

1  
2  
3  
4  
5  
6  
7  
8  
9  
10  
11  
12  
13  
14  
15  
16  
17  
18  
19  
20  
21  
22

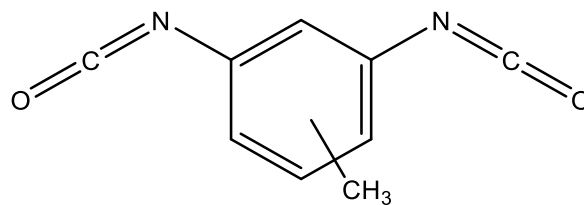
## 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

### 人健康影響に係る評価Ⅱ

### 物理化学的性状等の詳細資料

## 1, 3-ジイソシアナト(メチル)ベンゼン

優先評価化学物質通し番号 129



令和2年10月

経済産業省

## 目 次

23		
24		
25	1 評価対象物質の性状 .....	1
26	1-1 評価対象物質の設定 .....	1
27	1-2 評価対象物質の選定 .....	2
28	1-3 物理化学的性状及び濃縮性 .....	5
29	1-3-1 TDI 混合物の物理化学的性状及び濃縮性 .....	5
30	1-3-2 TDI 混合物の分解性 .....	7
31	1-3-3 2,4-TDA の物理化学的性状及び濃縮性 .....	9
32	1-3-4 2,4TDA の分解性 .....	12
33	2 【付属資料】 .....	15
34	2-1 物理化学的性状等一覧 .....	15
35	2-2 その他 .....	16
36		

37 1 評価対象物質の性状

38 本章では、優先評価化学物質 1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン (以下、「TDI」  
 39 という) のリスク評価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  
 40 を示す。

41

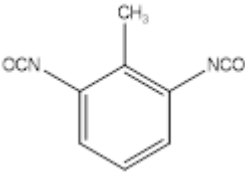
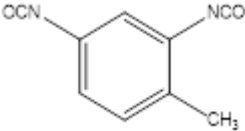
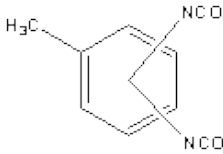
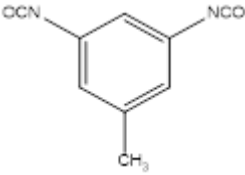
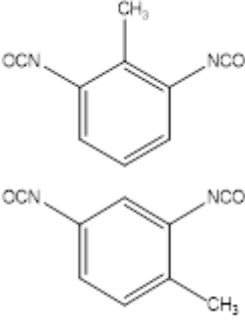
42 1-1 評価対象物質の設定

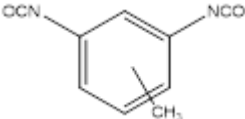
43 1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン (以下「TDI」という。) は、メチル基の置換  
 44 位置の違いにより複数の異性体及びそれらの混合物が存在する。該当する CAS 登録番号、  
 45 名称、構造式及び平成 28 年度製造・輸入実績の化審法届出情報を表 1 に示す。

46

47

表 1 優先評価化学物質 129 の CAS 登録番号別製造輸入数量(平成 28 年度)

CAS 登録番号	名称(CAS Index Name)	構造式	製造輸入数量[t]
91-08-7	2, 6-ジイソシアナトトルエン (Benzene, 1,3-diisocyanato-2-methyl-)		16,155
584-84-9	2, 4-ジイソシアナトトルエン (Benzene, 2,4-diisocyanato-1-methyl-)		66,736
1321-38-6	ジイソシアナト (メチル) ベンゼン (Benzene, diisocyanatomethyl-)		—
14219-05-7	3, 5-ジイソシアナトトルエン (Benzene, 1,3-diisocyanato-5-methyl-)		—
26102-02-3	2, 4 (又は 6) -ジイソシアナトトル エン (Benzene, 1,3-diisocyanato-2(or 4)-methyl-)		—

26471-62-5	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン (Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-)		16,612
------------	---	--	--------

48

49 TDIには2, 4-ジイソシアナトトルエン (以下「2,4-TDI」という。)と2, 6-ジイソ  
50 シアナトトルエン (以下「2,6-TDI」という。)の異性体混合物があり、化学工業日報社(2008)  
51 によれば、市販品は2,4-TDI : 2,6-TDI=95以上 : 5以下、80 : 20、65 : 35の3種類があ  
52 るとされている。また、NITE(2008a)では、2,4-TDI : 2,6-TDI=80 : 20の混合物が最も一  
53 般的な製品とされている。

54

## 55 1-2 評価対象物質の選定

56 TDIは、その構造から容易に水と反応する。ただし、その反応速度と本評価で考察する  
57 時間スケールとの関係については後述する。

58 MITI(1988)の既存点検においては、2,4-TDIを試験サンプルとした28日間の分解度試験  
59 が実施されている。その結果、BODの変化はなかったが、GC法による直接分析の結果、  
60 (水+被験物質)系及び(汚泥+被験物質)系ともに2,4-TDIは消失し、新たに試験液中に  
61 白色の不溶性物質の生成が見られており、ポリウレアの生成が推定されている。さらに、  
62 TOC分析の結果、約25%の水溶性物質が確認されており、2, 4-ジアミノトルエン (以  
63 下「2,4-TDA」という。)の生成が確認、尿素体の生成が推定されている。

64 その他、水との反応性は濃度と攪拌状態によっても異なり、TDIが高濃度(10,000 mg /  
65 L)の場合TDAへの変換が1%未満であったのに対し、10 mg / L未満の濃度でTDIを十  
66 分に攪拌すると、50%を超えることがあるという報告もある(Yakabeら,1999)。

67 生じる変化物の割合についてはTDIの濃度により異なり、TDIが希薄な場合には、二つ  
68 のイソシアナート基全ての加水分解によるTDAの生成が優先して起こり、TDIが濃厚な  
69 場合には、イソシアナート基の一つが加水分解されアミンになると直ちに別のTDIと重合  
70 反応し、オリゴウレア、ポリウレアになりやすい(IARC,1986 ; Yakabeら,1999 ; 日本化学  
71 会,1996)。

72 変化物のうち、ポリウレアは、ECHA(2013)のCoRAPにおいて、一般的に不活性で不溶  
73 性の固体であり、生物学的に利用不可能であるため環境への影響が小さいポリマーである  
74 とされている。

75

76 NITE(2008)及びU.S.EPA(2011)は、TDIと水蒸気との反応性を測定した研究(Dyson  
77 and Hermann,1971)を根拠として、空気中の湿度によるTDAの生成の可能性を示唆して  
78 いる。しかしながら、Dyson and Hermann(1971)では、TDIの気中濃度の減衰を報告して  
79 いるものの、変化物を測定していないことから、TDA生成の有無及びTDI減少の機構は

80 不明である。

81 また、異なる湿度条件での TDI の減少率及び変化物である TDA を測定した Holdren ら  
82 (1984)の研究では、TDA は検出されず、TDI 損失はチャンバーの壁面吸着に起因するもの  
83 とされている。一方で同報では、TDI が水蒸気と反応する可能性を排除できないとも述べ  
84 られている。

85 Becker ら(1988)は、TDI 及び TDA の半減期は 26 時間及び 1 時間であり、TDA の OH  
86 ラジカルとの反応速度が TDI に比べて 20 倍以上速いため、TDA については大気中では急  
87 速に消失すると述べている。しかしながら、TDA の半減期は、化審法リスク評価の技術ガ  
88 イダンスの 2 倍の OH ラジカル濃度のもとで 1 時間とされており、風速を考慮しても、排  
89 出源近傍では分解し切らず存在する可能性が考えられる。

90 なお、上記論文を参考にするにあたっては、分析方法によっては、TDI と TDA を区別で  
91 きない場合もある点に考慮が必要である。

92 このように、大気中における TDI の変化物として、TDA が存在するかについては、現在、  
93 実験に基づいた知見による判断に足る根拠が得られなかった。

94

95 TDI (2,4-TDI : 2,6-TDI = 80 : 20) の変化物としては、ポリウレア、TDA 等が想定される。  
96 そのうち、ポリウレアは生物学的に利用不可能であるため環境への影響が小さいポリマー  
97 であるといえる。TDA については、2,4-TDA 及び 2,6-TDA が想定されるが、入手できた各  
98 毒性項目のキースタディーを比較した結果、2,4-TDA の方がいずれの毒性項目においても  
99 無毒性量が低いことが確認された。

100 以上から、本書におけるリスク評価は、親物質である TDI については、最も一般的な製  
101 品である 2,4-TDI : 2,6-TDI = 80 : 20 の混合物（以下「TDI 混合物」という。）を、変化物  
102 については、有害性の観点からもより安全側に立った評価となると考えられる 2,4-TDA を  
103 評価対象物質とする。

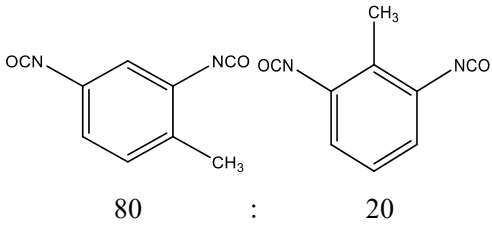
104

105 評価対象物質（親物質）の構造等を表 2、評価対象物質（変化物）の構造等を表 3 に示す。

106

107

表2 評価対象物質（親物質）の構造等

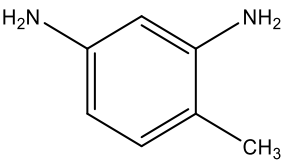
構造式	 <p>80 : 20</p>
評価対象物質名称	2,4-ジイソシアナトトルエンと2,6-ジイソシアナトトルエンの異性体混合物(TDI 混合物)
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>

CAS 登録番号	26471-62-5
----------	------------

108

109

表3 評価対象物質(変化物)の構造等

	
評価対象物質名称	2, 4-ジアミノトルエン(2,4-TDA)
分子式	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>
CAS 登録番号	95-80-7

110

111       なお、化管法においては、政令番号 298 としてトリレンジイソシアネートが指定されて  
112 いる。

113

114 1-3 物理化学的性状及び濃縮性

115 1-3-1 TDI 混合物の物理化学的性状及び濃縮性

116 下表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  
117 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。

118

119

表4 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Ⅱ相当の参考値
分子量	—	174.16	—	174.16
融点	℃	21 <sup>2)</sup>	測定値	21 <sup>2)</sup>
沸点	℃	253 <sup>2)</sup>	1013 hPa における測定値	253.14 <sup>2)</sup>
蒸気圧	Pa	2.1 <sup>2)</sup>	20℃ における測定値の算術平均値	2.1 <sup>2)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	(115.9 <sup>3)</sup> )	WSKOWWIN による推計値 (既存点検 <sup>5)</sup> では、「変化のため測定不可」との記載有り)	115.9 <sup>3)</sup>
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	3.43 <sup>4)</sup>	測定値	3.43 <sup>4)</sup>
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	0.82 <sup>3)</sup>	HENRYWIN による推計値	0.82 <sup>3)</sup>
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	947.3 <sup>3)</sup>	KOCWIN による推計値	947.3 <sup>3)</sup>
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	180 <sup>5)</sup>	濃縮度試験における測定値	180 <sup>5)</sup>
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 <sup>5)</sup>	1
解離定数(pKa)	—	—	解離性の基を有さない物質	— <sup>7)</sup>

120 1) 平成 29 年度第 3 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  
121 ビュー会議(平成 29 年 11 月 28 日)で了承された値

122 2) IUCLID(2000) 5) MITI(1977)

123 3) EPI Suite (2012) 6) MHLW, METI, MOE(2014)

124 4) ECHA 7) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない

125 括弧内はモデルを動かすための参考値であることを示す。

126

127 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

128 ①融点

129 評価Ⅰで採用した値(21℃)は、IUCLID(2000)に記載された GLP 準拠の EEC のテスト  
130 ガイドライン(A.1, Directive 84/449/EEC, A.1 "Melting point/melting range")による 2,4-  
131 TDI を試験サンプルとした測定値である。2,4-TDI については、その他の情報源においても  
132 19.16~22℃の範囲である。2,6-TDI については、CRC、HSDB、PhysProp においては  
133 18.3℃の記載がある。TDI 混合物については信頼性のある測定値が得られていないため、  
134 評価Ⅱにおいては 2,4-TDI を試験サンプルとした測定値(21℃)を用いる。

135

136 ②沸点

137 評価Ⅰで採用した値は、IUCLID(2000)に記載された GLP 準拠の EEC のテストガイド  
138 ライン(A.2, Directive 84/449/EEC, A.2 "Boiling point/boiling range")による 2,4-TDI:2,6-

139 TDI = 80 : 20 の混合物を試験サンプルとした標準圧力(1,013 hPa)における測定値  
140 (253.0118 °C)と、GLP 準拠の EEC のテストガイドライン(A.2, Directive 84/449/EEC, A.2  
141 "Boiling point/boiling range")による 2,4-TDI を試験サンプルとした標準圧力における測定  
142 値(253.262 °C)の算術平均値(253.14 °C)である。評価Ⅱにおいては TDI 混合物を試験サン  
143 プルとした 253 °C を用いる。

144

#### 145 ③蒸気圧

146 評価Ⅰで採用した値は、IUCLID(2000)に記載された GLP 準拠の EEC のテストガイド  
147 ライン(EU Method A.4, Directive 84/449/EEC, A.4 "Vapour pressure")による 2,4-TDI を  
148 試験サンプルとした 20 °Cにおける測定値(2.1 Pa)である。2,6-TDI については  
149 IUCLID(2000)に GLP 準拠の EEC のテストガイドライン(EU Method A.4, Directive  
150 84/449/EEC, A.4 "Vapour pressure")による 20 °Cにおける測定値(1.6 Pa)がある。TDI 混  
151 合物についての測定値は得られていないため評価Ⅱにおいては、TDI 混合物の主成分であ  
152 る 2,4-TDI を試験サンプルとした値(2.1 Pa) を用いる。

153

#### 154 ④水に対する溶解度

155 評価Ⅰで採用した値は、WSKOWWIN(v1.42)を用いた 25 °Cにおける 2,4-TDI の推計値  
156 (124.2 mg/L)を 20 °Cに補正した値(115.9 mg/L)である。異性体である 2,6-TDI や混合物に  
157 おいても信頼できる情報源に測定値はないことから、評価Ⅱにおいても参考値としてこの  
158 値 (115.9 mg/L)を用いる。

159

#### 160 ⑤logPow

161 評価Ⅰで採用した値は、ECHA に登録された GLP 準拠ではないが OECD のテストガイ  
162 ドライン 117 による 2,4-TDI : 2,6-TDI = 80 : 20 の混合物を試験サンプルとした HPLC 法  
163 (22 °C)による測定値(3.43)である。測定対象は TDI 混合物としており、45.7 %が回収され  
164 ている。評価Ⅱにおいてもこの値 (3.43) を用いる。

165

#### 166 ⑥ヘンリー係数

167 評価Ⅰで採用した値は、HENRYWIN(v3.20)を用いた 20 °Cにおける 2,4-TDI の推計値  
168 (0.82 Pa·m<sup>3</sup>/mol)である。異性体である 2,6-TDI や TDI 混合物においては信頼できる情報  
169 源に測定値はないことから、評価Ⅱにおいてもこの値 (0.82 Pa·m<sup>3</sup>/mol) を用いる。

170

#### 171 ⑦Koc

172 評価Ⅰで採用した値は、KOCWIN(v2.00)を用いた 2,4-TDI の推計値 (947.3 L/kg)である。  
173 異性体である 2,6-TDI や TDI 混合物においては信頼できる情報源に測定値はないことから、  
174 評価Ⅱにおいてもこの値 (947.3 L/kg)を用いる。



175

176 ⑧BCF

177 評価Ⅰで採用した値は、METI(2003)の既存点検事業における 2,4-TDI を試験サンプルと  
 178 した化審法の濃縮度試験結果で、生物濃縮性の判定に用いられた測定値である。定常状態に  
 179 おける BCF は第 1 濃度区が 180 L/kg、第 2 濃度区が 130 L/kg であることから、最大値で  
 180 ある 180 L/kg を用いている。その他の情報源として IUCLID(2000)に OECD テストガイ  
 181 ドライン 305C (nonGLP) による測定値(5 未満)の記載があるが、試験サンプルは変化物で  
 182 ある 2,4-TDA を試験サンプルとした試験である。2,6-TDI 及び TDI 混合物については測定  
 183 値が得られていないことから、評価Ⅱにおいても評価Ⅰで採用した値(180 L/kg) を用いる。

184

185 ⑨BMF

186 評価Ⅰで採用した値は、logPow (3.43) 及び BCF (180 L/kg) から化審法における優先評  
 187 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。) に従  
 188 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においてもこの値  
 189 (1) を用いる。

190 1-3-2 TDI 混合物の分解性

191 下表に採用した分解に係るデータを示す。

192

193

表5 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	2.2 反応速度定数の測定値 <sup>2,3)</sup> から、OH ラジカル濃度を 5×10 <sup>5</sup> molecule/cm <sup>3</sup> として算出
		オゾンとの反応	NA
		硝酸ラジカルとの反応	NA
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	NA
		加水分解	0.071 測定値 <sup>4)</sup>
		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	NA
		加水分解	1.7 測定値 <sup>5)</sup>
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	NA
		加水分解	0.071 水中加水分解の項参照

194 1) 平成 29 年度第 3 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  
195 ビュー会議 (平成 29 年 11 月 28 日) で了承された値

196 2) ECHA

5) HSDB

197 3) NIST

NA:情報が得られなかったことを示す

198 4) NITE(2008a)

199

200 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  
201 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。

202

203 ①大気

204 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。また、機序別の半減期につい  
205 ても、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応に関する情報は得られなかった。

206 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

207 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、ECHA、NIST に  $7.4 \times 10^{-12}$   
208  $\text{cm}^3/\text{molecule/s}$  の記載がある。この値は、Becker et al. (1988)による TDI 混合物を試験サ  
209 ンプルとした相対法による測定値である。反応速度定数として、 $7.4 \times 10^{-12} \text{cm}^3/\text{molecule/s}$   
210 を採用し、大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従  
211 い  $5 \times 10^5 \text{molecule/cm}^3$  として、半減期を 2.2 日と算出した。評価Ⅱではこの値 (2.2 日)を  
212 用いる。

213

214 ②水中

215 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、生分解と加水分解の機序別  
216 の半減期に関する情報が得られた。

217 ②-1 生分解の半減期

218 化審法の既存点検の分解度試験結果では、GC 法による直接分析の結果、(水+被験物質)  
219 系及び(汚泥+被験物質)系共に被験物質は消失し、新たに試験液中に白色の不溶性物質の  
220 生成が見られている。また、被験物質の変化は1日目と28日目で差がないことから、水と  
221 の接触により、速やかに反応が進んだとされている。以上から、2,4-TDI 自体の生分解性  
222 に関する情報は得ることができなかった。

223

224 ②-2 加水分解の半減期

225 TDI は、その構造から容易に水と反応する。生じる変化物の割合については TDI の濃度  
226 により異なり、TDI が希薄な場合には、二つのイソシアナート基全ての加水分解による  
227 TDA の生成が優先して起こり、TDI が濃厚な場合には、イソシアナート基の一つが加水分  
228 解されアミンになると直ちに別の TDI と重合反応し、オリゴウレア、ポリウレアになりや  
229 すい(IARC,1986 ; Yakabe ら,1999 ; 日本化学会,1996)。

230 Yakabe ら(1999)によると、TDI の水中における半減期はその濃度及び攪拌速度に大きく  
231 影響を受けるとされており、TDI 混合物 28 mg/L を常温で激しく攪拌した場合は 1 分未  
232 満、ゆっくり攪拌した場合は 3~5 分、TDI 混合物 1,000 mg/L を 27 °C で激しく攪拌した  
233 場合は 2,4-TDI では 0.7 時間であり、2,6-TDI では 1.7 時間の記載がある。MOE(2002)に

234 は、水と接触すると加水分解を起こし炭酸ガスを発生するとの記載がある。ECHA には、  
235 27 °Cにおいて 10 mg/l では<0.5 時間、1,000 mg/L では 0.7 時間、10,000 mg/l では 1.6 時  
236 間の記載がある。以上のとおり、TDI は濃度や攪拌速度の違いが半減期に影響する。評価Ⅱ  
237 では最も長い値 (1.7 時間 = 0.071 日)を用いる。

238

### 239 ③土壌

240 情報収集の結果、土壌中での総括分解半減期の情報は得られなかった。また、機序別の分  
241 解反応に関する情報も得られなかった。

#### 242 ③-1 生分解の半減期

243 HSDB には、5 kg の TDI を 50 kg の砂と 5 kg の水で覆った場合に、24 時間後に 5.5 %、  
244 8 日後に 3.5 %残存したとの記載がある。しかし、前述の水中での加水分解についての記載  
245 のとおり、TDI は水との接触により速やかに加水分解が起こるため、この分解は加水分解  
246 よる寄与が大きいと推測される。そこで、生分解の半減期に関する情報は得られなかったと  
247 する。

#### 248 ③-2 加水分解の半減期

249 HSDB には、5 kg の TDI を 50 kg の砂と 5 kg の水で覆った場合に、24 時間後に 5.5 %、  
250 8 日後に 3.5 %残存したとの記載がある。これらから半減期はそれぞれ 0.2 日、1.7 日とな  
251 る。この分解には生分解が寄与している可能性もあるが、前述のとおり TDI は水との接触  
252 により速やかに加水分解が起こるため、この分解は加水分解よる寄与が大きいと推測され  
253 る。そこで、加水分解の半減期として評価Ⅱでは 1.7 日を用いる。

254

### 255 ④底質

256 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  
257 る情報も得られなかった。

#### 258 ④-1 生分解の半減期

259 半減期に関するデータは得られなかった。

#### 260 ④-2 加水分解の半減期

261 半減期に関するデータは得られなかったため、底質中での加水分解半減期は、技術ガイド  
262 ンスに従って、水中の加水分解半減期と同じ 0.071 日とする。

263

### 264 1-3-3 2,4-TDA の物理化学的性状及び濃縮性

265 下表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  
266 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。

267

268

269

表6 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	—	122.17	—	—
融点	℃	99 <sup>2,3)</sup>	測定値	—
沸点	℃	288 <sup>2,3)</sup>	1013 hPa における測定値	—
蒸気圧	Pa	0.012 <sup>2,3)</sup>	20℃における測定値	—
水に対する溶解度	mg/L	3.5×10 <sup>4</sup> <sup>2,3)</sup>	20℃での測定値	—
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	0.074 <sup>2,3)</sup>	測定値	—
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	5.46×10 <sup>-5</sup> <sup>4)</sup>	測定値か推計値か特定できず	—
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	9763 <sup>2,3,5)</sup>	土壌での測定値	—
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	50	濃縮度試験における測定値 <sup>6)</sup>	—
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 <sup>7)</sup>	—
解離定数(pKa)	—	2.7、5.25 <sup>2)</sup>	測定値	—

270

271

272

273

274

275

276

1) 平成 29 年度第 3 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、蓄積性等のレビュー会議（平成 29 年 11 月 28 日）で了承された値

2) ECHA

5) HSDB

3) OECD(2008)

6) MITI(1978)

4) EPI Suite(2012)

7) MHLW, METI, MOE(2014)

277

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

278

## ①融点

279

ECHA には GLP 準拠の EU のテストガイドライン(EU Method A.1 (Melting/Freezing Temperature))に従って実施された測定値の記載がある。また、OECD(2008)の SIDS においても同じ値の記載がある。評価Ⅱにおいてはこの値(99℃)を用いる。

282

283

## ②沸点

284

ECHA には GLP 準拠の EU のテストガイドライン(EU Method A.2 (Boiling Temperature))に従って実施された測定値(288℃)の記載がある。また、OECD(2008)の SIDS においても同じ値の記載がある。一方、CRC には 292℃が記載されており、環境省の「化学物質の環境リスク初期評価」においてもこの値が採用されている。評価Ⅱにおいては、GLP 準拠でテストガイドラインに従って実施された測定値(288℃)を用いる。

289

290

## ③蒸気圧

291

ECHA には GLP 準拠の EU のテストガイドライン(EU Method A.4 (Vapour Pressure))に従って実施された 25℃における測定値(0.017 Pa)の記載がある。また、OECD(2008)の SIDS においても同じ値の記載がある。評価Ⅱにおいてはこの値を 20℃における値に補正した値(0.012 Pa)を用いる。

294

295

296 ④水に対する溶解度

297 ECHA には GLP 準拠の EU のテストガイドライン(EU Method A.6 (Water Solubility))  
298 に従って実施された 25 °Cにおける測定値( $3.8 \times 10^4$  mg/L)の記載がある。また、  
299 OECD(2008)の SIDS においても同じ値の記載がある。評価Ⅱにおいてはこの値を 20 °Cに  
300 における値に補正した値( $3.5 \times 10^4$  mg/L) を用いる。

301

302 ⑤logPow

303 ECHA には GLP 準拠の EU のテストガイドライン(EU Method A.8 (Partition  
304 Coefficient))に従って実施された測定値(0.074)の記載がある。また、OECD(2008)の SIDS  
305 においても同じ値の記載がある。評価Ⅱにおいてはこの値(0.074)を用いる。

306

307 ⑥ヘンリー係数

308 専門家によるレビューを経ている情報源である OECD(2008)の SIDS には  $5.46 \times 10^{-5}$  Pa·  
309  $m^3/mol$  の記載があるが、その出典が不明である。その他の情報源においても測定値は得ら  
310 れていないため、評価Ⅱにおいてはこの値( $5.46 \times 10^{-5}$  Pa· $m^3/mol$ )を用いる。

311

312 ⑦Koc

313 ECHA 及び HSDB には、Cowen et al. (1998)の実験による好氣的条件による 7 日間の実  
314 測値(9763 L/kg) 及び 8 時間の実測値(1339 L/kg)並びに嫌氣的条件による 7 日間の実測値  
315 (4454 L/kg)及び 8 時間の実測値(884 L/kg)の記載がある。土壌の性状を表 7 に示す。

316

317

**表7 Cowen et al. (1998) の研究で用いられたの土壌の性状**

土壌	Washington シルト質壤土	Freehold 砂質壤土
pH	5	5.8
有機物含量, %	1.3	1.6
砂含量, %	21	53
粘土含量, %	19	7
シルト含量, %	60	40
カチオン交換容 量, meq/100 g	13.6	17.7
圃場容水量, %	23.05	31.46

318

319 OECD(2008)の SIDS においては好氣的条件による 7 日間の実測値(9763 L/kg)が採用さ  
320 れていることから、評価Ⅱにおいてはこの値を用いる。

321

322 ⑧BCF

323 化審法の生物濃縮性の判定に用いられた、MITI(1978)の化審法の魚介類の体内における  
324 化学物質の濃縮度試験においては、第 1 濃度区及び第 2 濃度区ともに魚体中濃度は分析限

325 界以下であり、第1濃度区で5倍以下、第2濃度区で50倍以下であった。評価Ⅱにおいて  
 326 は倍率が高い第2濃度区の値(50 L/kg)を用いる。

327

328 ⑨BMF

329 BMFの測定値は得られなかったため、評価ⅡにおいてはlogPow(0.074)及びBCF(50  
 330 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、  
 331 「技術ガイダンス」という。)に従って設定した値(1)を用いる。

332

333 ⑩pKa

334 ECHAにはGLP準拠のOECDのテストガイドライン112に従って実施された滴定法に  
 335 よる測定値(2.7、5.1)及び分光光度法による測定値(2.7、5.4)が記載されている。このため、  
 336 評価Ⅱでは、これらの算術平均値(2.7、5.25)を用いる。

337 pKaが2.7、5.25の場合、pH5.0、6.0、7.0、8.0、9.0、10.0の水中では、それぞれ44%、  
 338 89%、99%、100%、100%及び100%が非解離種として存在する。

339

340 1-3-4 2,4TDAの分解性

341 下表に採用した分解に係るデータを示す。

342

表8 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	0.084	反応速度定数の測定値 <sup>2-7)</sup> から、OHラジカル濃度を $5 \times 10^5$ molecule/cm <sup>3</sup> として算出 <sup>1)</sup>
		オゾンとの反応	NA	
		硝酸ラジカルとの反応	NA	
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	262	土壌の生分解による半減期と同等であると仮定
		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	262	好氣的生分解の試験データ <sup>4)</sup> から算出
		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	1,048	土壌の生分解半減期の4倍と仮定 <sup>8)</sup>
		加水分解	—	加水分解を受けやすい基を有さない物質

343 1) 平成29年度第3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  
 344 ビュー会議(平成29年11月28日)で了承された値

345	2) HSDB	6) PhysProp
346	3) MOE(2008)	7) NIST
347	4) ECHA	8) MHLW, METI, MOE(2014)
348	5) NITE(2008b)	NA:情報が得られなかったことを示す

349

350 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  
351 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。

352

353 ①大気

354 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。また、機序別の半減期につい  
355 ても、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応に関する情報は得られなかった。

356 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

357 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、HSDB、MOE(2008)、ECHA、  
358 NITE(2008b)、PhysProp、NIST に  $1.9 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  の記載がある。この値は、  
359 Becker et al. (1988)による 2,4-TDA を試験サンプルとした相対法による測定値である。反  
360 応速度定数として、 $1.9 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  を採用し、大気中 OH ラジカル濃度を技術ガ  
361 イダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従い  $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$  として、半減期を 0.084  
362 日と算出した。評価Ⅱではこの値 (0.084 日)を用いる。

363

364 ②水中

365 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、生分解と加水分解の機序別  
366 の半減期に関する情報が得られた。

367 ②-1 生分解の半減期

368 化審法の既存点検の分解度試験結果では、BOD 分解度は 0 %、TOC 分解度は 3.0 %、GC  
369 による分解度は 7.9 %であり、技術ガイダンスに従って半減期は 10,000 日となる。また、  
370 後述の土壌の生分解半減期は 262 日である。評価Ⅱでは土壌における生分解による半減期  
371 と同等であると仮定し 262 日とする。

372 ②-2 加水分解の半減期

373 2,4-TDA は加水分解を受けやすい基を有していない。

374

375 ③土壌

376 情報収集の結果、土壌中での総括分解半減期の情報は得られなかった。また、機序別の分  
377 解反応に関する情報も得られなかった。

378 ③-1 生分解の半減期

379 ECHA では Cowen et al. (1998)による  $^{14}\text{C}$  標識 2,4-TDA を用いた、Washington silt  
380 loam、365 日、25 °Cにおける好氣的生分解の測定値の記載がある。分解度は 0 日 : 1 %、  
381 1 日 : 1.3 %、3 日 : 1.9 %、7 日 : 4.0 %、14 日 : 5.7 %及び 7.9 %、28 日 : 10.8 %、56 日 :

382 14.8%、210日：36.8%、365日：34.2%であった。なお、210日及び365日の結果はマス  
383 バランスが悪いため適切ではないとしている。そこで、3日から56日までの分解度から半  
384 減期262日となる。評価Ⅱでは生分解による半減期を262日とする。

385 ③-2 加水分解の半減期

386 2,4-TDAは加水分解を受けやすい基を有していない。

387

388 ④底質

389 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  
390 る情報も得られなかった。

391 ④-1 生分解の半減期

392 半減期に関する十分な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、技術ガ  
393 イダンスに従って、土壌の生分解半減期の4倍である1,048日とする。

394 ④-2 加水分解の半減期

395 2,4-TDAは加水分解を受けやすい基を有していない。

396

397

398

399



400    **2 【付属資料】**

401    **2-1 物理化学的性状等一覽**

402        收集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

403

404    出典)

405    Becker et al. (1988): K.H. Becker, V. Bastian, Th. Klein, The reactions of OH radicals  
406    with toluene diisocyanate, toluenediamine and methylenedianiline under simulated  
407    atmospheric conditions, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*,  
408    45(2):195-205, 1988.

409    Cowen et al. (1998): W.F. Cowen, A. M. Gastinger, C. E. Spanier, J. R. Buckel, Sorption  
410    and Microbial Degradation of Toluenediamines and Methylenedianiline in Soil under  
411    Aerobic and Anaerobic Conditions, *Environ. Sci. Technol.*, 32 (5):598–603, 1998.

412    CRC: Haynes, W. M., ed. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. 94th ed., CRC  
413    Press, 2013-2014.

414    DYSON, W. L., & HERMANN, E. R. (1971). Reduction of atmospheric toluene  
415    diisocyanate by water vapor. *American Industrial Hygiene Association Journal*, 32(11),  
416    741-744.

417    ECHA: Information on Chemicals – Registered substances.

418    ECHA (2013): Substance Evaluation Report. Ver. 0.2, CoRAP, 2013.

419    EPA (2011): U.S. Environmental Protection Agency. Toluene Diisocyanate (TDI) And  
420    Related Compounds Action Plan [RIN 2070 -ZA14]

421    Holdren et al. (1984): M.W. Holdren, C.W. Spicer, R.M. Riggin, Gas phase reaction of  
422    toluene diisocyanate with water vapor, *Am. Ind. Hyg. Assoc. J.* 45: 626– 633, 1984.

423    HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank.[http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB)  
424    bin/sis/htmlgen?HSDB, (2017-10-03 閱覽).

425    IARC (1986): International Agency for Research on Cancer. Some chemicals used in  
426    plastics and elastomers. *IARC Monograph on the Evaluation of Carcinogenic Risks to*  
427    *Humans*, 39, 287-323, 1986.

428    IUCLID (2000): EU ECB, IUCLID Dataset. m-tolyidene diisocyanate, 2000.

- 429 METI(2003): 2, 4-ジイソシアナトトルエン(被験物質番号 K-311)のコイにおける濃縮  
430 度試験. 既存化学物質点検, 2003.
- 431 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  
432 ガイダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.
- 433 MITI(1978): 4-メチルフェニレン-1, 3-ジアミンの濃縮度試験報告書, 既存化学物  
434 質点検, 1978.
- 435 MITI(1988): 2, 4-ジイソシアナトトルエン(被験物質番号 K-311)の微生物による分解  
436 度試験. 既存化学物質点検, 1988.
- 437 MOE(2002): 化学物質の環境リスク評価 第1巻, トルエンジイソシアネート. 2002.
- 438 MOE(2008): 化学物質の環境リスク評価 第6巻, 2,4-トルエンジアミン. 2008.
- 439 NIST: NIST. Chemistry WebBook. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>, (2017-10-03 閲  
440 覧).
- 441 NITE(2008a): 化学物質の初期リスク評価書, メチル-1,3-フェニレンジイソシアネート.  
442 Ver. 1.0, No. 113, 2008.
- 443 NITE(2008b): 化学物質の初期リスク評価書, 2,4-トルエンジアミン. Ver. 1.0, No. 43, 2008.
- 444 OECD (2008): SIDS Initial Assessment Report, 4-methyl-m-phenyldiamine. 2008.
- 445 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-10-03 閲  
446 覧).
- 447 Yakabe et al. (1999): Yakabe, Y., Henderson, K.M., Thompson, W.C., Pemberton, D.,  
448 Tury, B. and Bailer, R.E. Fate of methylenediphenyl diisocyanate and toluene  
449 diisocyanate in the aquatic environment. Environ. Sci. Technol., 33, 2579-2583, 1999.
- 450 化学工業日報社(2008): 15308 の化学商品, 2008.
- 451 日本化学会編(1996): 化学防災指針集成, 丸善, 東京, 1996.
- 452
- 453 **2-2 その他**  
454 特になし。  
455