

1  
2  
3  
4  
5  
6  
7  
8  
9  
10  
11  
12  
13  
14  
15  
16  
17  
18  
19  
20  
21

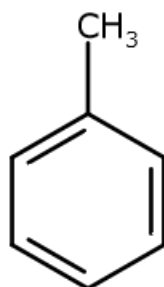
## 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

### 人健康影響に係る評価Ⅱ

### 物理化学的性状等の詳細資料

## トルエン

優先評価化学物質通し番号 46



令和3年9月

経済産業省

22

## 目 次

23	1 評価対象物質の性状 .....	1
24	1-1 評価対象物質の設定 .....	1
25	1-2 物理化学的性状及び濃縮性 .....	2
26	1-3 分解性 .....	4
27	2 【付属資料】 .....	7
28	2-1 物理化学的性状一覧 .....	7
29	2-2 その他 .....	7
30		

31 1 評価対象物質の性状

32 本章では、優先評価化学物質「トルエン」のリスク評価に用いる物理化学的性状データ、  
33 環境中における分解性に係るデータを示す。

34

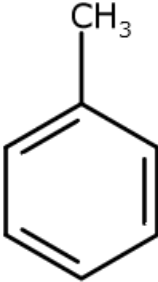
35 1-1 評価対象物質の設定

36 トルエンは分解度試験結果に基づき「分解性が良好と判断される物質」であり、評価対象  
37 物質は、トルエンとする。

38

39

表 1-1 評価対象物質の構造等

評価対象物質構造	
評価対象物質名称	トルエン
分子式	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>
優先評価化学物質通し番号	46
CAS 登録番号	108-88-3

40

41

42

43

44 1-2 物理化学的性状及び濃縮性

45 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  
46 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。

47

48

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	—	92.13	—	92.13
融点	°C	-95 <sup>1-5)</sup>	測定値	-95 <sup>1)</sup>
沸点	°C	110.6 <sup>1-3,6)</sup>	101.3 kPa での測定値	110.6 <sup>1)</sup>
蒸気圧	Pa	3,000 <sup>1)</sup>	20°Cでの測定値	2,800 <sup>1)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	520 <sup>1,3,7)</sup>	20°Cでの測定値	510 <sup>1)</sup>
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	2.65 <sup>1,7,8)</sup>	測定値	2.65 <sup>1)</sup>
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	570 <sup>7)</sup>	複数の測定値 (n=4) の算術平均値	650 <sup>7)</sup>
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	223 <sup>6,7)</sup>	複数の測定値 (n=37) の算術平均値	160 <sup>6)</sup>
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	90 <sup>1,2,3,5,6,10)</sup>	濃縮度試験における測定値	26 <sup>9)</sup>
生物蓄積係数(BMF)	—	1 <sup>11)</sup>	logPow と BCF から設定	1 <sup>11)</sup>
解離定数(pKa)	—	—	解離性の基を有さない物質	— <sup>12)</sup>

49 ※ 令和元年度第1回化審法のリスク評価等に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議  
50 (令和元年10月25日)で了承された値

51 1) OECD(2003)

7) Mackay(2006)

52 2) EHC

8) IUCLID

53 3) MOE(2004)

9) EPI Suite(2012)

54 4) NITE(2006)

10) ATSDR(2017)

55 5) ECHA

11) MHLW, METI, MOE(2014)

56 6) HSDB

12) 評価Ⅰにおいて解離定数は考慮しない

57

58 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

59 ① 融点

60 評価Ⅰで採用した値は、OECD(2003)に記載された測定値(-95°C)である。その他の信  
61 頼のおける情報源においても、EHC、MOE(2004)、NITE(2006)等にこの値が記載されて  
62 おり、ECHAにも同様の記載がある。評価Ⅱにおいてもこの値(-95°C)を用いる。

63

64 ② 沸点

65 評価Ⅰで採用した値は、OECD(2003)に記載された標準圧力(101.3kPa)における測定値  
66 (110.6°C)である。その他の信頼のおける情報源においても、EHC、HSDB、MOE(2004)等  
67 にこの値が記載されており、評価Ⅱにおいてもこの値(110.6°C)を用いる。

68

69 ③ 蒸気圧

70 評価Ⅰで採用した値は、OECD(2003)に記載された20°Cでの測定値と、25°Cにおける測  
71 定値から20°Cに換算した値との平均値(2,800Pa)である。評価Ⅱにおいては20°Cにおける

72 測定値(3,000 Pa)を用いる。

73

#### 74 ④ 水に対する溶解度

75 評価Ⅰで採用した値は、OECD (2003) に記載された 20℃における測定値と、25℃における測  
76 定値から 20℃に換算した値との平均値 (510 mg/L) である。評価Ⅱにおいては、Mackay (2006)  
77 や MOE (2004) 等にも記載されている 20℃における測定値 (520 mg/L) を用いる。

78

#### 79 ⑤ logPow

80 評価Ⅰで採用した値は、OECD (2003) に記載された測定値 (2.65) である。IUCLID (2000)  
81 や Mackay (2006) にもこの値が記載されており、評価Ⅱにおいてもこの値 (2.65) を用いる。

82

#### 83 ⑥ ヘンリー係数

84 評価Ⅰで採用した値は、Mackay (2006) に掲載された 25℃における測定値 (650 Pa・  
85 m<sup>3</sup>/mol) である。評価Ⅱにおいては Mackay (2006) に掲載された 20℃における複数の測定値  
86 (n=4)の算術平均値 (570 Pa・m<sup>3</sup>/mol) を用いる。

87

#### 88 ⑦ Koc

89 評価Ⅰで採用した値は、HSDB に記載された 2 種類の土壌 (silt loam , sandy loam) での測  
90 定値 (160 L/kg) である。信頼性における情報源としては HSDB や Mackay (2006)から複数の  
91 測定値が得られている。そのため、評価Ⅱにおいてはこれらの測定値 (n=37)」の算術平均  
92 値 (223 L/kg) を用いる。

93

#### 94 ⑧ BCF

95 評価Ⅰで採用した値は、EPI Suite の BCFBAF による推計値 (26 L/kg) である。OECD  
96 (2003) にはキースタディとして測定値 (90 L/kg) の記載があり、その他の信頼における情  
97 報源においても、ATSDR (2017) 、HSDB 、MOE (2004) 、NITE (2006) にこの値が記載され  
98 ており、ECHA にも同様の値の記載がある。そのため、評価Ⅱにおいてはこの値 (90 L/kg)  
99 を用いる。

100

#### 101 ⑨ BMF

102 評価Ⅰで採用した値は、logPow (2.65) 及び BCF (26 L/kg) から化審法における優先評価化  
103 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。) に従って  
104 設定したものである。その他の信頼における情報源においても、BMF の測定値は得られな  
105 かったため、評価Ⅱにおいては logPow (2.65) 及び BCF (90 L/kg)から技術ガイダンスに従っ  
106 て設定した値 (1) を用いる。

107

108 ⑩解離定数

109 トルエンは解離性の基を有していない。

110

111 1-3 分解性

112 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

113

114

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		NA	
	機序別の半減期	OHラジカルとの反応	2.8 <sup>3)</sup>	室温での反応速度定数の測定値から、OHラジカル濃度を $5 \times 10^5$ molecule/cm <sup>3</sup> として算出
		オゾンとの反応	$7.6 \times 10^4$ <sup>4)</sup>	24°Cでの反応速度定数の測定値から、オゾン濃度を $7 \times 10^{11}$ molecule/cm <sup>3</sup> として算出
		硝酸ラジカルとの反応	1,900 <sup>4)</sup>	23°Cでの反応速度定数の測定値から、硝酸ラジカル濃度を $2.4 \times 10^8$ molecule/cm <sup>3</sup> 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 <sup>2, 5)</sup>	分解度試験からの換算値 <sup>6)</sup>
		加水分解	-	加水分解を受けやすい基を有さない物質
		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	12 <sup>1)</sup>	試験濃度 200 mg/kg、含水率 14 %での測定値
		加水分解	-	加水分解を受けやすい基を有さない物質
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	水中生分解半減期の 4 倍と仮定 <sup>6)</sup>
		加水分解	-	加水分解を受けやすい基を有さない物質

115 ※ 令和元年度第1回化審法のリスク評価等に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議  
116 (令和元年10月25日)で了承された値

117 1) OECD(2003)

4) NIST

118 2) ATSDR(2017)

5) MITI(1980)

119 3) Mackay(2006)

6) MHLW, METI, MOE(2014)

120 NA:情報が得られなかったことを示す

121

122 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  
123 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。

124

125 ①大気

126 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

127 情報が得られた。

#### 128 ① -1 OH ラジカルとの反応の半減期

129 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、 $5.78 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  (室  
130 温、閃光光分解-共鳴蛍光法) (Mackay (2006))を半減期算出に採用する。技術ガイダンスに  
131 従って、反応速度定数から半減期への換算に用いる大気中 OH ラジカル濃度を  $5 \times 10^5$   
132  $\text{molecule/cm}^3$ とした場合、半減期は 2.8 日と算出される。そのため、評価Ⅱではこの値 (2.8  
133 日) を用いる。

#### 134 ① -2 オゾンとの反応の半減期

135 大気中におけるオゾンとの反応速度定数に関しては、 $1.5 \times 10^{-22} \pm 7.97 \times 10^{-23} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$   
136 ( $24^\circ\text{C}$ 、絶対法) (NIST) を半減期算出に採用する。技術ガイダンスに従って、反応速度定  
137 数から半減期への換算に用いる大気中オゾン濃度を  $7 \times 10^{11} \text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半減期  
138 は 76,000 日と算出される。評価Ⅱではこの値 ( $7.6 \times 10^4$  日) を用いる。

#### 139 ① -3 硝酸ラジカルとの反応の半減期

140 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、 $1.79 \times 10^{-17} \pm 1.01 \times 10^{-17}$   
141  $\text{cm}^3/\text{molecule/s}$  ( $23^\circ\text{C}$ 、測定値) (NIST) を半減期算出に採用する。技術ガイダンスに従っ  
142 て、反応速度定数から半減期への換算に用いる大気中硝酸ラジカル濃度を  $2.4 \times 10^8$   
143  $\text{molecule/cm}^3$ とした場合、半減期は 1,900 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (1,900 日) を  
144 用いる。

145

#### 146 ②水中

147 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、機序別の生分解の半減期に  
148 関する情報が得られた。

#### 149 ② -1 生分解の半減期

150 OECD TG 301C に準じた試験 (被験物質濃度 100 mg/L、活性汚泥濃度 30 mg/L、試験期  
151 間 14 日間) の結果は、BOD 分解率が 113%、127%、129%で GC が分解率 100%であった  
152 (MITI (1980))。

153 また ATSDR (2017) に記載された OECD TG 301D 試験によると、BOD 分解率は 93%であ  
154 る。

155 これらの試験結果を技術ガイダンスに従って生分解半減期に換算すると、いずれも 5 日  
156 となる。よって評価Ⅱでは水中での生分解による半減期を 5 日とする。

#### 157 ② -2 加水分解の半減期

158 トルエンは加水分解を受けやすい基を有していない。

159

#### 160 ③土壌

161 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、機序別の生分解の半減期  
162 に関する情報が得られた。

163 ③ -1 生分解の半減期

164 OECD (2003) には、83～92 日の土壌中生分解半減期が記載されているが古い文献からの  
165 引用のため、試験の詳細は入手できなかった。一方、同じ OECD (2003) に記載されている  
166 Davis and Madsen (1996)の試験では、砂土、砂壤土及び埴土中の <sup>14</sup>C-トルエンの生分解につ  
167 いて詳細に解析されており、1) 含水比が増すと生分解半減期が短くなる、2) 初期試験濃度  
168 が増大すると分解開始までの時間は長くなるが、開始後の分解速度は速い、3) 有機炭素含  
169 有率が増すと分解開始までの時間が短くなる、4) 砂壤土と埴土中での半減期は同程度で、  
170 砂土よりも短いと報告されている。報告された見かけの分解半減期を分解開始までの時間  
171 で補正した場合の半減期は、初期濃度が 5 mg/kg では、16 時間 (含水比 14%、開始までの時  
172 間 59 時間)、11 時間 (同 100%、同 46 時間)で、初期濃度が 200 mg/kg では、169 時間 (含水  
173 比 14%、開始までの時間 116 時間)、34 時間 (同 100%、同 186 時間) となる。

174 以上のように、トルエンの土壌中生分解には様々な要因が関与するため、評価Ⅱでは、初  
175 濃度 200 mg/kg、含水比 14%、25℃の砂壤土の試験で得られた見かけの半減期の最大値 (169  
176 時間+116 時間=285 時間=12 日)を安全側の値として採用する。

177 ③ -2 加水分解の半減期

178 トルエンは加水分解を受けやすい基を有していない。

179

180 ④底質

181 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、機序別の生分解の半減期  
182 に関する情報が得られた。

183 ④ -1 生分解の半減期

184 底質中での生分解半減期が得られなかったため、技術ガイダンスに従って、評価Ⅱでの底  
185 質中生分解半減期は、水中の生分解半減期の 4 倍である 20 日とする。

186 なお、Mackay (2006) では、堆積物サンプルを用いた試験結果から底質中での嫌氣的生分  
187 解の半減期を 56～210 日と算出している。

188

189 ④ -2 加水分解の半減期

190 トルエンは加水分解を受けやすい基を有していない。

191

192



193 **2 【付属資料】**

194 **2-1 物理化学的性状一覧**

195 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照

196

197 (出典)

198 ATSDR(2017): Agency for Toxic Substances and Disease Registry. “Toxicological Profile for  
199 TOLUENE”, Toxicological Profiles. 2017.

200 ECHA: Information on Chemicals – Registered substances.

201 <http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>, (2019.07 閲覧).

202 EHC: ENVIRONMENTAL HEALTH CRITERIA 52

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

204 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. [http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB)

205 [bin/sis/htmlgen?HSDB](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB), (2019.07 閲覧).

206 IUCLID(2000): EU ECB. IUCLID Dataset, toluene. 2000.

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

209 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  
210 ダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

211 MITI(1980) : トルエン (被験物質番号 K-549) の微生物による分解度試験. 既存化学物質点  
212 検, 1980.

213 MOE(2004): 化学物質の環境リスク評価 第1巻, トルエン. 2004.

214 NIST: NIST Chemistry WebBook, <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=108-88-3>, (2019.07  
215 閲覧)

216 NITE(2006): 化学物質の初期リスク評価書,トルエン. Ver. 1.0, No. 87, 2006.

217 OECD(2003): SIDS Initial Assessment Report, TOLUENE. 2003.

218

219 **2-2 その他**

220 特になし。