコ振とう法) (Mackay (2006))、0.89 (測定 pH: 7.4、フ 19 20 ラスコ振とう法) (Mackay (2006))、0.91 (測定 pH: 7.5、測定温度: 25℃、GLP 試験) (ECHA)、 21 0.93 (測定 pH:7、フラスコ振とう法) (Mackay (2006))、0.98 (測定 pH:7.5、フラスコ振とう 法) (Mackay (2006))が記載されている。アニリンは解離性物質であり、後述のように、pH 5.6、 22 23 7.0、7.4 及び 7.5 ではそれぞれ、90.9%、99.6%、99.8%及び 99.9%が非解離体として存在す るため、pH 5.6 の値を除いて上記の値は非解離体に対する値と考えることができる。評価Ⅱに 24 25 おいては測定 pH と温度が明らかな GLP 試験で得られた値 (0.91)を非解離種に対する値とし 26 て用いる。

27

33

28 ⑥ヘンリー係数

29 評価 I で採用した値 (0.106 Pa·m³/mol)は、ECB (2004)に記載された値である。ECHA、EPA
 30 (2009)、HSDB、NITE (2007)及び PhysProp ではいずれも 0.205 Pa·m³/mol と記載されてお
 31 り、ECHA、NITE (2007)及び PhysProp ではこの値が測定値であるとも記載されている。こ
 32 のため、評価 II においては 0.205 Pa·m³/mol を用いる。

34 ⑦Koc

35 評価 I で採用した値 (410 L/kg)は、ECB (2004)、ECHA、Mackay (2006)において記載されて
36 いる値である。この値は、以下の2土壌を用い、土壌と滅菌蒸留水溶液の容積比=1:5、48時
37 間、20℃で振とうの条件で Koc を測定した Pillai ら (1982)¹の試験での測定値であり、Koc は、
38 Hagerstow 土壌で 130 L/kg (滅菌)及び 310 L/kg (非滅菌)、Palouse 土壌で 410 L/kg (滅菌)及び 910
39 L/kg (非滅菌)であった。

40 41

Pillai ら(1982) の研究で用いられた土壌の性状

土壤	Hagerstow 埴壤土	Palouse シルト質壌土	
pН	6.6	5.1	

¹ Pillai, P., et al. (1982) Chemosphere 11: 299-317.

有機物含量,%	2.5	3.4
粘土含量,%	34	25
シルト含量,%	42	58
カチオン交換容	10	22
量, meq/100 g	10	22
表面積, m²/g	25	90
圃場容水量,%	31.3	32.0
粘土鉱物	バーミキュライ ト、カオリナイ ト	モンモリロナイ ト

1

ECB (2004)は、「アニリンは吸着前に一部分解されるため、非滅菌土壌で決定された Koc は
 過大に推定されていると思われる。」として、Koc 値として 410 L/kg を採用している。

4

5 上記以外の値として、HSDB、Mackay (2006)では、Gawlik ら(1998)¹が以下の5±壌を用い、
 6 OECD TG 106 (土壌と 0.01 M CaCl₂溶液の容積比=1:5、24 時間、室温で振とう)で測定した

7 値 (EUROSOIL 1:497.7 L/kg; EUROSOIL 2:43.8 L/kg; EUROSOIL 3:120.3 L/kg;

8 EUROSOIL 4:109.8 L/kg; EUROSOIL 5:195.0 L/kg)を記載している。

- 9
- 10

Gawlik ら(1998) の研究で用いられた土壌の性状

	,				
土壤	起源	粘土 (%)	有機炭素 (%)	pH (0.01 M CaCl ₂)	土性
EUROSOIL 1	シチリア島(イタリア)	75.0	1.3	5.7	埴土
EUROSOIL 2	ペロポネソス(ギリシ ャ)	22.6	3.7	7.4	シルト質壊 土
EUROSOIL 3	ウェールズ(イギリス)	17.0	3.45	5.2	壤土
EUROSOIL 4	ノルマンディ (フラン ス)	20.3	1.55	6.5	シルト
EUROSOIL 5	シュレースヴィヒ=ホ ルシュタイン(ドイツ)	6.0	9.25	3.2	壤質砂土

11

12 また、Mackay (2006)では、Gawlik ら(2000)² が以下の5土壌を用い、OECD TG 106 (土壌
13 と 0.01 M CaCl₂溶液の容積比=1:5、24 時間、室温で振とう)で測定した値(EUROSOIL 1:

14 242.1 L/kg; EUROSOIL 2: 31.8 L/kg; EUROSOIL 3: 19.0 L/kg; EUROSOIL 4: 27.4 L/kg; 15 EUROSOIL 5: 136.8 L/kg)を記載している。

- 16
- 17

Gawlik ら(2000) の研究で用いられた土壌の性状

土壤	起源	粘土 (%)	有機炭素 (%)	pH (0.01 M CaCl ₂)	土性
EUROSOIL 1	シチリア島(イタリア)	75.0	3.29	5.7	埴土
EUROSOIL 2	ペロポネソス(ギリシ ャ)	22.6	2.39	7.2	シルト質壊 土
EUROSOIL 3	ウェールズ(イギリス)	17.0	3.32	5.9	壤土
EUROSOIL 4	ノルマンディ (フラン ス)	20.3	1.36	6.8	シルト
EUROSOIL 5	シュレースヴィヒ=ホ ルシュタイン(ドイツ)	6.0	4.43	3.2	壤質砂土

¹ Gawlik, BM., et al. (1998) Chemosphere 36: 2903-2919.

² Gawlik, BM., et al. (2000) Chemosphere 41: 1337-1347.

さらに、Mackay (2006)では、Li ら(2001)¹ が以下の5土壌を用い、バッチ平衡化法(振とう
 時間:24時間、温度:23±3℃)で測定した値(Toronto:34.7 L/kg; Chalmers:15.8 L/kg;
 Drummer:10.0 L/kg; Bloomfield:20.0 L/kg; Okoboji:11.0 L/kg)も記載している。

- 4
- 5

Liら(2001)の研究で用いられた土壌の性状

土壤	pH^a	砂 (%)	シルト (%)	粘土 (%)	有機炭素 (%)	CEC ^b (cmol _c /kg)
Toronto	4.4	11.9	67.6	20.5	1.34	11.2
Chalmers	6.5	11.1	72.8	16.0	1.17	13.0
Drummer	7.2	13.0	66.0	21.2	2.91	26.5
Bloomfield	6.4	81.4	11.0	7.6	0.36	4.4
Okoboji	7.4	31.8	36.2	32.0	4.98	36.2

a: 土壌の重量と水の容積が1:1の懸濁液での測定値

7 b: カチオン交換容量

8

6

9 以上のように、Pillai ら(1982)、Gawlik ら(1998, 2000)及びLiら (2001)により報告された Koc
10 は 10.0~497.7 L/kg の範囲 (Pillai ら(1982)の非滅菌土壌データを除く)であるが、上記の ECB
11 (2004)のコメントを考慮し、評価IIでも Pillai ら(1982)の Palouse 土壌 (滅菌)で測定された 410
12 L/kg が妥当と判断し、この値を用いる。

13

14 ⑧BCF

15 評価 I で採用した値 (3.16 L/kg)は、BCFBAF v3.01 で logPow (0.90)を用いて推計した値で
ある。ECB (2004)、EPA (2009)、Mackay (2006)では、Zok ら (1991)²により測定されたゼブラ
7 フィッシュでの値 2.6 L/kg が記載されている。評価 II においてはこの値 (2.6 L/kg)を用いる。
なお、Zok らの試験は、pH 8.1±0.1、26±1℃で行われており、採用した BCF は、非解離種に
対する値と考えられる。

20

21 9BMF

22 評価 I で採用した値は、logPow (0.90)及び BCF (3.16 L/kg) から化審法における優先評価化
 23 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,
 24 MOE(2014))に従って設定したものである。BMF の測定値は得られなかったため、評価 II におい
 25 ては、logPow (0.91)及び BCF (2.6 L/kg)から技術ガイダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従っ
 26 て 1 を用いる。

27

28 10рКа

アニリンの酸解離定数 (pKa)として、Mackay (2006)、NITE (2007)、PhysProp 及び EPA (2009)
 で 4.6 と記載されており、PhysProp 及び EPA (2009)で測定値と記載されている。このため、
 評価 II では、この値 (4.6)を用いる。

32 アニリンの共役酸の pKa が 4.6 の場合、pH 5.0、6.0、7.0、8.0、9.0、10.0 の水中では、それぞ
 33 れ 71.5%、96.2%、99.6%、100.0%、100.0%及び 100.0%が非解離種として存在する。

¹ Li, H., et al. (2001) Chemosphere 44: 627-635.

² Zok, S., et al. (1991) Sci. Total Environ. 109/110: 411-421.

1 1-2 分解性

2 表 1-2 にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

3 4

表 1-2 分解に係るデータのまとめ*

	Ĭ	頁目	半減期 (日)	詳細
	大気におけ	る総括分解半減期	NA	
	機 序 別 の 半減期	OH ラジカルとの反応	0. 15	反応速度定数の測定値 ^{1.2)} から、OHラ ジカル濃度を5×10 ⁵ molecule/cm ³ と して算出
大気		オゾンとの反応	10. 2	反応速度定数の測定値 ³⁾ から、オゾ ン濃度を 7×10 ¹¹ molecule/cm ³ とし て算出
		硝酸ラジカルとの反 応	223	反応速度定数の測定値 ⁴⁾ から、硝酸 ラ ジ カ ル 濃 度 を 2.4 × 10 ⁸ molecule/cm ³ として算出
	水中におけ	る総括分解半減期	7. 2	夏期 (29℃)に測定された河川水中 での一次分解 (分解物への構造変 化)の半減期 ⁵⁾
水中	機序別の	生分解	_	米国の富栄養状態の池の水中で約6 日の一次分解半減期。揮発と自動酸 化はほとんど寄与しない ⁶⁾ 半減期1.5日未満で一次分解。塩化 水銀が添加された対照区では、試験 期間中に濃度の有意な減少はなく、 水中での消失の支配プロセスは生分 解 ⁷⁾
	干减别	加水分解	—	加水分解反応を受ける基はない ^{®)}
		光分解	_	表層水中の消失への光分解の寄与率 は、生分解より少なくとも1桁低い ⁶⁾ 光減衰係数を考慮すると光分解半減 期は約30倍長くなり、生分解が最も 重要な消失プロセス ⁷⁾
	土壌におけ	る総括分解半減期	NA	
土壌	機序別の	生分解	7	環境条件下で想定される値 ⁹⁾
	半減期	加水分解	—	加水分解反応を受ける基はない [®]
	底質におけ	る総括分解半減期	NA	
底質	機序別の	生分解	28	土壌中生分解半減期の4倍と仮定
	半減期	加水分解	_	加水分解反応を受ける基はない ^{®)}

5 6

8

9

※平成 29 年度第1回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュ 一会議(平成 29 年 5 月 25 日)で了承された値

6) Lyons ら (1984)

7) Torängら (2002)

NA:情報が得られなかったことを示す

8) ECB (2004)

9) EPA (1994)

- 7 1) HSDB
 - 2) Mackay (2006)
 - 3) NIST
- 10 4) EPI Suite (2012)
- 11 5) Hwang ら (1987)
- 12
- 13

14 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15 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 ①大気

2 大気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、機序別の半減期に関する情報3 が得られた。

4 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

5 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、1.2×10⁻¹⁰ cm³/molecule/s (23℃、
6 閃光光分解-共鳴ケイ光法) (Mackay (2006)、NIST)、1.18×10⁻¹⁰ cm³/molecule/s (23℃、相対法)
7 (Mackay (2006)、NIST)、1.11×10⁻¹⁰ cm³/molecule/s (25℃) (ECB (2004)、Mackay (2006)、

8 PhysProp)、1.10×10⁻¹⁰ cm³/molecule/s (25℃、閃光光分解-共鳴ケイ光法) (HSDB、Mackay
 9 (2006))が記載されている。反応速度定数として、1.10×10⁻¹⁰ cm³/molecule/s を採用し、大気中

10 OH ラジカル濃度を技術ガイダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従い 5×10⁵ molecule/cm³と

- 11 して、半減期を 0.15 日と算出した。評価 Ⅱではこの値 (0.15 日)を用いる。
- 12 ①-2 オゾンとの反応の半減期
- 13 大気中におけるオゾンとの反応速度定数に関しては、1.12×10⁻¹⁸ cm³/molecule/s (23℃、直
 14 接法) (NIST)が記載されている。この反応速度定数を採用し、大気中オゾン濃度を技術ガイダン
 15 ス (MHLW, METI, MOE(2014))に従い 7×10¹¹ molecule/cm³ として、半減期を 10.2 日と算出し
- 16 た。評価Ⅱではこの値 (10.2 日)を用いる。
- 17 ①-3 硝酸ラジカルとの反応の半減期
- 18 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、1.5×10⁻¹⁶ cm³/molecule/s (EPI
- 19 Suite(2012))が記載されている。この反応速度定数を採用し、大気中硝酸ラジカル濃度を技術ガ

20 イダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従い 2.4×10⁸ molecule/cm³として、半減期を 223 日と

- 21 算出した。評価Ⅱではこの値 (223 日)を用いる。
- 23 ②水中

22

24 水中での総括分解半減期に加えて、生分解、加水分解及び光分解の各機序に関する情報が得25 られた。

- 26 ②-1 総括半減期
- 27 Hwangら (1987)¹は、蒸留水及び米国 Georgia 州の Skidaway 川河口域の河川水 (表層 10cm から採水)中のアニリンの分解を調べた。150 mL 容の石英フラスコ中のアニリン(初濃度 25 µ 28 g/L、¹⁴C 標識)に太陽光を照射(北緯 32°)した場合、夏期(29℃、照度:5.2 Einstein/m²/h)と 29 冬期(14℃、照度: 2.9 Einstein/m²/h))、水中のアニリンの一次分解(分解物への構造変化)の半 30 減期は 27 時間 (夏期)及び 71 時間 (冬期)であった。一方、暗所では、173 時間 (夏期)で、冬 31 期は半減期を計算できるほどの分解は見られなかった(半減期はいずれも「昼間時間」)。さら 32 に、蒸留水中と河川水中での分解半減期を比較から、フミン質による光増感の分解への寄与は 33 34 ないと結論している。
- 35 Toräng ら (2002)²は、Rhine 川に放流する BASF 下水処理場の 1.2 km 上流から 25.8 km 下
 36 流までの河川水中 (放流地点での川幅 300 m、水深約 3.5 m、pH 7.8)のアニリン濃度を測定
 37 し、物質収支に基づいて分解速度と半減期を推定した。21.9 と 14.7℃の異なる水温の日に実施
 38 された野外試験におけるアニリンの一次分解 (構造変化)の 1 次速度定数は、ともに 1.8 1/day
 39 で、河川水中での総括分解半減期は 9 時間 (0.4 日)であった。さらに、このアニリンの消失に
 40 揮発、加水分解及び光分解はほとんど寄与しないと結論している。
- 41 以上の結果及び以下の生分解、加水分解、光分解に関する情報から、実環境下の水中でのア

¹ Hwang,HM. et al. (1987) Wat. Res., 21(3): 309-316.

² Toräng, L. et al. (2002) Chemosphere, 49: 1257–1265.

- ニリンの分解には生分解が非常に大きな寄与をすると判断されることから、水中での総括分解
 半減期は Hwang ら (1987)の暗所での半減期 173 時間 (7.2 日)を採用する。
- 3 ②-2 生分解の半減期

4 Lyons ら (1984)¹は、米国 New Jersey 州の富栄養状態の池の水 (pH 6.9~7.1)を用いて、暗
 5 所、20℃の条件下でアニリンの分解の測定と分解経路の確認を行い、約6日の一次分解半減期
 6 を報告している。また、揮発と自動酸化はほとんど寄与しないと結論している。

7 Torängら (2002)は、野外試験と同時にバッチ試験 (15または21℃、暗所、11日間)を実施し、

8 アニリンは半減期 1.5日未満で一次分解したと報告している。また、添加された初期¹⁴Cの50%
9 が生分解(無機化)の直接的な証拠である¹⁴CO₂として、23%がバイオマス中に、そして12%が
10 溶存有機生成物(生合成)として回収され、塩化水銀が添加された対照区では、試験期間中にア
11 ニリンと¹⁴Cの濃度はいずれも有意な減少を示さなかったことから、水中でのアニリン消失の

- 12 支配プロセスは生分解であると結論している。
- Howard (1989)では、富栄養池の水中でアニリンは6日の半減期で生分解されるとの記載があ
 るが、嫌気的条件下での値であった。

15 なお、アニリンは OECD TG 301C の分解度試験における標準易分解物質であり、OECD TG
301C に準拠した GLP 試験では、14 日間の BOD 分解度は 70、67、68% (N の無機化を NO2
とした場合)、87、83、85% (N の無機化を NH₃ とした場合)、TOC 分解度は 98、99、99%、
HPLC 分解度は 100、100、100%であった (MITI(1993b))。

19 ②-3 加水分解の半減期

- 20 EPA (2009)において、pH 6.0、30℃、48 時間の条件下で 11.3%の消失が測定されたと記載
 21 されているが、アニリンは加水分解を受ける基を有していない。ECB (2004)では、「分子構造
 22 から、加水分解は環境条件下では想定されない」と記載されており、Toräng ら (2002)でも、
- 23 「加水分解反応を受ける基がないため、アニリンの加水分解は非常に遅く、pH 5~9、15℃で
 24 半減期は50年超と推定される」と記載されている。

25 ②-4 光分解の半減期

Lyons ら (1984)は、表層水中のアニリンの消失への光分解の寄与率は、生分解よりも少なく
 とも1 桁低いと結論している。

28 Toräng ら (2002)は、Hwang ら (1987)の試験では、蒸留水中のアニリンの光分解による半
 29 減期は、夏期で 33「昼間時間」、冬期で 53「昼間時間」と測定されているが、この半減期は 150
 30 mL 容の石英フラスコに太陽光を照射して得られた値であり、水深 3.5m の濁った Rhine 川で
 31 の実際の光分解半減期は、10m⁻¹の典型的な光減衰係数を仮定すると約 30 倍長くなり、生分解
 32 がアニリンの最も重要な消失プロセスであると結論している。

34 ③土壤

33

35 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36 する情報が得られた。

37 ③-1 生分解の半減期

38 ECB (2004)では、Süß ら (1978)の試験結果を基に、暴露評価に用いる土壌中での生分解半
 39 減期を 350 日と設定している。この試験では、¹⁴C 標識アニリンを用い、1 mg/kg の初濃度で
 40 4種の土壌での無機化が 10週間に亘って調べられた。10週間後に 16.2~26.3%のアニリンが、

41 異なる土壌で¹⁴CO₂に無機化された。無機化の速度は1週間後に最大となり、2週間までに全

- 42 生成 ¹⁴CO₂ の 50%が検出され、その後は、試験終了時まで分解速度は約 1%/週で一定であっ
- 43 た。また、¹⁴Cの57.3~67.4%が4種の土壌で検出された。この結果から、ECB(2004)は、試

¹ Lyons, CD. et al. (1984) Appl. Environ. Microbiol., 48: 491-496.

1 験開始時にアニリン(20%程度)は比較的急速に分解されるが、残りの80%程度のアニリンは
 2 フミン質と不可逆的な共有結合し、分解速度がかなり減少すると判断し、1週間当たり約1%の
 3 分解速度から、半減期を350日と外挿している。

4 EPA (1994)では、土壌中の多くの微生物は炭素源、窒素源としてアニリンを利用でき、種々の単離土壌微生物により、アニリンの44.2%が10日で、そして20日までにさらに12%がCO2に
6 分解されること、そして、土壌フミン質と結合したアニリンは酸化を受けると記載されている。
7 さらに、アニリンのCO2への無機化の半減期は、温度、湿度、照度が管理され、揮発物質(分)

- 8 解生成物を含む)捕集装置付きの石英製の土壌モデルエコシステム1に充填された粘土質土壌に
- 9 おいて4日で、環境条件下では、土壌中アニリンの半減期は1週間以内と記載されている。
- 10 Howard (1989)でも、滅菌土壌中で土壌はアニリンの酸化を触媒するとの記述がある。
- 11 以上から、評価Ⅱでは、土壌中の生分解半減期として7日を用いる。
- 12

15

13 ③-2 加水分解の半減期

- 14 加水分解反応を受ける基はないと判断し、評価Ⅱでは半減期は設定しない。
- 16 ④底質
- 17 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。また、機序別の半減期に関する
- 18 情報も得られなかった。
- 19 ④-1 生分解の半減期
- 20 半減期に関するデータは得られなかったため、底質中での生分解半減期は、土壌中の生分解
 21 半減期の4倍である28日とする。
- 22 ③-2 加水分解の半減期
- 23 加水分解反応を受ける基はないと判断し、評価 II では半減期は設定しない。

¹ Figge, K., J. Klahn and J. Koch (1983) Regul. Toxicol. Pharmacol. 3: 199-215.

1 2 【付属資料】

2 **2-1** 物理化学的性状等一覧

3 4

収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

4

5 出典)

6 CCD: Richard J. Lewis Sr., Gessner Goodrich Hawley. Hawley's Condensed Chemical
7 Dictionary. 15th ed., 2007.

8 CRC: Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 94th ed., CRC Press,
9 2013-2014.

10 ECB (2004): European Chemicals Bureau. European Union Risk Assessment Report, aniline, PL-1 50.

ECHA: European Chemicals Agency. Information on Chemicals – Registered substances.
 http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances, (2017-02-02 閲覧).

13 EPA (1994): USEPA. OPPT Chemical Fact Sheets, Aniline Fact Sheet: Support Document

14 (CAS No. 62-53-3), December, 1994

EPA (2009): USEPA. Screening-Level Hazard Characterization. Monocyclic Aromatic
Amines Category, September, 2009

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

18 Figge, K., J. Klahn and J. Koch (1983) Testing of chemicals by evaluation of their distribution and

degradation patterns in an environmental standard system. Regulatory Toxicology and Pharmacology 3:199-215.

21 Gawlik, BM., et al. (1998) Application of the European reference soil set (EUROSOILS) to a HPLC-

screening method for the estimation of soil adsorption soils coefficients of organic compounds.
Chemosphere 36: 2903-2919.

- Gawlik, BM., et al. (2000) Estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds by HPLC screening using the second generation of the European reference soil set. Chemosphere 41: 1337-1347.
- Howard(1989): Howard, P. H. et al. Handbook of Environmental Fate and Exposure Data
 for Organic Chemicals. CRC Press, 1989.
- 28 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-
- 29 bin/sis/htmlgen?HSDB, (2017-02-23 閲覧).
- Hwang,HM. et al. (1987) Degradation of aniline and chloroanilines by sunlight and microbes
 in estuarine water, Wat. Res., 21(3): 309-316.
- 32 IUCLID(2000): EU ECB. IUCLID Dataset, aniline. 2000.

33 Li, H., et al. (2001) Role of pH in partitioning and cation exchange of aromatic amines on

34 water-saturated soils. Chemosphere 44: 627-635.

- Lyons, CD. et al. (1984) Mechanisms and pathways of aniline elimination from aquatic
 environments, Appl. Environ. Microbiol., 48: 491-496.
- 3 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 ed. Volume IV, CRC
 press, 2006.
- 6 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ダ
 7 ンス, V. 暴露評価〜排出源ごとの暴露シナリオ〜. Ver. 1.0, 2014.
- 8 MITI(1993a): アニリン (被験物質番号 No.K-1139) の物理化学性状の測定. 既存化学物質点 9 検, 1993.
- 10 MITI(1993b): アニリン (被験物質番号 No.K-1139)の微生物による分解度試験. 既存化学物 11 質点検, 1993.
- 12 MOE(2002): 化学物質の環境リスク評価 第1巻, アニリン. 2002.
- 13 NIST: NIST. Chemistry WebBook. http://webbook.nist.gov/chemistry/, (2017-02-09 閲覧).
- 14 NITE(2007): 化学物質の初期リスク評価書, アニリン. Ver. 1.0, No. 63, 2007.
- 15 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-02-02 閲覧).
- 16 Pillai, P., et al. (1982) Soil-catalyzed oxidation of aniline. Chemosphere 11: 299-317.
- Toräng, L. et al. (2002) Laboratory shake flask batch tests can predict field biodegradation
 of aniline in the Rhine, Chemosphere, 49: 1257–1265.
- Zok, S., et al. (1991) Bioconcentration, metabolism and toxicity of substituted anilines in
 the zebrafish (*Brachydanio rerio*). Sci. Total Environ. 109/110: 411-421.
- 21
- 22 2-2 その他
- 23 特になし。