

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25

(案)

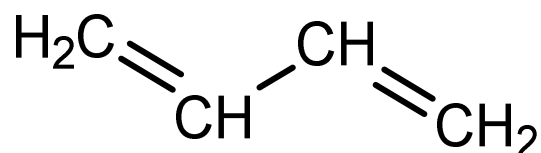
優先評価化学物質のリスク評価(一次)

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-ブタジエン

優先評価化学物質通し番号 4



平成 28 年 1 月

経済産業省

目 次

1		
2	1 評価対象物質の性状	1
3	1-1 物理化学的性状及び濃縮性	1
4	1-2 分解性	4
5	2 【付属資料】	6
6	2-1 物理化学的性状等一覧	6
7	2-2 その他	7
8		
9		

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 物理化学的性状及び濃縮性

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¹⁾

項目	単位	採用値	詳細	評価 I で用いた値(参考)
分子量	—	54.09		54.09
融点	°C	-108.966 ^{※2}	測定値	-109 ²⁾
沸点	°C	-4.5 ^{※3}	信頼性の定まった情報源から 4 データの算術平均値	-4.5 ²⁾
蒸気圧	Pa	2.40×10^5 ^{13, 15)}	信頼性の定まった情報源から 3 データの算術平均値	2.28×10^5 ²⁾
水に対する溶解度	mg/L	686 ^{4, 15, 16)}	25°Cでの測定値を 20°Cに補正した測定値	500 ²⁾
1-オクタールと水との間の分配係数(logPow)	—	1.93 ³⁾	OECD TG 107 による測定値	1.93 ³⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	1.89×10^4	蒸気圧と水に対する溶解度からの推計値	7.50×10^3 ^{※1}
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	47.3	logPow を用いた KOCWIN ⁵⁾ による推計値	288 ⁴⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	3.16	カテゴリーアプローチ ¹⁸⁾ による推計値	8.72 ⁵⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ⁶⁾	1
解離定数	—	—	解離性の基を有さない物質	— ⁷⁾

※1 4), 13), 14), 19) ※3 8), 9), 12), 13)

※2 4), 8) ~ 11), 17)

1) 平成 27 年度第 2 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 27 年 6 月 10 日)で了承された値

- | | |
|--------------------------|-------------------|
| 2) IUCLID(2000) | 12) CCD(2007) |
| 3) MITI(1990) | 13) CRC(2009) |
| 4) ATSDR(2009) | 14) CICAD(2001) |
| 5) EPI Suite(2012) | 15) Mackay(2006) |
| 6) MHLW, METI, MOE(2014) | 16) PhysProp |
| 7) 評価 I においては解離定数は考慮しない | 17) MOE(2003) |
| 8) Merck(2006) | 18) NITE(2009) |
| 9) EU-RAR(2002) | 19) USHPV(2010) |
| 10) HSDB | 20) Aldrich(2012) |
| 11) NITE(2005) | |

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 で用いたデータは、IUCLID 2000 に記載された EU Method A.1 で測定された値(-109 °C)である。

1 信頼性が定まった情報源¹において、Merck 2006 に記載されている測定値(-108.966 °C)が
2 得られた。このデータは複数の情報源(EU-RAR 2002 (OECD SIAR の位置付け)、HSDB、
3 ATSDR 2009、NITE 2005、MOE 2003)で引用されている。この値(-108.966 °C)を評価Ⅱで
4 採用する。

5 6 ②沸点

7 評価Ⅰ で用いたデータは、IUCLID 2000 に記載された標準圧力(101.3 kPa)において EU
8 Method A.2 で測定された値(-4.5 °C)である。

9 信頼性の定まった情報源において、標準圧力(101.3kPa)におけるデータのうち、推計値を
10 除き、出典の重複を除くと-4.41 °C (CCD 2007)、-4.5 °C (Merck 2006)、-4.6 °C (CRC 2009)、
11 -4.411 °C (EU-RAR 2002)が得られた。これら 4 データの算術平均値(-4.5 °C)を評価Ⅱで採
12 用する。

13 14 ③蒸気圧

15 評価Ⅰ で用いたデータは、IUCLID 2000 に記載された EU Method A.4 で 21 °C にて測定
16 された値 (2.45×10^5 Pa) を 20 °C に補正した値(2.28×10^5 Pa)である。

17 信頼性の定まった情報源では、様々な温度における蒸気圧の値のテーブル (CRC 2009)、
18 及び複数の温度での測定値に基づく回帰式 (Mackay 2006) が記載されている。これらを
19 20°C に内挿すると 2.398×10^5 Pa (Mackay 2006)、 2.402×10^5 Pa (Mackay 2006)、 $2.402 \times$
20 10^5 Pa (CRC 2009) という値が得られた。これら 3 データの算術平均値(2.40×10^5 Pa)を評価
21 Ⅱで採用する。

22 23 ④水に対する溶解度

24 評価Ⅰ で用いたデータは、IUCLID 2000 に記載された EU Method A.6 で測定された値
25 (500 mg/L)である。

26 EU-RAR 2002 によれば、IUCLID の 500 mg/L の値をサポートするデータは提出されて
27 いない。信頼性の定まった複数の情報源(ATSDR 2009、Mackay 2006、PhysProp、EU-RAR
28 2002、MOE 2003、HSDB)では、McAuliffe 1966 が測定した値(735 mg/L)(shake flask-GG
29 法) が引用されている。この値の測定温度は情報源によって 25 °C の記載と 20 °C の記載に
30 分かれていた(25°C : ATSDR 2009、Mackay 2006、PhysProp 20 °C : EU-RAR 2002、MOE
31 2003、HSDB)。McAuliffe 1966 を確認すると 25 °C であったため、この値を 20 °C に補正
32 した値(686 mg/L)を評価Ⅱで採用する。

33 34 ⑤logPow

35 評価Ⅰ で用いたデータは、信頼性の定まった情報源である既存化学物質安全性点検におい
36 て OECD TG 107 (フラスコ振とう法) を用いた GLP 下の試験結果(MITI 1990)である(1.93)。
37 評価Ⅱにおいても、この値(1.93)を用いる。

38 39 ⑥ヘンリー係数

40 評価Ⅰ で用いたデータは、4 データ(7.46×10^3 Pa \cdot m³/mol(CICAD 2001)、 7.50×10^3 Pa \cdot
41 m³/mol(ATSDR 2009)、 7.50×10^3 Pa \cdot m³/mol(USHPV 2010)、 2.07×10^4 Pa \cdot m³/mol(CRC

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. 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報源のこと

1 2009))から求めた中央値である($7.50 \times 10^3 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$)。

2 これらのデータは推計値、もしくは測定値か推計値か不明な値であり、信頼性の定まった
3 情報源の中に測定値は見つからなかった。水に対する溶解度は 1 mol/L より小さい(0.686g/L
4 $\div 54.09 = 0.013\text{mol/L}$)ため、蒸気圧と水に対する溶解度比から算出した値($1.89 \times 10^4 \text{ Pa} \cdot$
5 m^3/mol)を評価Ⅱでは用いる。

6

7 ⑦Koc

8 評価Ⅰ で用いたデータは、信頼性の定まった情報源である ATSDR 2009 に記載された値
9 (288 L/kg)であるが、推計値であった。

10 信頼性の定まった情報源の中に測定値は見つからなかったため、 $\log\text{Pow}(1.93)$ を入力値と
11 して KOCWIN(v2.00)で推計した値(47.3 L/kg)を用いる。

12

13 ⑧BCF

14 評価Ⅰ で採用したデータは、BCFBAF(v3.01)を用いて推定した値(8.72)である。

15 信頼性の定まった情報源の中に実測値は得られなかったため、技術ガイダンスに従い
16 NITE カテゴリーアプローチで推計した値(3.16 L/kg)(カテゴリーⅠ)を評価Ⅱでは用いる。

17

18 ⑨BMF

19 評価Ⅰ で採用した BMF は、 $\log\text{Pow}$ と BCF の値から技術ガイダンスに従って設定した値
20 である。

21 評価Ⅱにおいても、BMF の測定値は得られなかったため、評価Ⅰと同じ値 (1) を用いる。

22

1 1-2 分解性

2 下表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¹⁾

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	0.24 22°Cで測定された反応速度定数 ³⁾ から OH ラジカル濃度 5×10^5 molecule/cm ³ として算出
		オゾンとの反応	0.98 22°Cで推計された反応速度定数 ³⁾ からオゾン濃度 7×10^{11} molecule/cm ³ として算出
		硝酸ラジカルとの反応	0.63 22°Cで測定された反応速度定数 ³⁾ から硝酸ラジカル濃度 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	10,000 分解度試験 ²⁾ の BOD の値から設定した値
		加水分解	NA
		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	10,000 水中の生分解半減期と同じと仮定
		加水分解	NA
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	40,000 水中の生分解半減期の4倍と仮定
		加水分解	NA

5 1) 平成 27 年度第 2 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
6 ビュー会議（平成 27 年 6 月 10 日）で了承された値

7 2) MITI (1990)

8 3) Mackay (2006)

9 NA: 情報が得られなかったことを示す

10

11 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
12 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。

13

14 ①大気

15 大気中での総括分解半減期の情報は得られなかったが、機序別の情報が得られた。

16

17 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

18 Mackay 2006 では、反応速度定数の測定データとして、26.5 °Cで $(6.85 \pm 0.69) \times 10^{-11}$
19 cm³/molecule/s(フラッシュ光分解-共鳴蛍光法)、24 °Cで 6.85×10^{-11} cm³/molecule/s(相対
20 法)、22 °Cで 6.65×10^{-11} cm³/molecule/s(相対法)が記載されている。20 °Cにより近い 22 °C
21 での測定値 6.65×10^{-11} cm³/molecule/s を半減期算出に採用する。大気中 OH ラジカル濃度
22 を技術ガイダンスの 5×10^5 molecule/cm³とした場合、半減期は 0.24 日と算出される。この
23 値(0.24 日)を大気に適用する。

24 ①-2 オゾンとの反応の半減期

25 Mackay 2006 では、反応速度定数の測定データとして、22 °Cで $(1.17 \pm 0.19) \times 10^{-17}$

1 cm³/molecule/s (相対法) が記載されている。この値((1.17±0.19) × 10⁻¹⁷ cm³/molecule/s)
2 を半減期算出に採用する。大気中オゾン濃度を技術ガイダンスの 7 × 10¹¹ molecule/cm³ とし
3 た場合、半減期は 0.98 日と算出される。この値 (0.98 日)を大気に適用する。

4 ①-3 硝酸ラジカルとの反応の半減期

5 Mackay 2006 では、反応速度定数の測定データとして、22 °Cで(5.34 ± 0.62) × 10⁻¹⁴
6 cm³/molecule/s(相対法)、25 °Cで 2.1 × 10⁻¹³ cm³/molecule/s (fast flow system/MS)が記載さ
7 れている。20 °Cにより近い 22 °Cでの測定値(5.34 ± 0.62) × 10⁻¹⁴ cm³/molecule/s を半減
8 期算出に採用する。大気中硝酸ラジカル濃度を技術ガイダンスの 2.4 × 10⁸ molecule/cm³ と
9 した場合、半減期は 0.63 日と算出される。この値 (0.63 日)を大気に適用する。

10 ②水中

11 水中での総括分解半減期の情報は得られなかったが、生分解に関する情報が得られた。

12 ②-1 生分解の半減期

13 好氣的な生分解半減期として 7 日～28 日(Howard 1991)という情報があった。この 7 日と
14 いう値は Mackay 2006 でも引用されていた。Howard 1991 の値は専門家判断によって、分
15 解は「Moderately fast」として半減期を最短 7 日、最大 4 週間と導いたものであるが、専門
16 家判断の理由は明記されていない。また、順化などの条件が揃った場合、微生物処理により
17 生分解されるとの報告や、湖水から分離したプロパンを資化する微生物を用いた場合、エポ
18 キシブテンにエポキシ化されたと報告がある(NITE 2005、Howard 1989、HSDB)。

19 既存化学物質安全性点検 (MITI 1990) が行われており、4 週間後の分解度(BOD)は 0%、
20 4%であった。なお、難分解性と判定されている。技術ガイダンスに従って分解度(BOD)か
21 ら半減期を設定すると 10,000 日となる。

22 これらの情報を踏まえ、生分解の半減期は上記範囲の最大値 10,000 日を採用する。

23 ③土壌

24 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
25 解反応に関する情報も得られなかった。

26 ③-1 生分解の半減期

27 半減期に関するデータは得られなかったため、土壌中での生分解半減期は、技術ガイダン
28 スに従って、水中の生分解半減期と同じ 10,000 日と採用する。

29 ④底質

30 情報収集の結果、底質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
31 解反応に関する情報も得られなかった。

32 ④-1 生分解の半減期

33 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、技術ガイダン
34 スに従って、水中の生分解半減期の 4 倍の 40,000 日と採用する。

2 【付属資料】

2-1 物理化学的性状等一覽

収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

出典)

Aldrich(2012): ALDRICH Chemistry Handbook of Fine Chemicals. 2012-2014.

ATSDR(2009): Agency for Toxic Substances and Disease Registry. “Draft Toxicological Profile of 1,3-Butadiene”, 2009.

CCD(2007): Richard J. Lewis Sr., Gessner Goodrich Hawley. Hawley’s Condensed Chemical Dictionary. 15th ed., 2007.

CICAD(2001): WHO. “1,3-BUTADIENE”, Concise International Chemical Assessment Document. No. 30. 2001.

<http://www.who.int/entity/ipcs/publications/cicad/en/cicad30.pdf>.

CRC(2009): Lide, D. R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 90th ed., CRC Press, 2009–2010.

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

EU-RAR(2002): European Union, Institute for Health and Consumer Protection. Risk Assessment Report (EU-RAR), 1,3-butadiene. 1st Priority List, vol.20, 2002.

Howard(1991): Howard, P. H. et al. Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis publishers, 1991.

HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank.

<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, (2015-03-04 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 ed., CRC press, 2006.

Merck(2006): The Merck Index. 14th ed.

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

MITI(1990): MITI. 1,3-ブタジエン (被験物質番号 K-875) の微生物による分解度試験.

MOE(2003): MOE. 化学物質の環境リスク評価 第2巻, ブタジエン. 2003.

NITE(2009): NITE. カテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測に関する報告書. 2009.

NITE(2005): NITE. 化学物質の初期リスク評価書, 1,3-ブタジエン. Ver. 1.0, No. 9, 2005.

PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2015-03-04 閲覧).

1 USHPV(2010): US EPA. Hazard Characterization Document. Screening-Level Hazard
2 Characterization, Crude Butadiene C4 Category.

3

4 **2-2 その他**

5 特になし。