

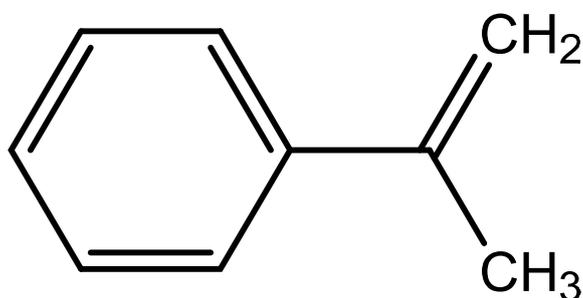
(案)

優先評価化学物質のリスク評価(一次)
生態影響に係る評価Ⅱ

Ver.1.0

イソプロペニルベンゼン
(別名 α -メチルスチレン)

優先評価化学物質通し番号 48



平成 26 年 6 月

厚生労働省
経済産業省
環境省

目 次

1		
2		
3		
4	1 化学物質のプロファイル	4
5	1-1 優先評価化学物質等の情報等	4
6	1-2 評価対象物質の同定情報	5
7	2 評価対象物質の性状	6
8	2-1 物理化学的性状及び濃縮性	6
9	2-2 分解性	8
10	3 排出源情報	11
11	3-1 化審法届出情報	11
12	3-2 PRTR 情報	16
13	3-3 排出等に係るその他の情報	18
14	4 有害性評価(生態)	19
15	4-1 生態影響に関する毒性値の概要	19
16	(1) 水生生物	19
17	(2) 底生生物	19
18	4-2 予測無影響濃度 (PNEC) の導出	19
19	(1) 水生生物	20
20	(2) 底生生物	20
21	4-3 有害性評価に関する不確実性解析	20
22	4-4 結果	21
23	4-5 有害性情報の有無状況	21
24	4-6 出典	22
25	5 暴露評価と各暴露シナリオでのリスク推計	23
26	5-1 環境媒体中の検出状況	23
27	5-1-1 水質モニタリングデータ	23
28	5-1-2 底質モニタリングデータ	24
29	5-2 排出源ごとの暴露シナリオによる暴露評価とリスク推計	24
30	5-2-1 化審法届出情報に基づく評価	25
31	(1) 暴露評価	25
32	① 暴露シナリオ	25
33	② 排出量推計結果	25
34	③ 環境媒体中濃度の推計結果	26
35	(2) リスク推計結果	26
36	5-2-2 PRTR 情報に基づく評価	29
37	(1) 暴露評価	29
38	① 暴露シナリオ	29
39	② 排出量の情報	29
40	③ 環境媒体中濃度の推計結果	29

1	(2) リスク推計結果.....	30
2	5-3 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおける暴露評価とリスク推計.....	32
3	5-3-1 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計（化審法届出情報と PRTR 情報の	
4	利用）.....	32
5	(1) 推計条件.....	32
6	(2) 推計結果.....	33
7	5-3-2 環境中濃度等の空間的分布の推計（PRTR 情報の利用）.....	34
8	(1) 推計条件.....	35
9	(2) 環境中濃度の推計結果.....	36
10	(3) 環境中分配比率等の推計結果.....	38
11	(4) G-CIEMS の推計結果とモニタリングデータとの比較解析.....	38
12	5-3-3 環境モニタリング情報に基づく評価.....	39
13	(1) 水生生物.....	40
14	(2) 底生生物.....	40
15	5-4 用途等に応じた暴露シナリオによる暴露評価とリスク推計.....	40
16	5-5 広域的・長期的スケールの数理モデルによる残留性の評価.....	40
17	5-5-1 総括残留性.....	41
18	5-5-2 定常到達時間の推計.....	42
19	5-6 暴露評価とリスク推計に関する不確実性解析.....	44
20	5-6-1 不確実性解析の概要.....	44
21	5-6-2 評価対象物質.....	47
22	5-6-3 物理化学的性状等.....	47
23	5-6-4 PRTR 情報等の不確実性.....	47
24	5-6-5 排出量推計の不確実性.....	48
25	5-6-6 暴露シナリオの不確実性.....	48
26	6 まとめと結論.....	50
27	6-1 有害性評価.....	50
28	6-2 暴露評価とリスク推計.....	50
29	6-2-1 排出源ごとの暴露シナリオによる評価.....	50
30	6-2-2 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオによる評価.....	50
31	(1) 環境中濃度の空間的分布の推計.....	50
32	(2) 環境モニタリング情報に基づく評価.....	51
33	① 水生生物.....	51
34	② 底生生物.....	51
35	6-2-3 用途等に応じた暴露シナリオによる評価.....	52
36	6-3 考察とまとめ.....	52
37	6-4 補足事項.....	52
38	7 【付属資料】.....	53
39	7-1 参照した技術ガイダンス.....	53
40	7-2 物理化学的性状等一覧.....	53
41	7-3 Reference chemical の物理化学的性状等の情報源等.....	53
42	7-4 生態影響に関する有害性評価Ⅱ.....	55
43	7-4-1 各キースタディの概要.....	55

1	7-4-2 平衡分配法による PNEC _{sed} の算出	56
2	7-4-3 国内外における生態影響に関する有害性評価の実施状況	57
3	(1) 既存のリスク評価書における有害性評価の結果.....	57
4	(2) 水生生物保全に関する基準値等の設定状況.....	58
5	(3) 出典.....	58
6		
7		

1 化学物質のプロファイル

2 1-1 優先評価化学物質等の情報等

3 優先評価化学物質「イソプロペニルベンゼン（別名 α -メチルスチレン）」（以下「イソプロ
4 ペニルベンゼン」という。）について、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律（以下
5 「化審法」という。）に係わる情報を表 1-1 に示す。

6
7 **表 1-1 化審法に係わる情報**

優先評価化学物質官報公示名称	イソプロペニルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
優先評価化学物質通し番号	48
優先評価化学物質指定官報公示日	平成 23 年 4 月 1 日
官報公示整理番号、既存化学物質名簿官報公示名称	3-5 : 2-フェニルプロピレン 3-8 : モノ又はジアルキル(C=1~2)スチレン
過去の物質区分	既存化学物質 第二種監視化学物質 第三種監視化学物質
既存化学物質安全性点検結果(分解性・蓄積性)	難分解性(変化物なし)・低濃縮性
既存化学物質安全性点検結果(人健康影響)	実施(第二種監視化学物質相当)
既存化学物質安全性点検結果(生態影響)	実施(第三種監視化学物質相当)
優先評価化学物質の製造数量等の届出に含まれる その他の物質 ^(注)	なし

8 (注)「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について」の「2. 新規化学物質の製造又は
9 輸入に係る届出関係」により新規化学物質としては取り扱わないものとしたもののうち、構造の一部
10 に優先評価化学物質を有するもの（例：分子間化合物、ブロック重合体、グラフト重合体等）及び優
11 先評価化学物質の構成部分を有するもの（例：付加塩、オニウム塩等）については、優先評価化学物
12 質を含む混合物として取り扱うこととし、これらの製造等に関しては、優先評価化学物質として製造
13 数量等届出する必要がある。（「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について」平
14 成 23 年 3 月 31 日薬食発 0331 第 5 号、平成 23-03-29 製局第 3 号、環企発第 110331007 号）

15
16 国内におけるその他の関連法規制情報を表 1-2 に示す。

17
18 **表 1-2 国内におけるその他の関係法規制**

国内における関係法規制		対象
特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理 の改善の促進に関する法律(化管法) (平成 21 年 10 月 1 日から施行)		アルファーマチルスチレン ： 第一種指定化学物質 1-436
(旧)化管法 (平成 21 年 9 月 30 日まで)		アルファーマチルスチレン ： 第一種指定化学物質 1-335
毒物及び劇物取締法		—
労働安全 衛生法	製造等が禁止される有害物等	—
	製造の許可を受けるべき有害物	—
	名称等を表示すべき危険物及び有害物	—
	名称等を通知すべき危険物及び有害物	アルファーマチルスチレン、対象となる範囲(重量%) ≥ 0.1 : 政令第 18 条の 2 別表第 9 の 36
化学兵器禁止法		—
オゾン層保護法		—
大気汚染防止法		イソプロペニルベンゼン (別名 : α -メチルスチレン) ： 有害大気汚染物質、中環審第 9 次答申の 20

国内における関係法規制	対象
水質汚濁防止法	—
土壌汚染対策法	—
有害物質を含有する家庭用品の規制に関する法律	—

出典：(独)製品評価技術基盤機構, 化学物質総合情報提供システム (CHRIP),

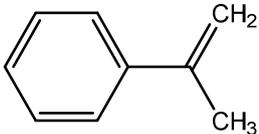
URL : <http://www.safe.nite.go.jp/japan/db.html>,

平成 26 年 3 月 25 日に CAS 登録番号 98-83-9 で検索

1-2 評価対象物質の同定情報

評価対象とするイソプロペニルベンゼンの同定情報を表 1-3 に示す。

表 1-3 評価対象物質の同定情報

評価対象物質名称	イソプロペニルベンゼン
構造式	
分子式	C9H10
CAS 登録番号	98-83-9

2 評価対象物質の性状

本章では、5章の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。

2-1 物理化学的性状及び濃縮性

モデル推計に採用したイソプロペニルベンゼンの物理化学的性状及び生物濃縮係数を表2-1に示す。1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)が3以上であるため、イソプロペニルベンゼンの生態影響評価においては、底質に残留しやすいと分類し、水生生物だけでなく底生生物も評価対象とする。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 2-1 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	—	118.18	—	118.18
融点	°C	-23.2 ²⁾	測定値か推計値か不明	-23.2 ²⁾
沸点	°C	<u>165.4</u> ³⁾	標準圧力(101,300 Pa)における値(測定値か推計値か不明)	161.5 ²⁾
蒸気圧	Pa	<u>300</u> ²⁾	20°Cでの測定値	280 ²⁾
水に対する溶解度	mg/L	93.4 ²⁾	OECD TG 105による25°Cの測定値(GLP)を20°Cの値に補正	93.4 ²⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	3.48 ²⁾	OECD TG 107による測定値(GLP)	3.48 ²⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	<u>380</u>	20°Cの蒸気圧と水に対する溶解度からの推計値	354
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	1,047	logPowを用いたKOCWIN ⁴⁾ による推計値	1,047
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	72 ⁵⁾	既存化学物質安全性点検での試験結果	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) 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、蓄積性等のレビュー会議(平成25年12月19日)で了承された値
- 2) Revised OECD HPV Form 1 SIDS Dossier on the HPV Phase-4 Chemical (1-Methylethenyl)benzene, 1998
- 3) CRC
- 4) Estimation Program Interface (EPI) Suite内に記載されているプログラム
- 5) 既存化学物質安全性点検結果
- 6) 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～」
- 7) 評価Iにおいて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で用いたデータは、SIDSで採用されている(acceptable)データである。さらに、他の信頼性が定まった情報源(「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。以下、同じ)のデータの多くも同じ値であるため、評価IIにおいても、この値(-23.2°C)を用

1 いる。

2

3 ②沸点

4 評価Ⅰで用いたデータは、SIDSで採用されている (acceptable)、標準圧力 (101,300 Pa)
5 におけるデータ (161~162°C) の平均値である。しかし、他の信頼性が定まった情報源では
6 標準圧力におけるデータは、165.4°Cという記載が多かった (CRC Handbook of Chemistry
7 and Physics 他)。このため、評価Ⅱにおいては、165.4°Cを用いる。

8

9 ③蒸気圧

10 評価Ⅰで用いたデータは、SIDSで採用されている (acceptable) 測定データである。SIDS
11 ではこの他に、20°Cの測定値として 300 Pa というデータも報告されている。

12 参考のために、20°Cを含む温度範囲に対して提案されている Antoine 式 (\log
13 $(P/\text{mmHg}) = [-0.2185 \times 10214.6 / (T/K)] + 7.959753$)¹ で求めた 20°Cの蒸気圧は、296 Pa であっ
14 たため、評価Ⅱにおいては、300 Pa を用いる。

15

16 ④水に対する溶解度

17 評価Ⅰで用いたデータは、SIDSで採用されており (acceptable)、OECD TG 105 (フラス
18 コ法) による 25°Cの測定値 (GLP) を 20°Cの値に温度補正した値である。評価Ⅱにおいても、
19 この値 (93.4 mg/L) を用いる。なお、このデータは既存化学物質安全性点検事業によるもの
20 である。

21

22 ⑤logPow

23 評価Ⅰで用いたデータは、SIDSで採用されており (acceptable)、OECD TG 107 (フラスコ
24 振とう法) による測定値 (GLP) である。評価Ⅱにおいても、この値 (3.48) を用いる。なお、
25 このデータは既存化学物質安全性点検事業によるものである。

26

27 ⑥ヘンリー係数

28 評価Ⅰで用いたデータは、蒸気圧と水に対する溶解度のデータから推計された 354 Pa·
29 m^3/mol である²。他の信頼性が定まった情報源に記載されたデータも推計値であった。評価
30 Ⅱにおいては、③で採用した蒸気圧 (300Pa) と④で採用した水に対する溶解度 (93.4 mg/L)
31 のデータから計算式¹により算出した 380 Pa· m^3/mol を用いる。

32

33 ⑦Koc

34 評価Ⅰで用いたデータは、logPow を入力値として KOCWIN (v2.00) で推定した 1,047
35 L/kg である。情報収集の結果、Koc の測定値は得られなかったため、評価Ⅱにおいてもこの
36 値を用いる。なお、本物質の分子量 (118.18) は KOCWIN のトレーニングセットの範囲内
37 (分子量 : 32.04~665.02) にある。

38

39 ⑧BCF

40 評価Ⅰで用いたデータは、既存化学物質安全性点検事業の濃縮度試験のデータである。こ
41 の試験においては定常状態での BCF が算出されていないため、各濃度区の後半 3 回 (4 週、

¹ Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals

² 計算式 $H = VP / (WS / MW)$ 、H:ヘンリー係数、VP:蒸気圧、WS:水に対する溶解度、MW:分子量

1 6週、8週)の測定の算術平均値のうち、最大値を用いている。評価Ⅱにおいてもこのデータ
2 (72)を採用する。

3

4 ⑨BMF

5 評価Ⅰで採用したBMFは、logPowとBCFの値から化審法における優先評価化学物質に
6 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。)に従って設定した
7 値である。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
8 用いる。

9

10 2-2 分解性

11 イソプロペニルベンゼンの環境媒体(大気、水中、土壌、底質)中での分解の半減期を表 2-2
12 に示す。

13 評価Ⅱにおける精査において、機序別の半減期の値が入手できた場合、媒体ごとの質量分
14 布比を考慮して各機序の1次速度定数($\ln(2) \div$ 半減期)から総括分解半減期を算出する。な
15 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
16 とを示す。5章の暴露評価におけるモデル推計で使用した各環境媒体の半減期は、5章に記
17 載している。

18

19

表 2-2 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	0.31 25±2°Cで測定された反応速度定数 ²⁾ から推計	
		オゾンとの反応	0.082 反応速度定数(推計値) ³⁾ から推計	
		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	10,000 難分解性物質 ⁴⁾ として半減期を推計	
		加水分解	推計せず	GLP下のOECD TG 111の加水分解試験で安定 ⁵⁾
		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	推計せず	水中加水分解試験の欄参照
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	推計せず	水中加水分解試験の欄参照

20 1) 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、蓄積性等のレビュー会議(平
21 成25年12月19日)で了承された値

22 2) Handbooks of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, 2nd
23 Edition, CRC-Press, 1997

24 3) Hazardous Substances Data Bank (HSDB)

25 4) 既存化学物質安全性点検結果

26 5) Revised OECD HPV Form 1 SIDS Dossier on the HPV Phase-4 Chemical (1-Methylethenyl)benzene, 1998

27 NA: 情報が得られなかったことを示す

28

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
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45

上記分解項目について、精査概要を以下に示す。

①大気

大気中での総括分解半減期の情報は得られなかった。また、機序別の半減期についても、硝酸ラジカルとの反応に関する情報は得られなかった。

①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

半減期算出に採用した反応速度定数データ $(5.2 \pm 0.6) \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ は **Handbooks of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals** に記載のある測定データである。25±2℃の以外の温度での情報がないため、この値を半減期算出に採用する。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半減期は 0.31 日と算出される。

この値を大気に適用する。

①-2 オゾンとの反応の半減期

半減期算出に採用した反応速度定数データ $1.4 \times 10^{-16} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ は **Hazardous Substances Data Bank** に記載のある推計データである。これ以外の情報がないため、この値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 $7 \times 10^{11} \text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半減期は 0.082 日と算出される。

この値を大気に適用する。

②水中

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

②-1 生分解の半減期

情報収集の結果、半減期に関するデータは得られなかった。既存化学物質安全性点検結果によれば、被験物質 100 mg/L、活性汚泥 30 mg/L で 2 週間試験した結果、0%の分解度で、難分解性と判定されている (SIDS においても同じ試験結果が採用されている)。半減期データは得られなかったため、生分解による半減期は、技術ガイダンスに従って 10,000 日と設定する。

この半減期は、溶存態および吸着態の両方に適用する。

②-2 加水分解の半減期

SIDS によれば、pH4、7、9 で、OECD TG 111 の加水分解試験 (GLP) を行った結果、安定であったと報告されている。有意な分解が認められなかったため、半減期は算出しない。

③土壌

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、機序別の分解反応に関する情報も得られなかった。

③-1 生分解の半減期

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、技術ガイダンスに従って、水中の生分解半減期と同じ 10,000 日と設定する。

この半減期は、溶存態および吸着態の両方に適用する。

④底質

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、機序別の分解反応に関する情報も得られなかった。

④-1 生分解の半減期

- 1 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、技術ガイダンスに従って、水中生分解半減期の4倍の40,000日と設定する。
- 2
- 3 この半減期は、溶存態および吸着態の両方に適用する。
- 4

3 排出源情報

3 章ではイソプロペニルベンゼンの排出源に関連する情報をまとめた。3-1 では化審法第9条に基づくイソプロペニルベンゼンの製造等の届出数量や用途、その情報に基づき推計した排出量、3-2 では化管法に基づく排出量情報、3-3 ではその他の排出量に係る情報を示す。

3-1 化審法届出情報

イソプロペニルベンゼンは、平成18年に旧第三種監視化学物質に、平成23年に優先評価化学物質に指定されている。

イソプロペニルベンゼンの平成18年度から平成23年度までの6年間の製造数量、輸入数量を図3-1に示す。イソプロペニルベンゼンは、平成21年度までは輸入はなく国内における製造のみであり、約35,000トンから48,000トンまでの間で製造されている。イソプロペニルベンゼンの製造数量、輸入数量は平成18年度から平成23年度までの間ほぼ横ばいであった。

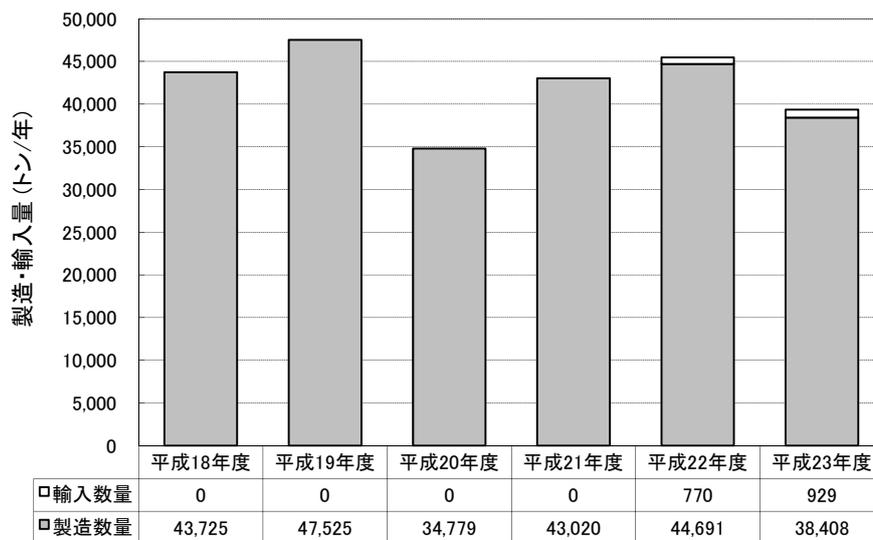


図 3-1 製造・輸入数量の経年変化

優先評価化学物質の届出に変わった平成22年度から平成23年度までの出荷量の用途別内訳を図3-2に示す。平成22年度から平成23年度までの合計で16用途の届出があり、平成22年度から平成23年度で同じ用途で届出があったものは、『中間物-合成原料、重合原料、前駆重合体』、『化学プロセス調節剤-重合調節(停止)剤、重合禁止剤、安定剤』、『印刷インキ、複写用薬剤(トナー等)[筆記用具、レジストインキ用を含む]-可塑剤、充填剤』、『印刷インキ、複写用薬剤(トナー等)[筆記用具、レジストインキ用を含む]-乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、造膜助剤』、『合成繊維、繊維処理剤[不織布処理を含む]-均染剤、浸透剤、促染剤(染色助剤)、媒染剤、捺染用糊剤』、『輸出入』の6用途であった。

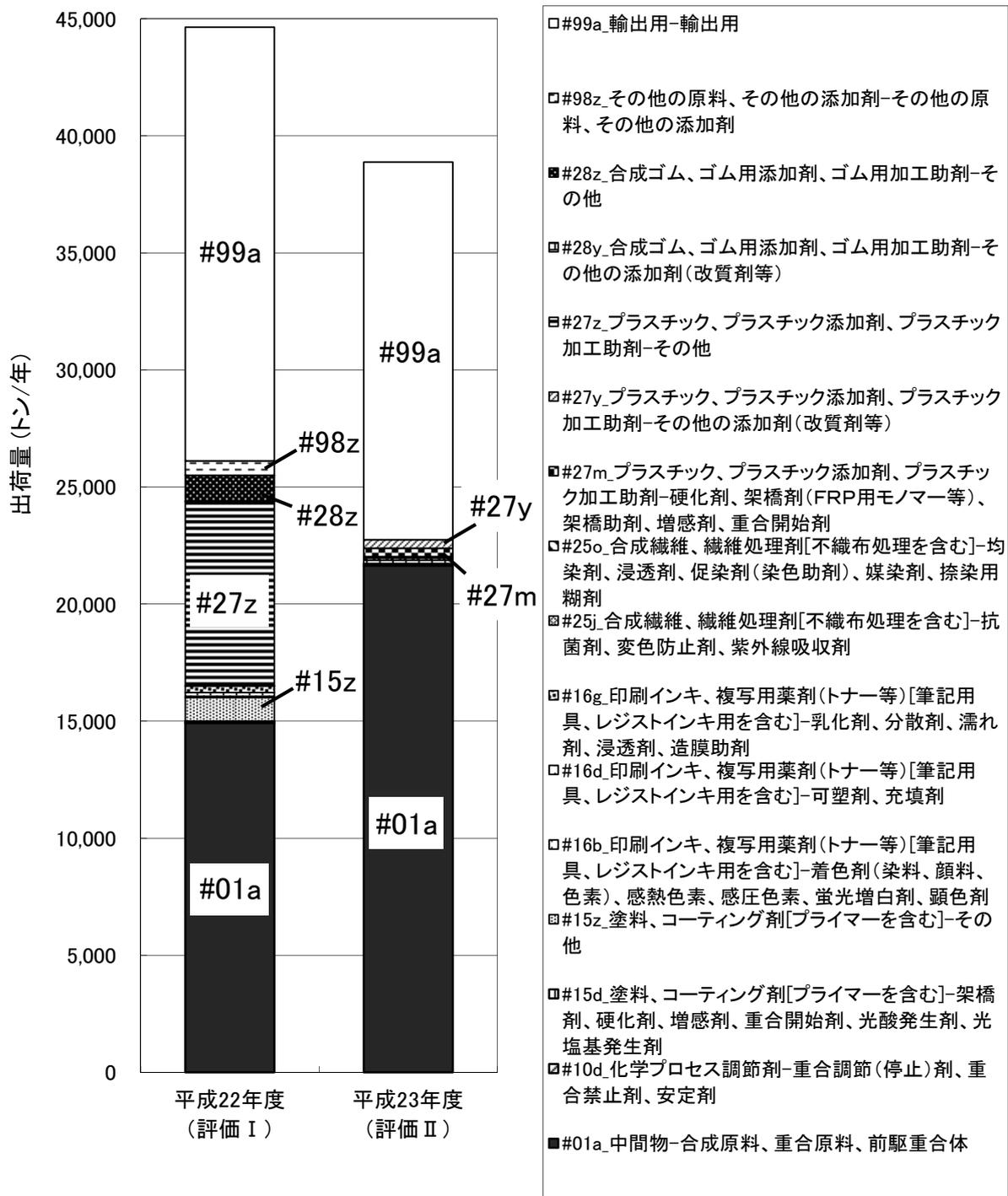


図 3-2 年度別用途別出荷量

注：本評価の際に、平成 23 年度は用途を精査した

平成 23 年度の化審法届出情報を用いてリスク推計を行うため、イソプロペニルベンゼンの詳細用途別出荷先都道府県数及び詳細用途別ライフサイクルステージ別の仮想的排出源の数を表 3-1 に、排出係数を表 3-2 にそれぞれ示す。

1
2

表 3-1 製造数量等届出制度の製造箇所、届出用途と出荷先の都道府県数
及び推定されるライフサイクルステージ別の仮想的な排出源の数(平成 23 年度)

用途番号 -詳細用途 番号	用途分類	詳細用途分類	出荷先 都道府 県数	仮想的な排出源の数		
				調合 段階	工業的 使用段階	計
01-a	中間物	合成原料、重合原料、前駆重 合体	21	-	21	21
10-d	化学プロセス調節剤	重合調節(停止)剤、重合禁止 剤、安定剤	1	1	1	2
15-d	塗料、コーティング剤 [プライマーを含む]	架橋剤、硬化剤、増感剤、重合 開始剤、光酸発生剤、光塩基 発生剤	1	1	1	2
16-d	印刷インキ、複写用薬 剤(トナー等)[筆記用 具、レジストインキ用を 含む]	可塑剤、充填剤	1	1	1	2
16-g	印刷インキ、複写用薬 剤(トナー等)[筆記用 具、レジストインキ用を 含む]	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透 剤、造膜助剤	1	1	1	2
25-j	合成繊維、繊維処理 剤[不織布処理を含む]	抗菌剤、変色防止剤、紫外線 吸収剤	1	1	1	2
25-o	合成繊維、繊維処理 剤[不織布処理を含む]	均染剤、浸透剤、促染剤(染色 助剤)、媒染剤、捺染用糊剤	1	1	1	2
27-m	プラスチック、プラスチ ック添加剤、プラスチ ック加工助剤	硬化剤、架橋剤(FRP用モノマ ー等)、架橋助剤、増感剤、重 合開始剤	1	1	1	2
27-y	プラスチック、プラスチ ック添加剤、プラスチ ック加工助剤	その他の添加剤(改質剤等)	1	1	1	2
			製造事 業所数			
製造			4			4
計						41

3
4

表 3-2 イソプロペニルベンゼンの用途別ライフサイクルステージ別の排出係数

用途番号 -詳細用途 番号	用途分類	調合段階 1		工業的使用段階		長期使用製品の使用段階		
		大気	水域	大気	水域	大気	水域	想定 期間 [年]
01-a	中間物	-	-	0.0005	0.00005	-	-	-
10-d	化学プロセス調節剤	0.001	0.0001	0.00005	0.0001	-	-	-
15-d	塗料、コーティング剤 [プライマーを含む]	0.001	0.000005	0.0025	0.0005	-	-	-
16-d	印刷インキ、複写用 薬剤(トナー等)[筆	0.001	0.000005	0.0025	0.00001	-	-	-

	記用具、レジストインキ用を含む]							
16-g	印刷インキ、複写用薬剤(トナー等)[筆記用具、レジストインキ用を含む]	0.001	0.000005	0.0025	0.00001	—	—	—
25-j	合成繊維、繊維処理剤[不織布処理を含む]	0.001	0.000005	0.03	0.01	—	0.3	5
25-o	合成繊維、繊維処理剤[不織布処理を含む]	0.001	0.000005	0.005	0.05	—	—	—
27-m	プラスチック、プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤	0.001	0.000005	0.01	0.00002	—	—	—
27-y	プラスチック、プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤	0.001	0.000005	0.005	0.00001	*	*	10
		製造段階						
コード*	製造	0.00005	0.000001					

1 * : 「当該ライフサイクルステージからの排出が想定されるものの、現段階では数値を設定しない。ただし、
2 リスク評価において長期使用製品の使用に係る評価を行う段階で検討を行う。」とされている箇所。検討
3 した結果、括弧内の数値を設定した。

4

5 なお、『プラスチック、プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤・その他の添加剤（改
6 質剤等）』の長期使用製品の使用段階の排出係数は「*」（表 3-2 の注釈参照）だったため、
7 数値の検討を実施した。該当する届出の具体的用途に「その他の添加剤（耐熱付与剤）」と記
8 述があり、熱に対する安定化剤と同様の排出の挙動を考えると考えられたため、『プラスチック、
9 プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤・安定化剤（酸化防止剤等）』と同一の値を長期
10 使用製品の使用段階の排出係数に設定した。

11 イソプロペニルベンゼンの製造箇所は 4 箇所、詳細用途別都道府県別出荷先の数は 29 で
12 ある。これらの情報から、リスク推計に利用する仮想的な排出源の数は、41 箇所と仮定され
13 る。

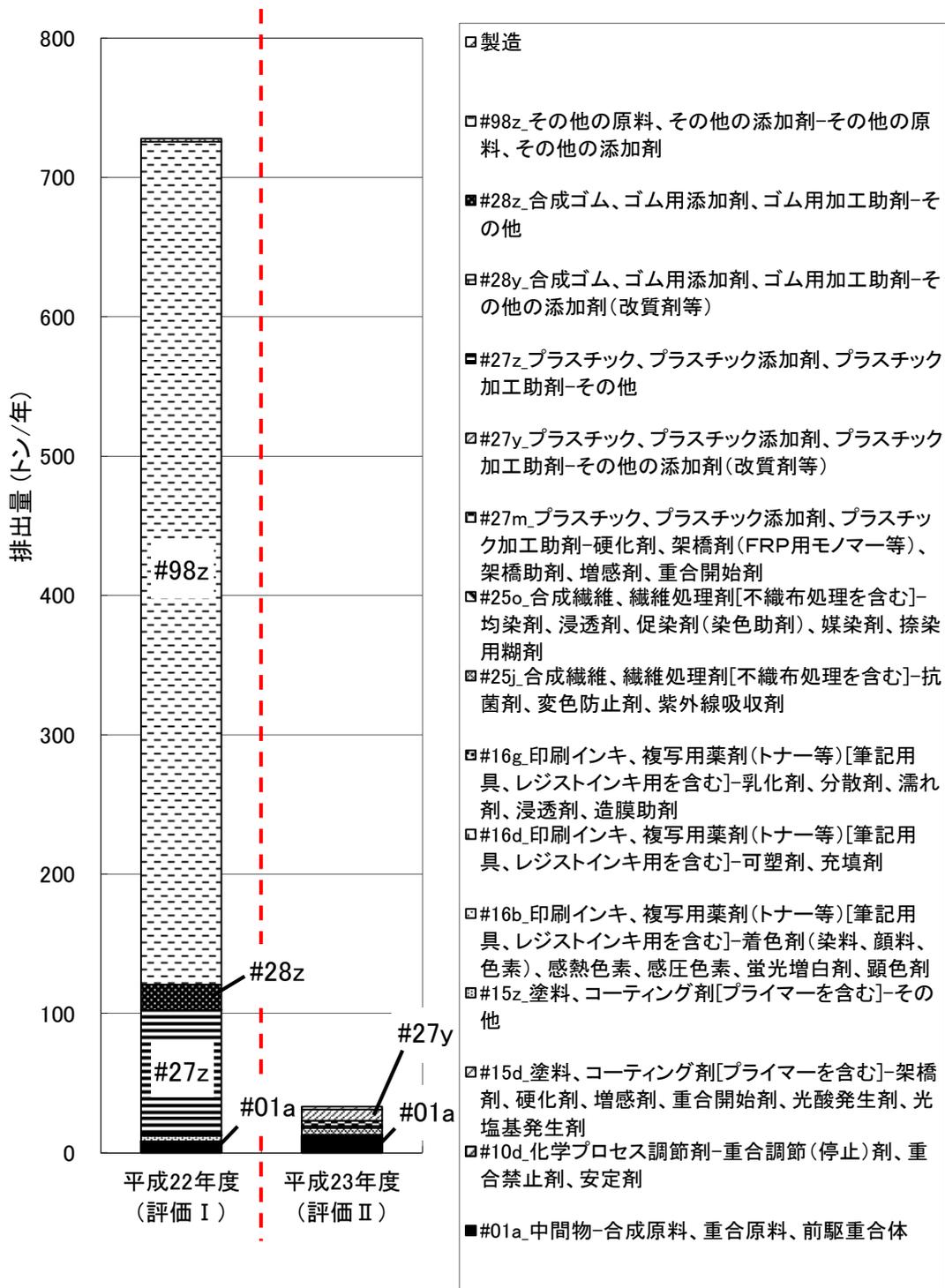
14 平成 23 年度の詳細用途別届出数量等と表 3-2 に示す排出係数から求めた推計排出量を
15 注：平成 22 年度は評価 I で使用した排出量のため、長期使用製品の使用段階からの排出量
16 が

17 含まれていない。また、本評価の際に、平成 23 年度は用途を精査した

18

19 図 3-3 に示す。参考のため、評価 I で使用した平成 22 年度の推計排出量も示す。ただし、
20 評価 I で使用した推計排出量には長期使用製品の使用段階からの排出量が含まれていない。
21 平成 23 年度の用途は精査し、当初、納入先の用途を十分に確認できない等の理由により、「そ
22 の他の原料、その他の添加剤・その他の原料、その他の添加剤」とされていた用途を事業者
23 に照会した。照会の結果、例えば、「その他の原料、その他の添加剤・その他の原料、その他の
24 添加剤」用途が「中間物・合成原料、重合原料、前駆重合体」用途に変更されたことにより、
25 推計排出量が減少している。平成 23 年度の推計排出量の合計は約 33 トンと推計され、「中

1 間物-合成原料、重合原料、前駆重合体」用途からの排出が最も多かった。また、大気への排
 2 出は、水域への排出の約 1.6 倍であった。
 3



4 注：平成 22 年度は評価 I で使用した排出量のため、長期使用製品の使用段階からの排出量が
 5 含まれていない。また、本評価の際に、平成 23 年度は用途を精査した
 6
 7
 8
 9

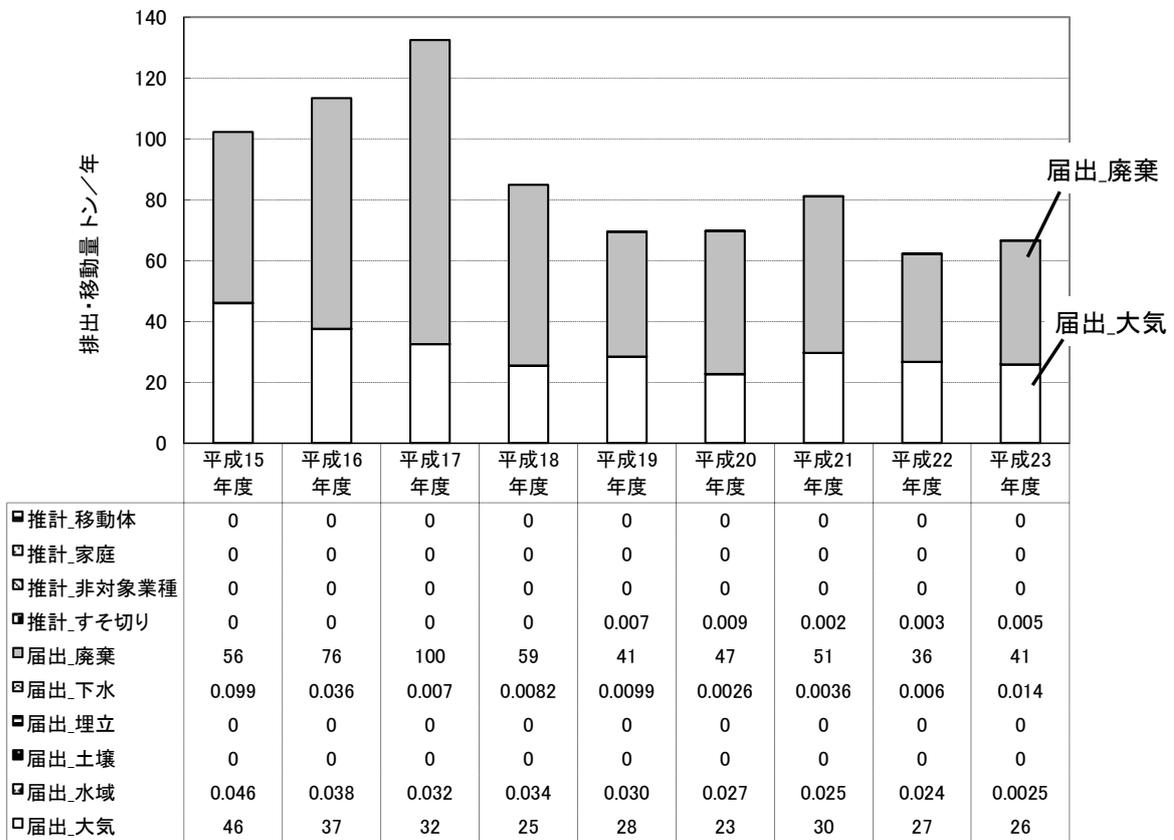
図 3-3 年度別推計排出量

1 3-2 PRTR 情報

2 化管法に基づく「平成 23 年度届出排出量及び移動量並びに届出外排出量の集計結果」(以
 3 下、平成 23 年度 PRTR 情報) から、平成 15 年度から平成 23 年度までのイソプロペニルベン
 4 ゼンの排出量等の経年変化を図 3-4 に、平成 23 年度の排出量等の内訳を図 3-5 に示す(こ
 5 こでの排出量は自家消費分からの排出を含んでいる)。

6 イソプロペニルベンゼンは、平成 23 年度の 1 年間に全国合計で届出事業者から大気へ 26
 7 トン、公共用水域へ 0.003 トン排出され、下水道に 0.01 トン、廃棄物として 41 トン移動し
 8 ている。土壌への排出及び埋め立ては無い。また、届出外排出量としては対象業種の届出外
 9 事業者から 0.005 トンの排出量が推計されている。非対象業種、家庭及び移動体からの排出
 10 量は推計されていない。

11 PRTR 情報によると、イソプロペニルベンゼンの排出量は、平成 15 年度から平成 18 年度
 12 までは減少を続け、平成 18 年度から平成 23 年度までの間はほぼ横ばいであった。



13 図 3-4 PRTR 制度に基づく排出・移動量の経年変化

14

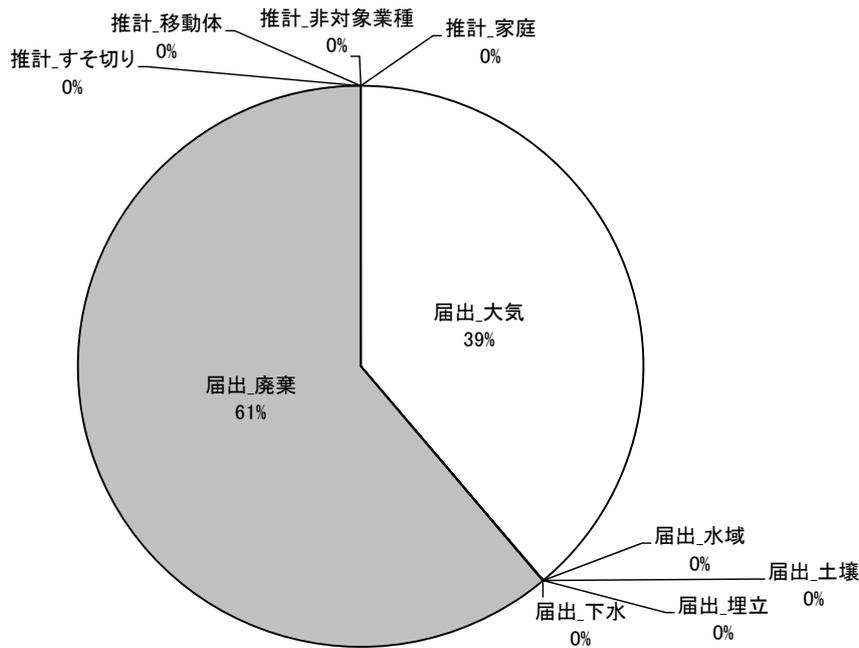


図 3-5 平成 23 年度の排出・移動量の内訳

続いて、平成 23 年度 PRTR 情報に基づき、イソプロペニルベンゼンの対象業種別・媒体別の排出量を図 3-6 に示す。

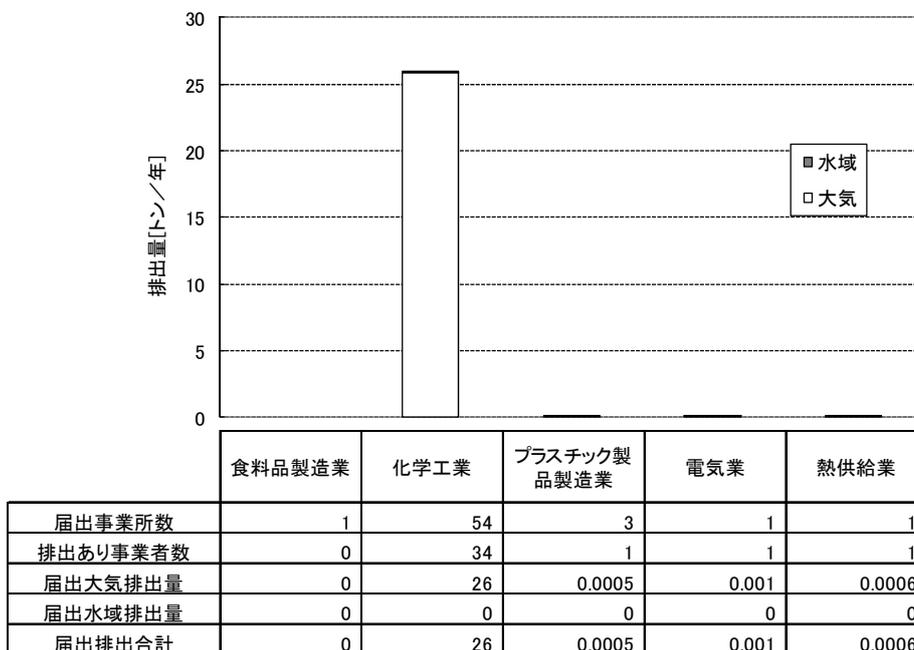


図 3-6 PRTR 届出排出量の業種別・媒体別内訳(平成 23 年度)

対象業種からのイソプロペニルベンゼンの排出量のうち、大気への排出量 26 トンは、ほとんどが化学工業 (54 事業所) からのものである。

なお、イソプロペニルベンゼンの届出事業所数は 60 であり、化審法届出情報の仮想的排出源の数 41 より多い。

図 3-5 に示したように平成 23 年度のイソプロペニルベンゼンの排出量のほぼ 100%が届

1 出排出量となっている。平成 23 年度のイソプロペニルベンゼンの届出外排出量（対象業種、
 2 非対象業種、家庭）について、内訳を表 3-3 に示す。イソプロペニルベンゼンは下水処理施
 3 設の推計のみが行われている。

4 化審法届出情報を用いた推計排出量約 33 トンは、PRTR 届出排出量 26 トンの約 1.3 倍と見
 5 積もられた。

6
7

表 3-3 PRTR 届出外排出量の内訳(平成 23 年度)

		年間排出量(トン/年)																						
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	合計	
		対象業種の事業者 のすそ切り以下	農薬	殺虫剤	接着剤	塗料	漁網防汚剤	洗浄剤・化粧品等	防虫剤・消臭剤	汎用エンジン	たばこの煙	自動車	二輪車	特殊自動車	船舶	鉄道車両	航空機	水道	オゾン層破壊物質	ダイオキシン類	低含有率物質	下水処理施設	合計	
大区分	移動体											○	○	○	○	○			○	○				
	家庭		○	○	○	○		○	○		○								○	○	○			
	非対象業種		○	○	○	○	○			○									○	○	○			
	対象業種(すそ切り)	○	○																○	○	○	○	○	0.005
推計量																							0.005	0.005

8
9
10

11 3-3 排出等に係るその他の情報

12 イソプロペニルベンゼンのその他の排出源として、調査した範囲では得られなかった。

13
14

1 **4 有害性評価（生態）**

2 生態影響に関する有害性評価は、技術ガイダンスに従い、当該物質の生態影響に関する
3 有害性データを収集し、それらデータの信頼性を確認するとともに、既存の評価書におけ
4 る評価の根拠となった有害性評価値を参考としつつ、PNEC 値に相当する値を導出した。

5 **4-1 生態影響に関する毒性値の概要**

6 **(1) 水生生物**

7 PNECwater を導出するための毒性値について、専門家による信頼性の評価が行われた結
8 果、表 4-1 に示す毒性値が PNECwater 導出に利用可能な毒性値とされた。

9
10 **表 4-1 PNECwater 導出に利用可能な毒性値**

栄養段階 (生物群)	急性	慢性	毒性値 [mg/L]	生物種		エンドポイント等		暴露期間	出典
				種名	和名	エンドポ イント	影響内容		
生産者 (藻類)		○	0.300	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	ムレミカツキ モ (緑藻)	NOEC	GRO(RATE)	72 時間	【1】*
	○		4.78	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	ムレミカツキ モ (緑藻)	EC ₅₀	GRO(RATE)	72 時間	【1】*
一次消費者 (又は 消費者) (甲殻類)		○	0.401	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC	REP	21 日	【2】
	○		2.62	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀	IMM	48 時間	【2】
二次消費者 (又は 捕食者) (魚類)	○		7.28	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀	MOR	96 時間	【2】

11 【 】内数字：出典番号

12
13 【エンドポイント】

14 EC₅₀ (Median Effective Concentration)：半数影響濃度、LC₅₀ (Median Lethal Concentration)：半数致死濃度、
15 NOEC (No Observed Effect Concentration)：無影響濃度

16 【影響内容】

17 GRO (Growth)：生長 (植物)、IMM (Immobilization)：遊泳阻害、MOR (Mortality)：死亡、

18 REP (Reproduction)：繁殖、再生産、

19 生産者 () 内：試験結果の算出法

20 RATE：生長速度より求める方法 (速度法)

21 * 文献1)をもとに、試験時の実測濃度 (幾何平均値) を用いて速度法により0-48時間の毒性値を再計算したもの
22

23
24 **(2) 底生生物**

25 底生生物に関して信頼性のある有害性データは得られなかった。
26

27 **4-2 予測無影響濃度 (PNEC) の導出**

28 評価の結果、採用可能とされた知見のうち、急性毒性及び慢性毒性のそれぞれについて、
29 生物群ごとに最も小さい値を予測無影響濃度(PNEC)導出のために採用した。そして、情報
30 量に応じて定められた不確実係数積 (UFs) を適用し、予測無影響濃度 (PNECwater) を
31 求めた。PNECsedについては、PNECwater と Koc からの平衡分配法による換算にて求めた。

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
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37

(1) 水生生物

<慢性毒性値>

生産者（藻類） *Pseudokirchneriella subcapitata* 生長阻害；72 時間 NOEC 0.300mg/L
一次消費者（甲殻類） *Daphnia magna* 繁殖阻害；21 日間 NOEC 0.401mg/L

<急性毒性値>

二次消費者（魚類） *Oryzias latipes* 96 時間 LC₅₀ 7.28mg/L

2 生物群での慢性毒性値が得られており、そのうち、生産者の成長阻害に対する無影響濃度（NOEC）0.300mg/L が最小値であることから、この 2 生物群のキースタディの候補は藻類の慢性毒性値（0.300mg/L）となり、二次消費者の慢性毒性値の不足分について外挿する不確実係数「5」（栄養段階間の外挿係数）で除し 0.060mg/L を得る。

慢性毒性値が得られなかった二次消費者については、信頼できる急性毒性値 7.28mg/L が得られており、この値を ACR（Acute chronic ratio：急性慢性毒性比）「100」で除した 0.0728mg/L を得る。

両者を比較し、毒性値が小さい 0.060mg/L をさらに 10（室内から野外への外挿係数）で除し、イソプロペニルベンゼンの PNECwater として 0.0060mg/L が得られた。

なお、本物質が優先評価化学物質として判定されたスクリーニング評価及びリスク評価（一次）評価Ⅰでは、ムレミカヅキモ（緑藻類）*Pseudokirchneriella subcapitata* の生長に対する 72 時間無影響濃度 0.17mg/L（面積法）を不確実係数積 50 で除した「0.0034 mg/L」が PNEC 値となっている。有害性評価Ⅱでの PNECwater は生産者（藻類）に対する同一のキースタディをもとに導出された値であるが、速度法により無影響濃度を新たに算出した。技術ガイダンスに基づき評価を行った結果、利用可能な新たなキースタディはなく、不確実係数積はリスク評価（一次）評価Ⅰと同様の 50 とした。

(2) 底生生物

底生生物の信頼できる有害性データは得られなかったため、水生生物に対する PNECwater から平衡分配法を用いて、底生生物に対する PNECsed を導出した。付属資料に示したパラメーターを用いて、乾重量換算で PNECsed 0.65mg/kg-dry が得られた（湿重量換算で 0.14mg/kg-wet）。

4-3 有害性評価に関する不確実性解析

水生生物では、生産者（藻類）と一次消費者（甲殻類）の慢性毒性値と二次消費者（魚類）の急性毒性値のうち、生産者の慢性毒性値をキースタディとして、不確実係数積「50」を当てはめて求めている。各生物の急性毒性値をみると、一次消費者が他の生物に比べて

1 小さい値であるが、生物による毒性値の差は 1.5～3 倍程度とそれほど大きくない。また、
 2 生産者と一次消費者の慢性毒性値の差も 1.3 倍と小さい。一方、二次消費者の慢性毒性値
 3 は得られていないが、仮に ACR で除した値を慢性毒性値相当とすると、生産者や一次消
 4 費者の慢性毒性値より 4～5 倍程度小さな値となる。このことから、当該物質の慢性的な
 5 影響は、二次消費者に対して大きい可能性もある。したがって、本評価での水生生物への
 6 PNECwater は二次消費者の慢性毒性値が得られておらず急性毒性値から ACR で除した値
 7 を用いている点に基本的な不確実性がある。より正確な PNECwater を求めるには、二次消
 8 費者の慢性毒性値を得る必要がある。その場合には不確実係数積は「10」となり、生産者
 9 と二次消費者の慢性毒性値の小さい値に不確実係数積「10」で除した値が PNECwater とな
 10 る。

11 PNECsed は、PNECwater に平衡分配法を用いて求めている。平衡分配法による算出には
 12 方法とパラメータ双方に不確実性があり、これらの妥当性を確認する手段は現時点では明
 13 確でないことから、毒性試験データを取得することが底生生物への有害性評価の不確実性
 14 を軽減することに繋がると考えられる。

15 4-4 結果

16 有害性評価Ⅱの結果、イソプロペニルベンゼンの水生生物に係る PNECwater は
 17 0.0060mg/L、底生生物に係る PNECsed は 0.65mg/kg-dry を採用する。

18
19

表 4-2 有害性情報のまとめ

	水生生物	底生生物
PNEC	0.0060 mg/L	0.65 mg/kg-dry
キースタディの毒性値	0.300 mg/L	—
UFs	50	—
(キースタディのエンドポイント)	生産者(藻類)の生長阻害に係る慢性影響に対する無影響濃度(NOEC)	(水生生物に対する PNECwater と Koc からの平衡分配法による換算値)

20
21

22 4-5 有害性情報の有無状況

23 イソプロペニルベンゼンのリスク評価(一次)の評価Ⅰ・評価Ⅱを通じて収集した範囲の有
 24 害性情報の有無状況を表 4-3 に整理した。

25 スクリーニング毒性試験、有害性調査指示に係る試験、それ以外の試験に分類して整理し
 26 た。

27

1
2

表 4-3 有害性情報の有無状況

試験項目			試験方法 ^{注1)}	有無	出典 (情報源)
スクリーニング生態毒性試験	水生生物急性毒性	藻類生長阻害試験	化審法、 OECD TG. 201	○	【1】
		ミジンコ急性遊泳阻害試験	化審法、 OECD TG. 202	○	【2】
		魚類急性毒性試験	化審法、 OECD TG. 203	○	【2】
第二種特定化学物質指定に係る有害性調査指示に係る試験	水生生物慢性毒性試験	藻類生長阻害試験	化審法、 OECD TG. 201	○	【1】
		ミジンコ繁殖阻害試験	化審法、 OECD TG. 211	○	【2】
		魚類初期生活段階毒性試験	化審法、 OECD TG. 210	×	
	底生生物慢性毒性試験 ^{注2)}	底質添加によるユスリカ毒性試験	化審法、 OECD TG. 218	×	
その他				×	

3 注1) 化審法：「新規化学物質等に係る試験の方法について」（平成 23 年 3 月 31 日 薬食発第 0331 号第 7
4 号、平成 23・03・29 製局第 5 号、環保企発第 110331009 号）に記載された試験方法
5 OECD：「OECD GUIDELINES FOR THE TESTING OF CHEMICALS」に記載された試験方法
6 注2) その他環境における残留の状況からみて特に必要があると認める生活環境動植物の生息又は生育に
7 及ぼす影響についての調査（現時点では底生生物への毒性）
8

9 4-6 出典

10 [1] (独) 国立環境研究所 (2005)：平成 16 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書
11 [2] 環境庁 (1997)：平成 8 年度 生態影響試験
12
13

1 **5 暴露評価と各暴露シナリオでのリスク推計**

2 暴露評価Ⅱの基となる3つの情報源(化審法情報、PRTR 情報及び環境モニタリング情報)
 3 について、対象物質ごとに得られる情報源の組合せは表 5-1 の列に示す4通りとなる。得ら
 4 れる情報に応じて、適用可能な手法が分かる。イソプロペニルベンゼンは化審法情報、
 5 PRTR 情報及び環境モニタリング情報が得られるため、太枠で示す暴露評価を行う。

6
7
8 **表 5-1 暴露評価の情報源別の推計ステップの違い**

組合せ シナリオ	化審法情報	化審法情報 PRTR情報	化審法情報 モニタリング情報	化審法情報 PRTR情報 モニタリング情報
排出源ごとの 暴露シナリオ	【化審法】必ず推計	【PRTR】届出情報を用いて推計		【PRTR】届出情報を用いて推計 【モニタリング】当該シナリオに対応する モニタリング情報が得られれば利用
様々な排出 源の影響を 含めた 暴露シナリオ	【化審法】必ず推計	【PRTR】PRTR情報を用いて推計	【モニタリング】一般環境のモニタリン グ情報とみなして利用	【PRTR】PRTR情報を用いて推計 【モニタリング】メッシュごとの推計値と 対応させて利用
用途等 に応じた シナリオ	大気系 非点源 シナリオ	【化審法】該当する用途があった場合に非点源の寄与分を推計 【PRTR】該当する用途等に係る推計が 行われていけば推計	【モニタリング】一般環境のモニタリン グ情報とみなして利用	【PRTR】該当する用途等に係る推計が 行われていけば推計 【モニタリング】メッシュごとの推計値と 対応させて利用
	水系 非点源 シナリオ	【化審法】該当する用途があった場合に非点源の寄与分を推計 【PRTR】該当する用途等に係る推計が 行われていけば推計	【モニタリング】一般環境のモニタリン グ情報とみなして利用	【PRTR】該当する用途等に係る推計が 行われていけば推計 【モニタリング】メッシュごとの推計値と 対応させて利用
	船底・ 漁網防 汚剤 シナリオ	【化審法】該当する用途があった場合に推計 【PRTR】該当する用途等に係る推計が 行われていけば推計	【モニタリング】シナリオに対応するモニタリング情報が得られれば利用	【PRTR】該当する用途等に係る推計が 行われていけば推計

9
10
11 まず5-1で環境モニタリング情報を整理し環境媒体中の検出状況を示す。次に5-2以降
12 ではイソプロペニルベンゼンに対して環境への放出量を抑制するための指導・助言の必要性、
13 有害性調査指示の必要性の判断の軸となる暴露評価及びリスク推計の結果を暴露シナリオご
14 とに示す。

15 暴露評価及びリスク推計では生態への影響（水生生物及び底生生物）を対象とする。

16 **5-1 環境媒体中の検出状況**

17 **5-1-1 水質モニタリングデータ**

18 イソプロペニルベンゼンの水質モニタリングの直近年度及び過去約10年分のモニタリン
19 グにおける最大濃度を表 5-2 に示す。なお、不検出の場合には、最新年度の検出下限値を最
20 大濃度相当値として不等号つきで示した。また、年度別のモニタリング結果を表 5-3 に示す。

21 なお、表中の「エコ調査」は環境省の化学物質環境実態調査—化学物質と環境におけるモ
22 ニタリング調査を表す。

23

表 5-2 近年の水質モニタリングにおける最大濃度

期間	モニタリング事業名	最大濃度 (mg/L)
直近年度 (平成 19~23 年度)	—	—
約 10 年分 (平成 14~23 年度)	エコ調査(平成 17 年度)	<9.0x10 ⁻⁶

表 5-3 近年の水質モニタリング結果(平成 14~23 年度)

年度	モニタリング事業名	検出濃度範囲	検出下限値 (mg/L)	検出地点数
平成 17 年度	エコ調査	ND	9.0x10 ⁻⁶	0/4

5-1-2 底質モニタリングデータ

イソプロペニルベンゼンの底質モニタリングの直近年度及び過去約 10 年分のモニタリングにおける最大濃度を表 5-4 に示す。なお、不検出の場合には、最も直近年度における測定での検出下限値を最大濃度相当値として不等号つきで示した。また、年度別のモニタリング結果を表 5-5 に示す。

表 5-4 近年の底質モニタリングにおける最大濃度

期間	モニタリング事業名	最大濃度 (mg/kg-dry)
直近年度 (平成 19~23 年度)	—	—
約 10 年分 (平成 14~23 年度)	エコ調査(平成 18 年度)	<0.0007

表 5-5 近年の底質モニタリング結果(平成 14~23 年度)

年度	モニタリング事業名	検出濃度範囲	検出下限値 (mg/kg-dry)	検出地点数
平成 18 年度	エコ調査	ND	0.0007	0/5

5-2 排出源ごとの暴露シナリオによる暴露評価とリスク推計

排出源ごとの暴露シナリオとは、サプライチェーン上~中流の固定排出源（製造または調合または工業的使用段階の排出源）に着目し、それらの排出源の周辺に居住する一般住民又は生育・生息する生活環境動植物が、排出源から排出される化学物質に、環境媒体を通じて暴露されるというシナリオである。

生態毒性影響に対するリスク推計は、評価対象生物ごとの PNEC と、暴露評価の結果である環境中濃度(PEC)(以下、「PEC」という。)とを比較することにより行う。PEC が PNEC 以上となる排出源は「リスク懸念」と判別する。リスク推計の結果は、リスク懸念となった排出源の箇所数の地理的分布で表す。

イソプロペニルベンゼンは化審法届出情報だけでなく PRTR 情報も利用できるため、5-2-1 では化審法届出情報に基づく評価結果を、5-2-2 では PRTR 情報に基づく評価結果をそれぞれ示す。

この 5-2 では化審法届出情報と PRTR 情報は平成 23 年度実績のデータを用いている。

1
2
3
4
5
6
7
8
9

5-2-1 化審法届出情報に基づく評価
(1) 暴露評価

① 暴露シナリオ

イソプロペニルベンゼンについては生活環境動植物として水生生物及び底生生物に対するリスク評価を行う。そのための暴露評価として、評価Ⅰでは水生生物のみを対象としたが、評価Ⅱでは水生生物と底生生物の両方を評価対象とする。すなわち PEC として水中濃度（排出先は河川と仮定するので河川中濃度）と底質中濃度を推計する。（図 5-1 参照）

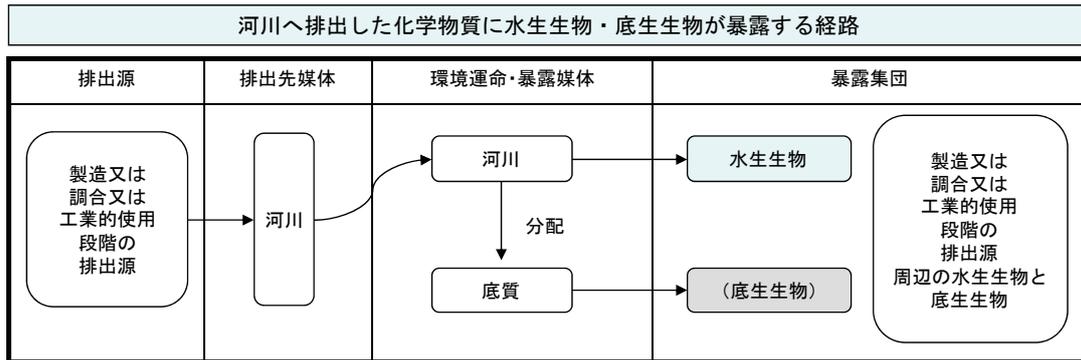


図 5-1 排出源ごとの暴露シナリオ(logPow が 3 以上の物質の場合は底生生物も対象)

10
11
12
13
14
15
16
17
18
19

② 排出量推計結果

平成 23 年度実績の化審法届出情報に基づき、都道府県別・詳細用途別出荷量から 41 の仮想的な排出源を設定した（3 章参照）。各仮想的排出源からの排出量は、それぞれの製造量又は出荷量に設定した排出係数（3 章参照）を乗じて算出した。

水域への排出量の多い上位 10 箇所について整理し、表 5-6 に示す。

表 5-6 仮想的排出源ごとの排出量推計結果

No.	都道府県	用途分類	詳細用途分類	用途コード	詳細用途コード	ライフサイクルステージ	製造・出荷数量[トン]	大気排出係数	水域排出係数	大気排出量[トン]	水域排出量[トン]
1	A県	合成繊維、繊維処理剤[不織布処理を含む]	均染剤、浸透剤、促染剤(染色助剤)、媒染剤、捺染用糊剤	25	o	工業的使用段階	24	0.005	0.05	-	1.2
2	B県	中間物	合成原料、重合原料、前駆重合体	01	a	工業的使用段階	9912	0.0005	0.00005	-	0.5
3	C県	中間物	合成原料、重合原料、前駆重合体	01	a	工業的使用段階	4423	0.0005	0.00005	-	0.2
4	D県	合成繊維、繊維処理剤[不織布処理を含む]	抗菌剤、変色防止剤、紫外線吸収剤	25	j	工業的使用段階	15	0.03	0.01	-	0.1
5	E県	中間物	合成原料、重合原料、前駆重合体	01	a	工業的使用段階	1914	0.0005	0.00005	-	0.1
6	A県	中間物	合成原料、重合原料、前駆重合体	01	a	工業的使用段階	1525	0.0005	0.00005	-	0.08
7	F県	中間物	合成原料、重合原料、前駆重合体	01	a	工業的使用段階	1026	0.0005	0.00005	-	0.05
8	G県	中間物	合成原料、重合原料、前駆重合体	01	a	工業的使用段階	1004	0.0005	0.00005	-	0.05
9	H県	中間物	合成原料、重合原料、前駆重合体	01	a	工業的使用段階	895	0.0005	0.00005	-	0.04
10	I県	中間物	合成原料、重合原料、前駆重合体	01	a	工業的使用段階	338	0.0005	0.00005	-	0.02

1

2

注) 化審法の届出情報に基づいた排出量推計の方法は技術ガイダンスIV章参照

3

4

③ 環境媒体中濃度の推計結果

5

暴露シナリオ(図 5-1)に基づき、仮想的排出源ごとの排出量と2章で示したイソプロペニルベンゼンの性状より、仮想的排出源周辺における環境媒体中濃度の推計結果を表 5-7に示す。

6

7

8

9

表 5-7 仮想的排出源周辺の環境媒体中濃度推計結果

No.	環境媒体中濃度	
	水域排出分	
	河川水中濃度[mg/L]	底質中濃度[mg/kg-dry]
1	2.81×10^{-3}	3.04×10^{-1}
2	1.16×10^{-3}	1.26×10^{-1}
3	5.18×10^{-4}	5.61×10^{-2}
4	3.51×10^{-4}	3.80×10^{-2}
5	2.24×10^{-4}	2.43×10^{-2}
6	1.79×10^{-4}	1.93×10^{-2}
7	1.20×10^{-4}	1.30×10^{-2}
8	1.18×10^{-4}	1.27×10^{-2}
9	1.05×10^{-4}	1.13×10^{-2}
10	3.96×10^{-5}	4.29×10^{-3}

10

11

注1) No に示す番号は、表 5-6 における仮想的排出源と対応している。

12

注2) 環境媒体中濃度の推計方法は技術ガイダンスV章参照

13

14

(2) リスク推計結果

15

リスク推計は、4章で導出した PNECwater 0.0060 mg/L、PNECsed 0.65 mg/kg-dry と、化審法届出情報に基づき用途ごとの仮想的な排出源の推計排出量から推計された河川水中濃度(PECwater)及び底質中濃度(PECsed)とを比較することにより行う。PEC/PNECが1以上となった仮想的な排出源は「リスク懸念」と判別する。表 5-8 にリスク推計結果を示す。

16

17

18

1
2

表 5-8 化審法届出情報に基づく水生生物及び底生生物におけるリスク推計結果(PEG/PNEC)

No.	都道府県	用途分類等	化審法ライフステージ	水域への 排出量 [トン/年]	河川水中濃度 (PECwater) [mg/L]	底質中濃度 (PECsed) [mg/kg-dry]	水生生物_有 害性評価値 (PNECwater) [mg/L]	水生生物_ PEG/PNEC	底生生物_有 害性評価値 (PNECsed) [mg/kg-dry]	底生生物_ PEG/PNEC
1	A県	合成繊維、 繊維処理剤 [不織布処理 を含む]	工業的使用	1.2	2.81×10^{-3}	3.04×10^{-1}	0.006	0.47	0.65	0.47
2	B県	中間物	工業的使用	0.50	1.16×10^{-3}	1.26×10^{-1}	0.006	0.19	0.65	0.19
3	C県	中間物	工業的使用	0.22	5.18×10^{-4}	5.61×10^{-2}	0.006	0.086	0.65	0.086
4	D県	合成繊維、 繊維処理剤 [不織布処理 を含む]	工業的使用	0.15	3.51×10^{-4}	3.80×10^{-2}	0.006	0.058	0.65	0.058
5	E県	中間物	工業的使用	0.10	2.24×10^{-4}	2.43×10^{-2}	0.006	0.037	0.65	0.037
6	A県	中間物	工業的使用	0.076	1.79×10^{-4}	1.93×10^{-2}	0.006	0.030	0.65	0.030
7	F県	中間物	工業的使用	0.051	1.20×10^{-4}	1.30×10^{-2}	0.006	0.020	0.65	0.020
8	G県	中間物	工業的使用	0.050	1.18×10^{-4}	1.27×10^{-2}	0.006	0.020	0.65	0.020
9	H県	中間物	工業的使用	0.045	1.05×10^{-4}	1.13×10^{-2}	0.006	0.017	0.65	0.017
10	I県	中間物	工業的使用	0.017	3.96×10^{-5}	4.29×10^{-3}	0.006	0.0066	0.65	0.0066

3
4
5
6
7
8
9
10
11
12

41 箇所の仮想的な排出源のうち、表 5-8 に示した媒体中濃度（河川水中濃度及び底質中濃度）上位 10 箇所について、河川水中濃度（PECwater）の高い順に図 5-2 に、また、底質中濃度（PECsed）の高い順に図 5-3 に示した。また、図 5-2 及び図 5-3 には、仮想的排出源ごとの排出量も併せて示した。横軸に化審法の届出情報に基づく排出源（横軸の番号は用途分類番号、「工」は工業的使用段階のライフサイクルステージを示す。）、縦軸には排出源ごとの媒体中濃度(河川水中濃度及び底質中濃度)を示した。

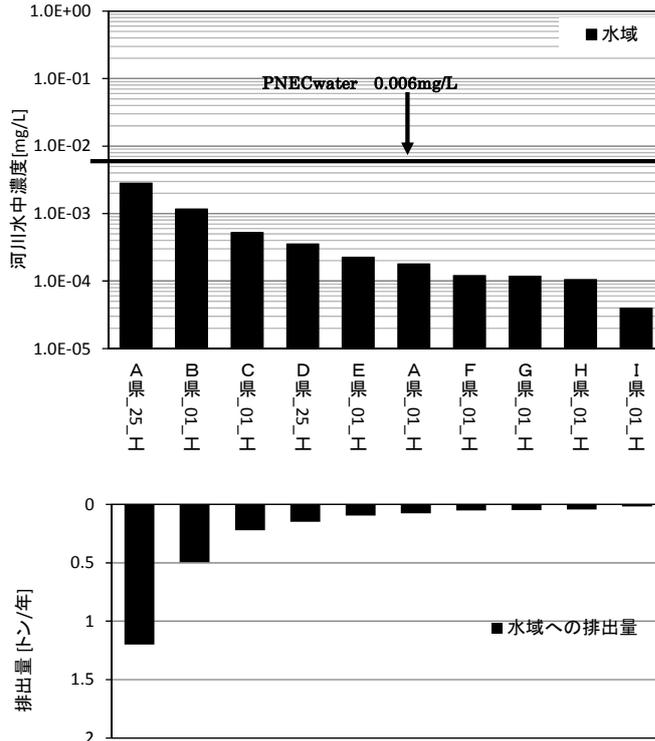


図 5-2 化審法届出情報に基づく仮想的な排出源(水域)の推計排出量に対する河川水中濃度

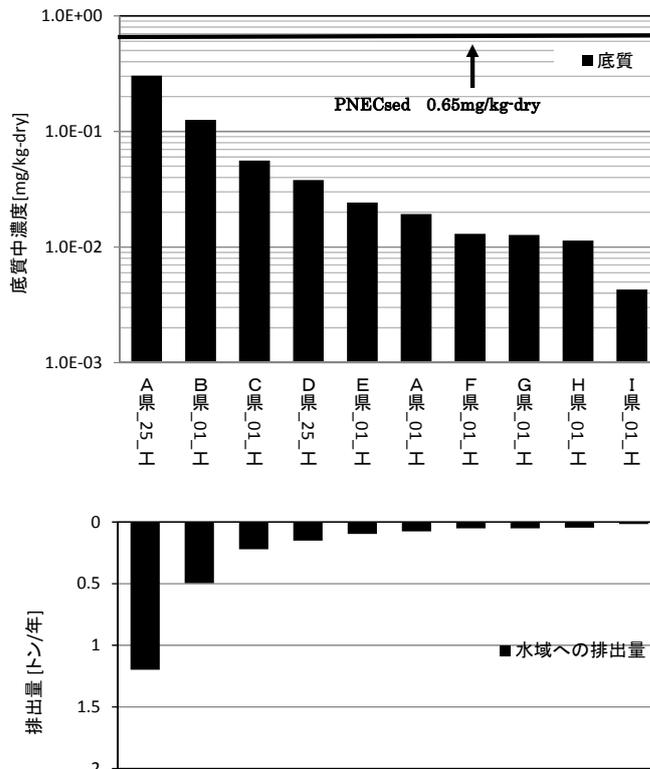


図 5-3 化審法届出情報に基づく仮想的な排出源(底質)の推計排出量に対する底質中濃度

続いて、化審法届出情報に基づく水生生物及び底生生物に係るリスク懸念箇所数を表 5-9 に示した。

表 5-9 化審法届出情報に基づく生態に係るリスク推計結果

	リスク懸念箇所数	排出源の数
水生生物に対するリスク推計結果	0	41
底生生物に対するリスク推計結果	0	41

リスク懸念となる仮想的排出源の数は、水生生物、底生生物ともに0箇所であった。

5-2-2 PRTR 情報に基づく評価

(1) 暴露評価

① 暴露シナリオ

暴露シナリオは化審法届出情報に基づく評価と同じである(図 5-1 参照)。ただし、PRTR 情報に基づく暴露評価においては、公共用水域への排出先が河川か海域かの判断が可能のため、排出先が海域である場合はそれらを考慮して水域濃度を推算した。

PRTR 情報では、届出事業所ごとの下水道への移動量と移動先の下水道終末処理施設の名称が得られるため、移動先の下水道終末処理施設を排出源として扱った。イソプロペニルベンゼンは難分解性であるため(1章参照)、下水道終末処理施設での除去率は0%として排出量を推計した。

② 排出量の情報

平成23年度実績のPRTR届出60事業所及び移動先の下水道終末処理施設4箇所のうち、公共用水域への排出量の多い上位10箇所について、表 5-10 にその排出量を示す。上位8箇所以外の事業所においては、水域への排出量は0トンであった。

表 5-10 PRTR 届出事業所ごとの排出量

No.	都道府県	大気排出量 [トン]	水域排出量 [トン]	総排出量 [トン]	業種名等	水域名称
1	J県	0	0.011	0.011	下水道終末処理施設	A川
2	K県	0	0.001	0.001	下水道終末処理施設	B川
3	L県	0	0.0022	0.0022	下水道終末処理施設	C海域
4	K県	0.77	0.002	0.772	化学工業	D海域
5	H県	0.0002	0.0001	0.0003	化学工業	E川
6	F県	1.8	0.0002	1.8002	化学工業	F海域
7	M県	0.0006	0.0002	0.0008	化学工業	G海域
8	D県	0	0.0001	0.0001	下水道終末処理施設	H海域
9	C県	19	0	19	化学工業	
10	L県	1.2	0	1.2	化学工業	

③ 環境媒体中濃度の推計結果

次に、化審法届出情報を用いた暴露評価と同様に、排出源ごとの排出量と2章で示したイソプロペニルベンゼンの性状より、排出源周辺における環境媒体中濃度の推計結果を表 5-11 に示す(No に示す番号は、表 5-10 における排出源と対応している)。

1

表 5-11 排出源周辺の環境媒体中濃度推計結果

No.	環境媒体中濃度	
	水域排出分	
	水中 [mg/L]	底質 [mg/kg-dry]
1	1.38×10^{-4}	1.50×10^{-2}
2	1.26×10^{-5}	1.36×10^{-3}
3	2.76×10^{-6}	2.99×10^{-4}
4	2.51×10^{-6}	2.72×10^{-4}
5	1.26×10^{-6}	1.36×10^{-4}
6	2.51×10^{-7}	2.72×10^{-5}
7	2.51×10^{-7}	2.72×10^{-5}
8	1.26×10^{-7}	1.36×10^{-5}
9	0	0
10	0	0

2

3

4 (2) リスク推計結果

5 リスク推計は、4章で導出した PNECwater 0.0060 mg/L、PNECsed 0.65 mg/kg-dry と、
6 PRTR 情報に基づく、届出事業所及び移動先の下水道終末処理施設ごとの公共用水域への排
7 出量から推計された水中濃度(PECwater)及び底質中濃度 (PECsed) とを比較することによ
8 り行う。PEC/PNEC が 1 以上となった排出源は「リスク懸念」と判別する。表 5-12 にリ
9 スク推計結果を示す。

10

11

表 5-12 PRTR 情報に基づく水生生物及び底生生物におけるリスク推計結果(PEC/PNEC)

No.	都道府県	業種名等	水域排出量 [トン]	水中濃度 (PECwater) [mg/L]	底質中濃度 (PECsed) [mg/kg-dry]	水生生物_有 害性評価値 (PNECwater) [mg/L]	水生生物_ PEC/PNEC	底生生物_有 害性評価値 (PNECsed) [mg/kg-dry]	底生生物_ PEC/PNEC
1	J県	下水道終末処理施設	0.011	1.38×10^{-4}	1.50×10^{-2}	0.006	0.023	0.65	0.023
2	K県	下水道終末処理施設	0.001	1.26×10^{-5}	1.36×10^{-3}	0.006	0.0021	0.65	0.0021
3	L県	下水道終末処理施設	0.0022	2.76×10^{-6}	2.99×10^{-4}	0.006	0.00046	0.65	0.00046
4	K県	化学工業	0.002	2.51×10^{-6}	2.72×10^{-4}	0.006	0.00042	0.65	0.00042
5	H県	化学工業	0.0001	1.26×10^{-6}	1.36×10^{-4}	0.006	0.00021	0.65	0.00021
6	F県	化学工業	0.0002	2.51×10^{-7}	2.72×10^{-5}	0.006	0.000042	0.65	0.000042
7	M県	化学工業	0.0002	2.51×10^{-7}	2.72×10^{-5}	0.006	0.000042	0.65	0.000042
8	D県	下水道終末処理施設	0.0001	1.26×10^{-7}	1.36×10^{-5}	0.006	0.000021	0.65	0.000021
9	C県	化学工業	0	0	0	0.006	0	0.65	0
10	L県	化学工業	0	0	0	0.006	0	0.65	0

12

13

14 また、図 5-4 及び図 5-5 に、表 5-12 に示した排出源ごとの排出量と環境媒体中濃度を
15 棒グラフで示す。

16

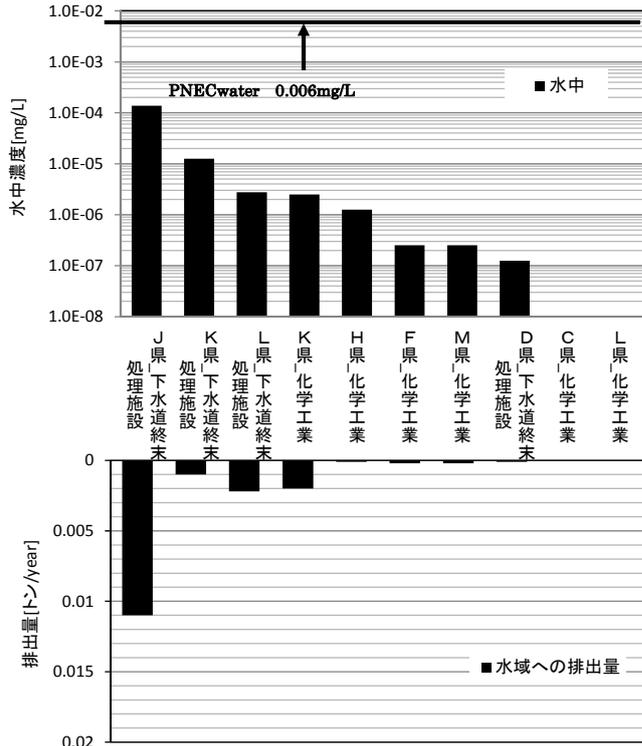


図 5-4 PRTR 届出事業所毎の排出量に対する水中濃度

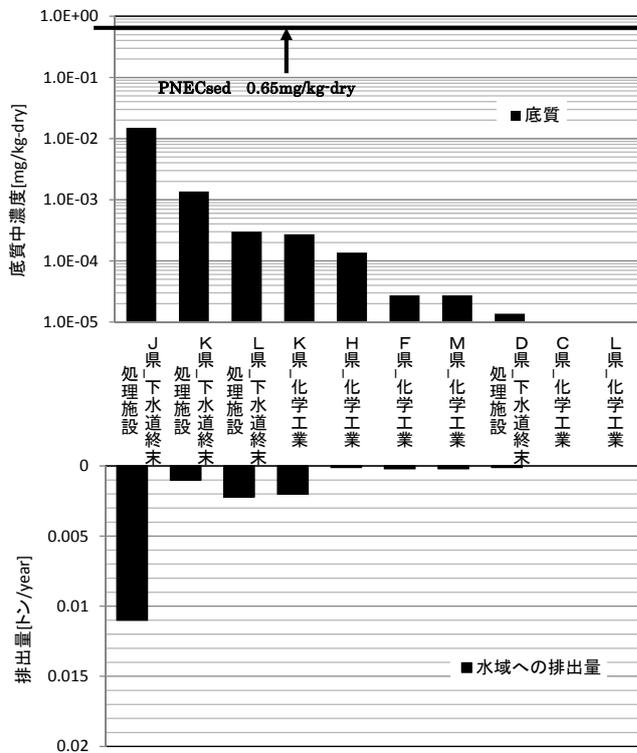


図 5-5 PRTR 届出事業所毎の排出量に対する底質中濃度

1
2
3

4
5
6
7
8
9

1 続いて、水生生物及び底生生物に係るリスク懸念箇所数を表 5-13 に示した。

2
3 **表 5-13 PRTR 情報に基づく生態に係るリスク推計結果**

	リスク懸念箇所数	排出源の数
水生生物に対するリスク推計結果	0	64
底生生物に対するリスク推計結果	0	64

4
5 PRTR 届出 60 事業所及び移動先の下水道終末処理施設 4 箇所全ての排出先の公共用水域
6 でリスク懸念なしであった。

7 5-3 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおける暴露評価とリスク推計

8 本シナリオでは、5-2 の排出源ごとの暴露シナリオで対象としたサプライチェーン上～中
9 流の固定排出源（製造または調合または工業的使用段階の排出源）の排出量に加え、家庭用・
10 業務用の使用段階、長期使用製品の使用段階といった面的な排出量も加味し、多媒体モデル
11 を用いて、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計を行う（5-3-1）。

12 PRTR 情報が得られる場合には、面的な排出源を含めた全国の排出源からの排出量を基に、
13 地図上の区画（メッシュ）ごとに環境中濃度を推計するモデルを用いて、環境中濃度等の空
14 間的分布を全国レベルで推計する（5-3-2）。

15 5-3-1 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計（化審法届出情報と PRTR 情報の利用）

16 本シナリオでは、5-2 の排出源ごとの暴露シナリオでは考慮されなかった排出源からの排
17 出量も加味して、時間的に長期的スケールにおける化学物質の広域環境中の動態の予測を行
18 う。具体的には、日本版多媒体モデル MNSEM3-NITE を用いて、日本全域において、対象
19 物質が長期的には環境媒体のいずれに分配する傾向があるかを推計する。分配は、モデルに
20 入力する排出量の排出先媒体比率に左右される。そこで、排出先媒体比率の結果への影響も
21 考察対象とする。

22 推計手法については技術ガイダンスⅦ章に準じている。

23 (1) 推計条件

24 推計条件

25 多媒体モデル MNSEM3-NITE に入力する排出量は、化審法届出情報に基づいて推計した
26 全国排出量及び PRTR 情報に基づく全国排出量を用いた。

27 平成 23 年度の化審法届出情報による全国排出量の内訳を表 5-14 に示す。

28
29
30
31 **表 5-14 化審法届出情報(平成 23 年度)による全国排出量の内訳**

ライフサイクルステージ	大気排出量 [トン]	水域排出量 [トン]	備考
製造段階	1.92	0.0384	
調合・工業的使用段階	18.5	2.47	該当する用途は ・中間物 ・化学プロセス調節剤 ・塗料、コーティング剤[プライマーを含む] ・印刷インキ、複写用薬剤(トナー等)[筆記用

			具、レジストインキ用を含む] ・合成繊維、繊維処理剤[不織布処理を含む] ・プラスチック、プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤
家庭等使用段階	0	0	該当用途なし
長期使用製品の 使用段階	0.179	10.0	該当する用途は ・合成繊維、繊維処理剤[不織布処理を含む] ・プラスチック、プラスチック添加剤、プラスチック加工助剤
廃棄段階	-	-	考慮しない

表中の数値は、各区分の推計排出量（トン／年）である。全ての段階のライフサイクルステージから（以下「広域用」という）の全国総排出量と製造段階、調合段階及び工業的使用段階から（以下「局所用」という）の全国総排出量のそれぞれを MNSEM3-NITE に入力した。広域用の全国総排出量には、5-2 の排出源ごとの暴露シナリオにおける暴露評価で考慮した事業所等の点排出源からの排出に加え、家庭や長期使用製品の使用段階といった非点源からの排出量を考慮した。局所用の全国総排出量は、5-2 の排出源ごとの暴露シナリオにおける暴露評価で考慮した事業所等の点排出源からの排出量だけを考慮した。

次に PRTR 情報による全国排出量の内訳を表 5-15 に示す。これは 3 章の図 3-4 から平成 23 年度分を再掲したものである。届出排出量と届出外排出量の全国合計値となっている。

表 5-15 PRTR 情報による全国排出量の内訳(平成 23 年度)

届出または 推計項目	届出 大気	届出 水域	届出 土壌	届出 埋立	推計 裾切	推計 非対象 業種	推計 家庭	推計 移動体	合計
全国排出量 (トン)	25.8	0.003	0	0	0.005	-	-	-	25.8

推計に用いたイソプロペニルベンゼンの物理化学的性状は 2 章の表 2-1 に示しており、環境中半減期は 2 章の表 2-2 に示した総括分解半減期である（後述の 5-5 の表 5-23 にも再掲している）。

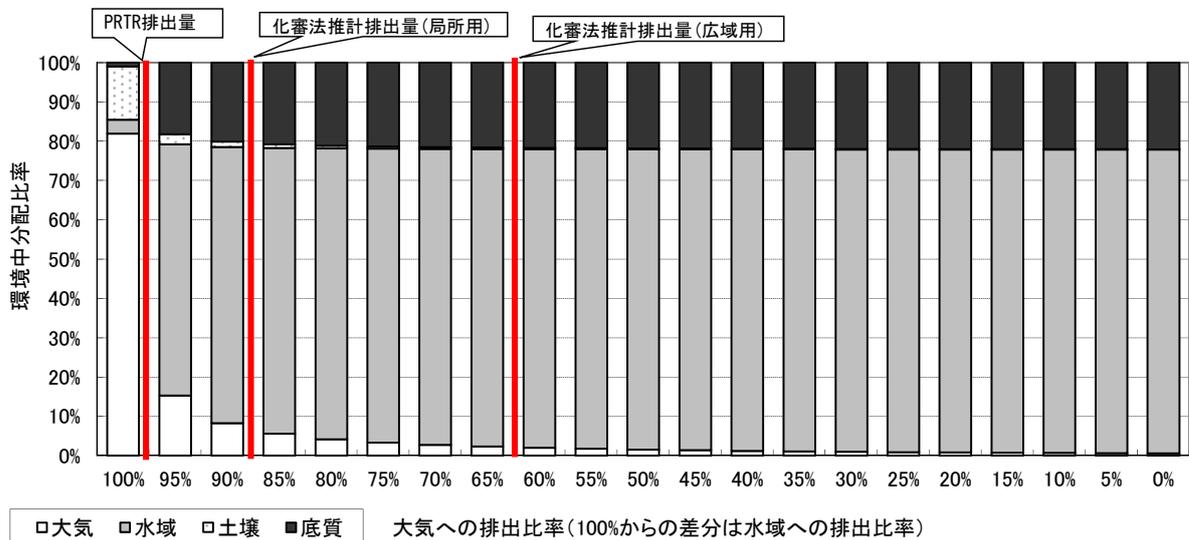
(2) 推計結果

全国排出量とその排出先媒体比率を用いて、イソプロペニルベンゼンが大気、水域又は土壌のいずれかに定常的に排出されて定常状態に到達した状態での環境中での分配比率（質量比）を多媒体モデル MNSEM3-NITE によって予測した。

分配比率の推計は、排出量の絶対値に依存せず、化学物質の物理化学的性状、環境中での分解性、生物濃縮性及び大気、水域、土壌の各媒体への排出先媒体比率が結果を左右する。しかし、化審法届出情報を用いた場合、排出先媒体比率自体が 3 章に示した排出係数に基づいた推計値であり、実態と乖離している可能性がある。

そこで、5%刻みで大気と水域への排出比率を変化させたときの環境分配比率がどのように変化するかを調べた。その結果を図 5-6 に示す。図 5-6 の横軸は大気への排出比率であり、左から順に大気 100%（水域 0%）、大気 95%（水域 5%）、・・・、大気 5%（水域 95%）、

1 大気 0%（水域 100%）の場合である。化審法届出情報に基づく推計排出量の排出先比率、
 2 及び PRTR 情報に基づく排出先比率に該当する位置も示した。これより大気排出が 100%に
 3 近い場合を除けば、排出先媒体比率に関らず主に水域及び底質に分配されることがわかる。
 4 また、各種排出量に基づく環境中分配比率等の詳細は表 5-16 に示した。PRTR 排出量に基づくと、
 5 大気に残留する割合が多いという結果になった。
 6



7
8 **図 5-6 排出先比率の変化による環境中分配比率の変化**

9
10
11 **表 5-16 環境中の排出先比率と環境中分配比率**

	排出先比率	化審法推計排出量		PRTR 届出+届出外排出量
		推計排出量 (広域用)	推計排出量 (局所用)	
排出先比率	大気	62%	89%	>99%
	水域	38%	11%	<1%
	土壌	0%	0%	0%
環境中分配比率	大気	2%	8%	81%
	水域	76%	71%	5%
	土壌	<1%	1%	13%
	底質	22%	20%	1%

12
13
14 **5-3-2 環境中濃度等の空間的分布の推計（PRTR 情報の利用）**

15 PRTR における届出及び届出外推計の排出量データの分布情報をもとに、河川や大気での
 16 挙動も考慮した多媒体モデルを用いて、本物質の環境中での地理的な分布を予測した。具体的には、GIS 多媒体モデル G-CIEMS を用いて、日本全域において、対象物質の大気中濃度を
 17 5km×5km メッシュ、水域、土壌、底質中の濃度を流域別に推計した。
 18
 19

1 (1) 推計条件

2 イソプロペニルベンゼンの G-CIEMS に基づく濃度推計の条件について以下に示す。

3

4 推計条件

5 G-CIEMS に入力する排出量は、PRTR の届出排出量と届出外推計排出量を 3 次メッシュ
 6 上に割り当てたデータ(「平成 24 年度地域における化学物質の環境リスク低減支援業務報告
 7 書」(環境省環境安全課)より引用)をもとに、G-CIEMS 用に 5km×5km メッシュの大気
 8 排出量及び流域別の水域、土壌排出量データに配分したものをを用いた。なお、排出先が海域
 9 として届け出られているデータについても、当該排出先の所在する流域に排出されるもの
 10 として推計している。また、計算に必要なデータについては、2 章の物理化学的性状等又は技
 11 術ガイダンスに示すデフォルト値を用いており、一部の物理化学的性状等については
 12 G-CIEMS 入力データの単位や基準とする温度(25℃)にあわせて換算し、表 5-17 に示す値
 13 をを用いた。

14

15

表 5-17 G-CIEMS の計算に必要なデータのまとめ

G-CIEMS の入力パラメータ	項目	単位	採用値	詳細
HnrysCnstnt	ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	5.00x10 ²	25℃温度補正值
Slblty	水溶解度	mol/m ³	0.846	25℃温度補正值
VaporPrssr	蒸気圧	Pa	4.23x10 ²	25℃での値
Kow	オクタノールと水との間の分配係数	-	3.02x10 ³	10 ^{logKow}
DgrdtnRate_Air_gas	大気中分解速度定数(ガス)	s ⁻¹	1.24x10 ⁻⁴	大気における機序別分解半減期の総括値 0.0648 日の換算値
DgrdtnRate_Air_prtcl	大気中分解速度定数(粒子)	s ⁻¹	1.24x10 ⁻⁴	大気における機序別分解半減期の総括値 0.0648 日の換算値
DgrdtnRate_Water_sol	水中分解速度定数(溶液)	s ⁻¹	8.02x10 ⁻¹⁰	水中における機序別分解半減期の総括値 10,000 日の換算値
DgrdtnRate_Water_SS	水中分解速度定数(懸濁粒子)	s ⁻¹	8.02x10 ⁻¹⁰	水中における機序別分解半減期の総括値 10,000 日の換算値
DgrdtnRate_Soil DgrdtnRate_Soil_0~6	土壌中分解速度定数	s ⁻¹	8.02x10 ⁻¹⁰	土壌中における機序別分解半減期の総括値 10,000 日の換算値
DgrdtnRate_Sdmnt	底質中分解速度定数	s ⁻¹	2.01x10 ⁻¹⁰	底質中における機序別分解半減期の総括値 40,000 日の換算値
DgrdtnRate_Canopy	植生中分解速度定数	s ⁻¹	1.24x10 ⁻⁴	大気における機序別分解半減期の総括値 0.0648 日の換算値

16

17

計算に用いた排出量の概要として、全国の合計排出量を表 5-18 に示す。

18

19

表 5-18 PRTR 排出量情報(平成 22 年度)の全国排出量の内訳

PRTR 排出量データ使用年度	平成 22 年度
排出量	○届出排出量 : 26,622kg/年 G-CIEMS 用大気排出量 : 26,598kg/年 G-CIEMS 用水域排出量 : 24kg/年
	○届出外排出量 : 0kg/年 G-CIEMS 用大気排出量 : 推計なし G-CIEMS 用水域排出量 : 推計なし

20

1 (2) 環境中濃度の推計結果

2 G-CIEMS の計算で得られた全河川流域濃度の中から、水域における環境基準点を含む
3 3,705 流域での濃度情報を PEC として流域別に PEC/PNEC 比を算出した。

4
5 環境基準点を含む計算対象流域(3,705 流域)の水質濃度及び底質濃度並びに
6 PECwater/PNECwater 比及び PECsed/PNECsed 比の各パーセンタイル値¹を以下に示す。
7 PECwater/PNECwater 比、PECsed/PNECsed 比はともに全ての流域で 0.1 未満であった。

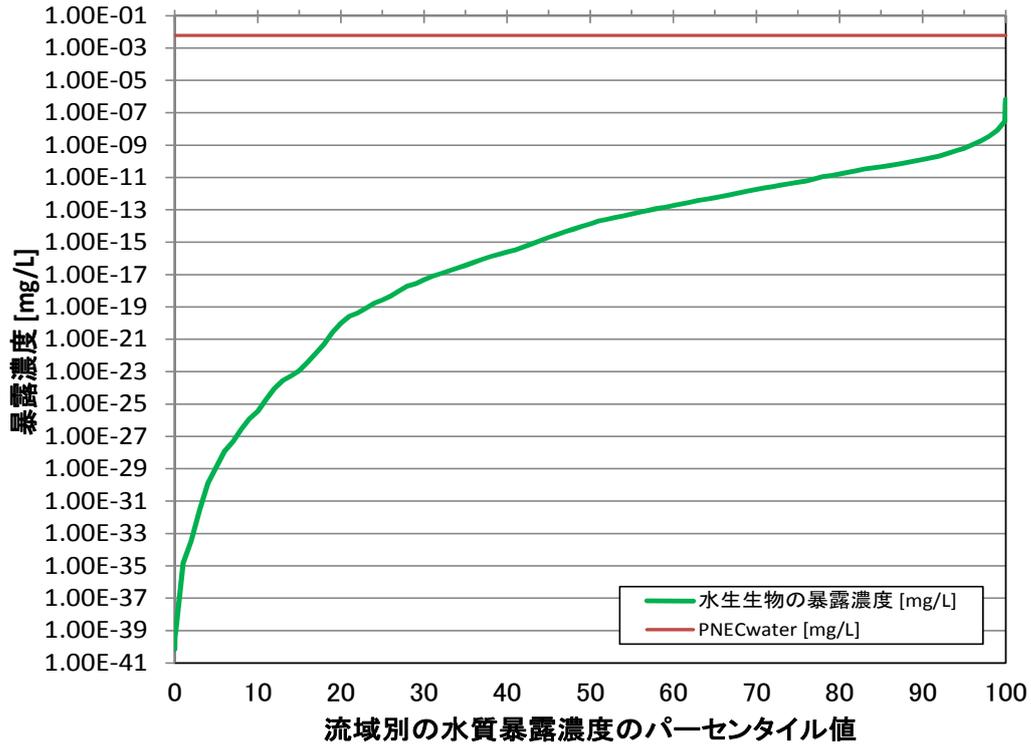
8
9 **表 5-19 G-CIEMS で計算された環境基準点を含む流域の水質濃度及び底質濃度並びに**
10 **PEC/PNEC 比**

パーセン タイル	順位	水生生物			底生生物		
		暴露濃度 [mg/L]	PNECwa ter [mg/L]	PECwater/PNE Cwater 比 (低水流量) [-]	暴露濃度 [mg/kg-dr y]	PNECsed [mg/kg-dry]	PECsed/ PNECsed 比 (低水流量) [-]
0	1	6.9x10 ⁻⁴¹	0.0060	1.2x10 ⁻³⁸	6.4x10 ⁻³⁹	0.65	9.9x10 ⁻³⁹
0.1	5	6.9x10 ⁻⁴⁰	0.0060	1.2x10 ⁻³⁷	6.5x10 ⁻³⁸	0.65	1.0x10 ⁻³⁷
1	38	1.4x10 ⁻³⁵	0.0060	2.4x10 ⁻³³	9.4x10 ⁻³⁴	0.65	1.5x10 ⁻³³
5	186	1.2x10 ⁻²⁹	0.0060	2.0x10 ⁻²⁷	1.0x10 ⁻²⁷	0.65	1.6x10 ⁻²⁷
10	371	3.6x10 ⁻²⁶	0.0060	5.9x10 ⁻²⁴	3.1x10 ⁻²⁴	0.65	4.8x10 ⁻²⁴
25	927	2.7x10 ⁻¹⁹	0.0060	4.4x10 ⁻¹⁷	2.1x10 ⁻¹⁷	0.65	3.3x10 ⁻¹⁷
50	1853	1.3x10 ⁻¹⁴	0.0060	2.2x10 ⁻¹²	1.0x10 ⁻¹²	0.65	1.6x10 ⁻¹²
75	2779	5.0x10 ⁻¹²	0.0060	8.3x10 ⁻¹⁰	3.8x10 ⁻¹⁰	0.65	5.9x10 ⁻¹⁰
90	3335	1.3x10 ⁻¹⁰	0.0060	2.2x10 ⁻⁸	9.7x10 ⁻⁹	0.65	1.5x10 ⁻⁸
95	3520	6.2x10 ⁻¹⁰	0.0060	1.0x10 ⁻⁷	4.5x10 ⁻⁸	0.65	6.9x10 ⁻⁸
99	3668	8.4x10 ⁻⁹	0.0060	1.4x10 ⁻⁶	6.2x10 ⁻⁷	0.65	9.5x10 ⁻⁷
99.9	3701	3.0x10 ⁻⁸	0.0060	5.0x10 ⁻⁶	2.2x10 ⁻⁶	0.65	3.3x10 ⁻⁶
99.92	3702	3.1x10 ⁻⁸	0.0060	5.1x10 ⁻⁶	2.2x10 ⁻⁶	0.65	3.4x10 ⁻⁶
99.95	3703	1.6x10 ⁻⁷	0.0060	2.7x10 ⁻⁵	1.2x10 ⁻⁵	0.65	1.8x10 ⁻⁵
99.97	3704	4.2x10 ⁻⁷	0.0060	6.9x10 ⁻⁵	3.0x10 ⁻⁵	0.65	4.7x10 ⁻⁵
100	3705	6.8x10 ⁻⁷	0.0060	0.00011	4.8x10 ⁻⁵	0.65	7.4x10 ⁻⁵

11

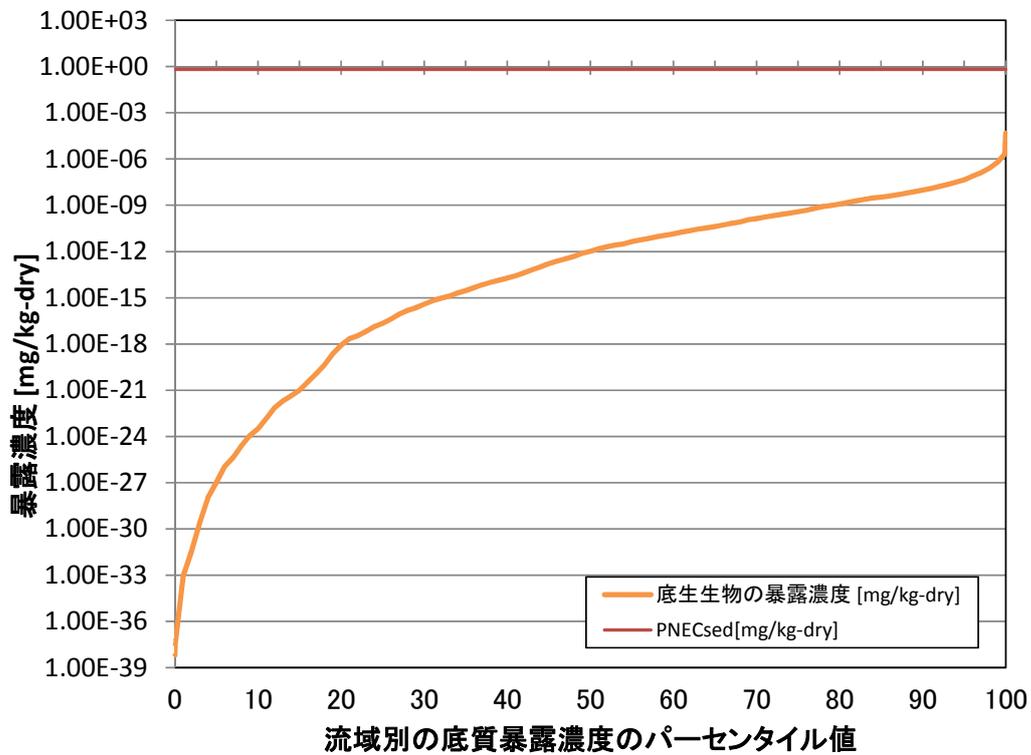
12

¹ ここでのパーセンタイル値、「当該パーセンタイル値に最も近い順位」における値を指す。



1
2

図 5-7 G-CIEMS で計算された環境基準点を含む流域における水質濃度分布



3
4
5
6

図 5-8 G-CIEMS で計算された環境基準点を含む流域における底質濃度分布

1 (3) 環境中分配比率等の推計結果

2 PRTR 情報による環境中の排出先比率とこれに基づき G-CIEMS で計算された環境中分配
3 比率等の詳細を表 5-20 に示す。

4
5

表 5-20 環境中の排出先比率と G-CIEMS で計算された環境中分配比率

		PRTR 届出+届出外 排出量
PRTR 情報によ る排出先比率	大気	>99%
	水域	<1%
	土壌	0%
G-CIEMS で計 算された環境中 分配比率	大気	93%
	水域	<1%
	土壌	7%
	底質	<1%

6
7

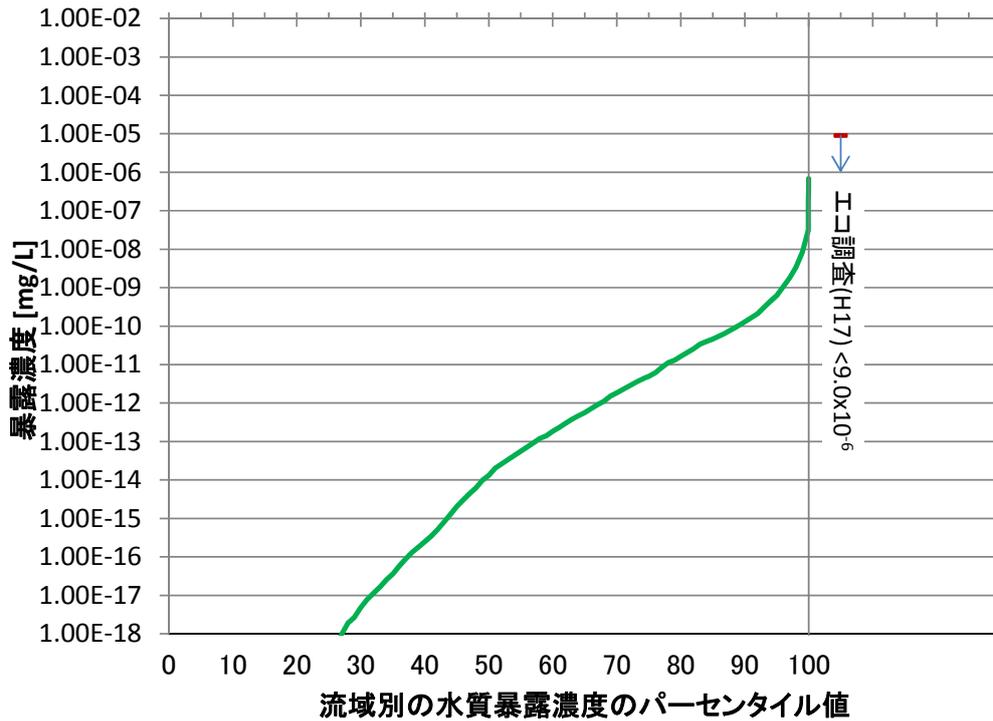
8 (4) G-CIEMS の推計結果とモニタリングデータとの比較解析

9 モニタリング濃度と G-CIEMS の推計濃度との整合性を見るため、水質モニタリングの濃
10 度範囲と、水生生物の暴露濃度として用いる G-CIEMS の水質の推計濃度のパーセンタイル
11 値を示した結果を図 5-9 に、底質モニタリングの濃度範囲と底生生物の暴露濃度として用い
12 る G-CIEMS の底質の推計濃度のパーセンタイル値を示した結果を図 5-10 に示す。

13 なお、これらの図中では各モニタリングデータにおける濃度範囲のバーに濃度範囲の数値
14 ($<9.0 \times 10^{-6}$ 等。)も付記した。モニタリングデータにおいて不検出の結果がある場合には、濃
15 度範囲に不等号付きの検出下限値を用いて示し、濃度範囲のバー表示では検出下限値～最大
16 値を示している。そのため、濃度範囲のバーは、あくまでモニタリングで検出結果がある場
17 合または不検出であるときに考え得る最大の濃度である検出下限値の濃度範囲を表している。

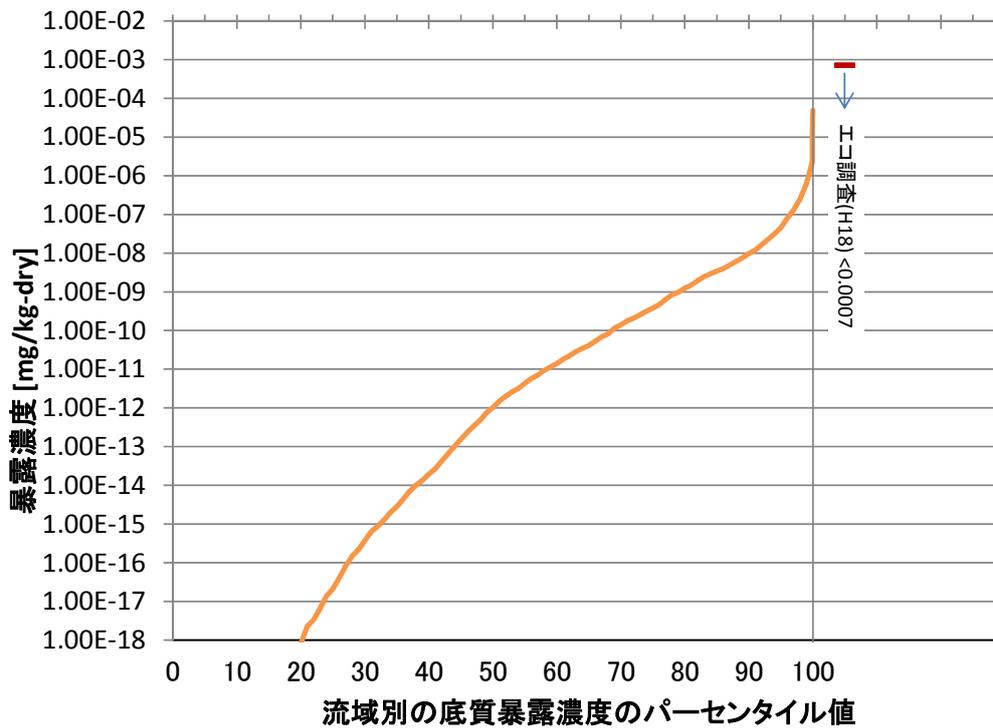
18 これらの図に示す通り、モニタリングデータと G-CIEMS の濃度推計結果の比較において
19 は、水質及び底質モニタリングデータが不検出であるため定量的な比較は十分に行えないが、
20 物質の性状から環境中の残留性は低く、G-CIEMS の推計濃度は、モニタリングデータにお
21 いて不検出であることとの乖離は見られない。

22



1
2

図 5-9 G-CIEMS 推計濃度とモニタリング濃度の範囲の比較(水質)



3
4
5

図 5-10 G-CIEMS 推計濃度とモニタリング濃度の範囲の比較(底質)

6 5-3-3 環境モニタリング情報に基づく評価

7 5-1 の環境モニタリング情報に基づきリスク推計を行った。なお、3章においてイソブ
8 ロペニルベンゼンの製造・輸入数量、PRTR 排出量は横ばいであることから、収集した環境

1 モニタリング情報のすべてについて現状の排出状況下の濃度として代表性があるものとして
2 評価を行った。

3

4 (1) 水生生物

5 直近 5 年における底質の環境モニタリングデータはなかった。直近 10 年における水質モ
6 ニタリングデータを対象としたが、検出実績がなかった。そこで、最も直近の年度での測定
7 において検出下限値未満であったことを考慮して水質濃度 $<9.0 \times 10^{-6} \text{mg/L}$ を水生生物の暴
8 露濃度 PECwater として採用し、PECwater/PNECwater 比を算出してリスク推計を行った。
9 リスク推計の結果、表 5-21 に示すように、PECwater $< 9.0 \times 10^{-6} \text{mg/L}$ 、
10 PNECwater=0.0060mg/L より PECwater/PNECwater 比 <0.0015 であった。この地点を含
11 め、PECwater/PNECwater 比が 1 以上となるリスク懸念の地点となるデータはなかった。

12

13

表 5-21 水生生物のモニタリングデータに基づくリスク推計

PECwater	$<9.0 \times 10^{-6} \text{ mg/L}$ (水質モニタリングデータから設定)
PNECwater	0.0060 mg/L
PECwater/PNECwater 比	<0.0015

14

15 (2) 底生生物

16 直近 5 年における底質の環境モニタリングデータはなかった。直近 10 年における底質モ
17 ニタリングデータを対象としたが、検出実績がなかった。そこで、最も直近の年度での測定
18 において検出下限値未満であったことを考慮して底質濃度 $<0.0007 \text{mg/kg-dry}$ を底生生物の
19 暴露濃度 PECsed として採用し、PECsed/PNECsed 比を算出してリスク推計を行った。リ
20 スク推計の結果、表 5-22 に示すように PECsed $< 0.0007 \text{mg/kg-dry}$ 、
21 PNECsed=0.65mg/kg-dry より PECsed/PNECsed 比 <0.0011 であった。この地点を含め、
22 PECsed/PNECsed 比が 1 以上となるリスク懸念の地点はなかった。

23

24

表 5-22 底生生物のモニタリングデータに基づくリスク推計

PECsed	$<0.0007 \text{ mg/kg-dry}$ (底質モニタリングデータから設定)
PNECsed	0.65 mg/kg-dry
PECsed/PNECsed 比	<0.0011

25 5-4 用途等に応じた暴露シナリオによる暴露評価とリスク推計

26 化審法届出情報では、本シナリオに該当する用途はなかった。

27 5-5 広域的・長期的スケールの数理モデルによる残留性の評価

28 ここでは、5-3-1 と同じ日本版多媒体モデル MNSEM3-NITE を用いて、時間的に長期
29 的なスケールにおける評価対象物質の広域環境中での残留性を評価した。5-5-1 では
30 OECD 等で残留性有機汚染物質 (POPs) の残留性評価の指標として提唱¹されている総括残
31 留性 Pov (overall persistence の略) を求めた。Pov は、多媒体モデルによって求める各媒
32 体の滞留時間を媒体に存在する化学物質質量で重み付け平均した数値で、時間の単位をもち、

¹ OECD (2004) Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environmental Persistence and Long-Range Transport. OECD Series on Testing and Assessment No. 45.

1 数値が大きいほど環境残留性が高いと考えられ、POPsに類似した残留性を有するかの目安
 2 となる。5-5-2では環境媒体別に定常状態に達するまでの時系列変化等を推計した。この
 3 推計結果は、対象物質の排出が始まってからの期間と考え合わせて、現状や将来の環境中の
 4 残留量の増加傾向の有無等を推し量る指標となる。

5 推計手法については技術ガイダンス本編VII章に準じた。

7 **5-5-1 総括残留性**

8 位置付け

9 イソプロペニルベンゼンの環境中での残留性を評価するため、総括残留性の指標 Pov を求
 10 めた。ここでは、残留性有機汚染物質 POPs の残留性評価のために OECD 等において提唱
 11 されている計算式¹を、本評価で用いたモデル MNSEM3-NITE に当てはめて求めた（詳細は
 12 技術ガイダンスVII章参照）。

13 Pov は、POPs と POPs ではない物質（non-POPs）といった比較対象となる複数の
 14 Reference chemical（対照物質）の数値と、対象物質の数値とを相対比較することにより評
 15 価した。ここでは、Reference chemical（対照物質）は、代表例として第一種特定化学物質
 16 であり POPs である PCB(ここでは PCB126 とした)、アルドリン、ディルドリン、non-POPs
 17 として第二種特定化学物質であるトリクロロエチレンと四塩化炭素、良分解性物質であるベ
 18 ンゼン、ビフェニルの合計 7 物質とした。

20 推計条件

21 モデルに入力する排出量は、5-3-1(1)で用いたイソプロペニルベンゼンの数値（化審法
 22 推計排出量及び PRTR 排出量）を Reference chemical も共通で用いた。

23 イソプロペニルベンゼンと Reference chemical の物理化学的性状と環境媒体別半減期を
 24 表 5-23 及び表 5-24 に示した。

26 **表 5-23 イソプロペニルベンゼンと Reference chemical(POPs)の物理化学的性状等のデータ**

項目	単位	イソプロペニルベンゼン	PCB126	アルドリン	ディルドリン	
分子量	—	118.18	326.4	364.9	380.9	
融点	[°C]	-23.2	106	104	176	
蒸気圧 (20°C)	[Pa]	300	3.19×10^{-4}	1.60×10^{-2}	4.13×10^{-4}	
水溶解度 (20°C)	[mg/L]	93.4	2.10×10^{-3}	1.70×10^{-2}	1.70×10^{-1}	
1-オクタノール/水分配係数 (対数値)	—	3.48	7.1	6.5	6.2	
ヘンリー係数	[Pa・m ³ /mol]	380	7.6	4.46	1.01	
有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]	1,047	1.51×10^6	4.90×10^4	5.62×10^4	
生物濃縮係数	[L/kg]	72.2	17800	20000	14500	
半減期	大気	[day]	0.06	120	0.4	2
	水域	[day]	10004	60	332	1080
	土壌	[day]	10010	120	3650	3285
	底質	[day]	40000	540	1620	1620

27 ※これらの出典については、付属資料に示した。

28 ¹ 上記資料の 4.1.1 Persistence.

1

表 5-24 Reference chemical (non-POPs) の物理化学的性状等のデータ

項目	単位	トリクロロエチレン	四塩化炭素	ベンゼン	ビフェニル	
分子量	—	131.19	153.82	78.11	154.2	
融点	[°C]	-84.8	-23	5.5	69	
蒸気圧 (20°C)	[Pa]	7.80×10^3	1.20×10^4	1.01×10^4	1.19	
水溶解度 (20°C)	[mg/L]	9.07×10^2	8.00×10^2	1.48×10^3	7.48	
1-オクタノール/水分配係数 (対数值)	—	2.42	2.83	2.13	3.76	
ヘンリー則定数	[Pa・m ³ /mol]	9.98×10^2	2.80×10^3	5.62×10^2	3.12×10	
有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]	6.8×10	4.9×10	7.90×10	1.86×10^3	
生物濃縮係数	[L/kg]	39	52	4.3	313	
半減期	大気	[day]	42	6660	33	5
	水域	[day]	360	360	160	15
	土壌	[day]	360	407	76	30
	底質	[day]	338	540	338	135

2

※これらの出典については、付属資料に示した。

3

4 推計結果

5

イソプロペニルベンゼンと Reference chemical の Pov の推計結果を表 5-25 に示す。イソプロペニルベンゼンの Pov は化審法届出情報の場合で 1.3 日、PRTR 情報の場合で 0.05 日であった。このことから、イソプロペニルベンゼンの残留性は non-POPs と同程度であり、POPs ほどの残留性はないと判断した。

9

10

表 5-25 イソプロペニルベンゼンと Reference chemical の総括残留性 Pov

物質の属性		物質名	総括残留性 Pov [day]		
			化審法届出情報	PRTR 情報	
評価対象物質	優先評価化学物質	イソプロペニルベンゼン	1.3	0.05	
Reference Chemical	POPs	第一種特定化学物質	PCB126	65.8	5.3
			アルドリノ	43.8	6.0
			ディルドリン	67.6	24.5
	non-POPs	第二種特定化学物質	トリクロロエチレン	1.1	0.08
			四塩化炭素	1.1	0.07
		良分解物質	ベンゼン	0.9	0.08
			ビフェニル	1.4	0.1

11

※ Pov の値は POPs 条約の POPs スクリーニング基準とは必ずしも整合するわけではない。POPs 条約では POPs かどうかの判断は総合的な判断に基づいている。

12

13 5-5-2 定常到達時間の推計

14 位置付け

15

5-5-1 では物質間比較をするために、環境中の残留性を一つの指標として推計した。ここではさらに、残留性を環境媒体別に推計する。環境媒体別にみると、対象物質の流入速度、移流速度、半減期等がそれぞれ異なるため、定常状態に達するまでの時間や排出がなくなっ

17

18

19

20 推計条件

1 イソプロペニルベンゼンの化審法届出情報に基づく推計排出量または PRTR 排出量を用い
2 て定常到達時間を求めた。なお、ここでは定常状態の物質存在量の 99%に達する時間を定常
3 到達時間と定義した。

4 ここでも、モデルに入力する排出量と排出先媒体比率は、5-3-1(1)で用いたものと同様
5 であり、物理化学的性状と環境媒体別半減期は表 5-23 と表 5-24 に示したものである。

6 7 推計結果

8 化審法届出情報に基づく推計排出量を用いた場合は、局所用、広域用のいずれにおいても、
9 排出が始まると大気、水域では 1 ヶ月以内で定常濃度に達する。一方、土壌は定常到達まで
10 に 1 年程度の時間を要し、底質は定常到達までに 7 年程度の時間を要する。

11 PRTR 排出量を用いた場合、排出が始まると大気では短期間で定常濃度に達し、水域でも
12 1 ヶ月以内で定常濃度に達する。一方、土壌は定常到達までに 1 年程度の時間を要し、底質
13 は定常到達までに 7 年程度の時間を要する。

14 推計結果はモデルによる概算であることに注意を要する。

15

1 5-6 暴露評価とリスク推計に関する不確実性解析

2 5-6-1 不確実性解析の概要

3 本章では、5章の暴露評価とリスク推計の結果が「第二種特定化学物質の指定、有害性調
4 査指示等の化審法上の判断の根拠に足る信頼性があるか」という観点から不確実性解析を行
5 う。不確実性解析は図 5-11 のフローに沿い以下の i)～v)の 5つの項目を対象とした。

- 6
- 7 i) 評価対象物質の不確実性
- 8 ii) リスク推計に用いた物理化学的性状等の不確実性
- 9 iii) PRTR 情報等の不確実性
- 10 iv) 排出量推計に係る不確実性
- 11 v) 暴露シナリオに係る不確実性

12

13 i)及びii)では、リスク評価に用いた性状等データの根源的な適切さを問う。これらが不
14 適切で、特に過小評価の可能性がある場合は、本評価のリスク推計結果に意味は見出せず、
15 性状等のデータの取得後に再評価を行う必要がある。

16 iii)～v)については、用いた PRTR 情報、暴露評価において設定した排出シナリオ及び暴
17 露シナリオ¹についてより実態に即した情報に置き換える必要について検討した。

18

19 図 5-11 に示すとおり、i)～v)のいずれかで、情報の精査や更なる情報収集が必要とな
20 れば、情報収集と再評価を順次繰り返す。そのようにして、リスク評価の不確実性が低減さ
21 れた後に得られた評価結果は、化審法上の判断の根拠に供することができるようになる。

22

¹ 本評価の化審法の製造数量等の届出情報を用いた暴露評価はワーストケースを想定しているため、「リスク懸念なし」であればそれ以上の解析は要さないが、「リスク懸念」であれば排出・暴露の実態に関する情報を収集し、デフォルト設定部分を実態が反映されたデータに置き換え、再評価する必要があるため。

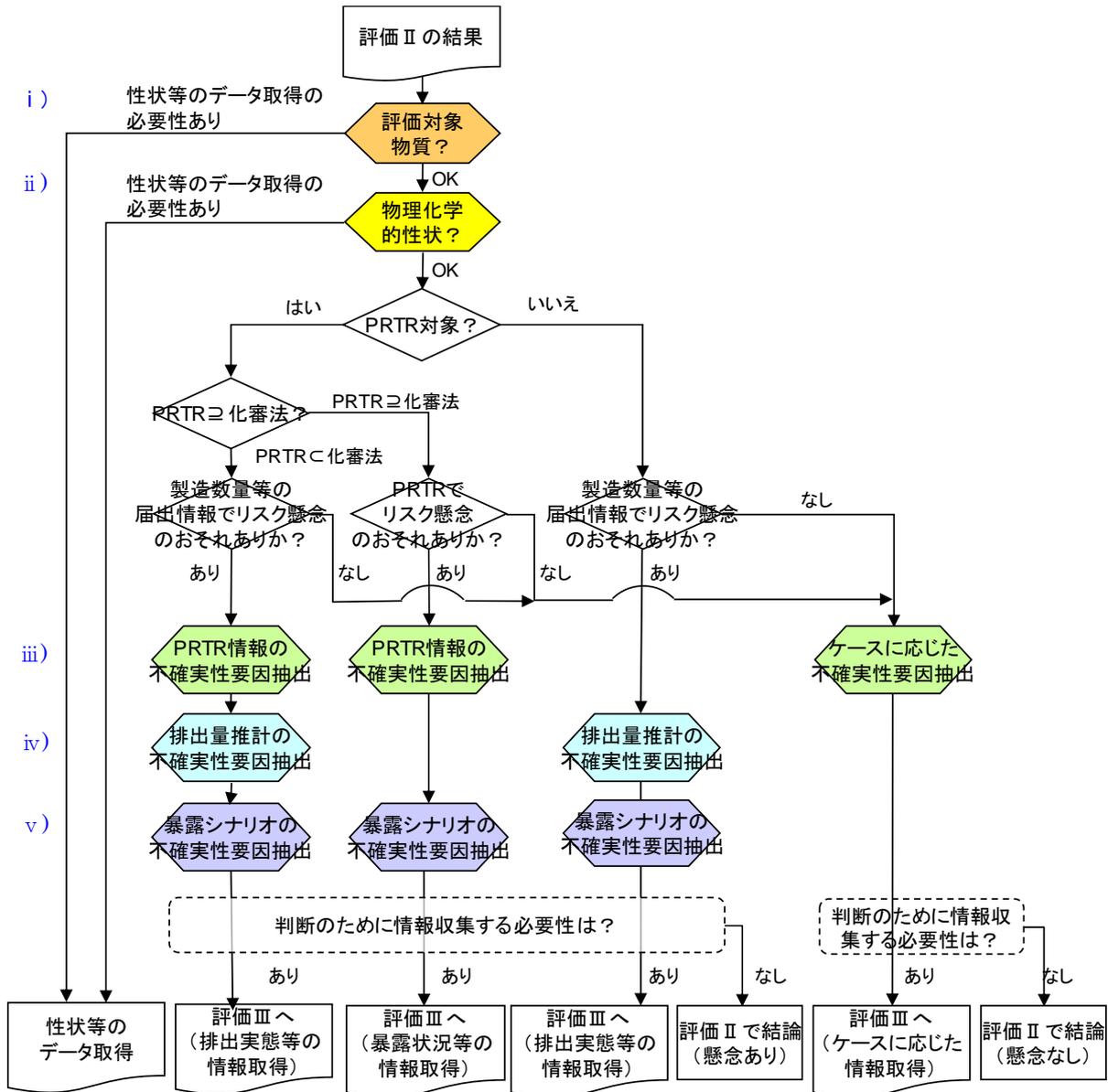


図 5-11 リスク評価における不確実性解析フロー

イソプロピルベンゼンについて、不確実性解析結果の概要を表 5-26 に、詳細については以下順に示す。

表 5-26 イソプロピルベンゼンの不確実性解析結果の概要

項目	不確実性の要因	調査の必要性	再評価に有用な情報	理由
i) 評価対象物質	・ 評価対象物質と性状等試験データ被験物質との不一致等	なし	—	・ 評価対象物質と性状等の被験物質は一致しているため。
ii) 物理化学的性状等	・ 推計値しかない場合等のリスク推計結果への影響等	低い	—	・ 「ヘンリー係数」及び「Koc」の値がリスク推計結果に及ぼす影響は大きくないと考えられるため。 ・ 「土壌中での生分解半減期」及び

項目	不確実性の要因	調査の必要性	再評価に有用な情報	理由
				「底質中での生分解半減期」の値により過小評価をしているおそれは低いと考えられるため。
iii) PRTR 情報	<ul style="list-style-type: none"> 化審法対象物質と PRTR 対象物質との不一致 化審法届出情報と PRTR 届出情報との不一致 	中	—	<ul style="list-style-type: none"> 化審法における届出対象物質と化管法における PRTR 対象物質が一致しており、排出源ごとの暴露シナリオでは、化審法届出情報による出荷量のほとんどが中間物としての用途であることと PRTR 情報による届出事業所の大半が化学工業であること等から、ライフサイクルステージを反映したものと考えられる。 PRTR 情報には化審法届出情報に基づく長期使用製品の使用段階の推計排出量は含まれない。 PRTR 情報で届出のないG県が化審法届出情報で仮想的排出源となったが、リスク懸念なしである 排出源ごとの暴露シナリオと様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ（環境中濃度等の空間的分布の推計）で利用している PRTR 情報の年度が異なるが、経年変化がほとんどない。
iv) 排出量推計	<ul style="list-style-type: none"> 化審法届出情報に基づく排出量推計の排出シナリオと実態との乖離等 	中	—	<ul style="list-style-type: none"> 化審法届出情報に基づくリスク推計結果が、余裕をもってリスク懸念なしである。 化審法届出情報に基づく長期使用製品の使用段階からの排出量が不確実性を有する可能性がある。
V) 暴露シナリオ	<ul style="list-style-type: none"> 暴露シナリオと実態との乖離等 	> 排出源ごとの暴露シナリオ		
		低い	—	<ul style="list-style-type: none"> 化審法届出情報に基づくリスク推計結果が、余裕をもってリスク懸念なしである。 化審法届出情報に基づく長期使用製品の使用段階からの排出量を加味したリスク推計結果でもリスク懸念なしである。
		> 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ（環境中濃度等の空間的分布の推計）		
		中	—	<ul style="list-style-type: none"> モニタリングと G-CIEMS の水質濃度結果は大きく乖離がないといえる。水質及び底質モニタリングデータが不検出であるため定量的な比較は十分に行えないが、物質の性状から環境中の残留性は低く、モニタリングデータにおいて不検出であることとの乖離は見られない。 化審法届出情報に基づく長期使用製品の使用段階からの排出量は不確実性を有しており、当該排出量を G-CIEMS に入力した場合に推計濃度が増加する可能性があるが、現在推計している濃度では十分な余裕をもってリスク懸念がないため、リ

項目	不確実性の要因	調査の必要性	再評価に有用な情報	理由
				スク懸念となる可能性は低いと考えられる。
			➤ 環境モニタリング情報	
		低い	—	・ 直近の 5 年以内のデータが得られていないが、過去 10 年での不検出のデータを採用し、余裕をもってリスク推計なしであるため追加的情報の収集の必要性は低い。

1 5-6-2 評価対象物質

2 評価対象物質について、以下の点を検討した。

3

- 4 ・ リスク評価対象物質と、リスク評価に用いた情報（物理化学的性状や有害性試験データの被験物質など）は一致しているか。

6

7 評価対象物質（イソプロペニルベンゼン）の性状データ等の被験物質は、イソプロペニル
8 ベンゼンであり、評価対象物質と一致している。

9

10 5-6-3 物理化学的性状等

11 「ヘンリー係数」及び「Koc」の 2 項目について、イソプロペニルベンゼンはいずれも推
12 計値であった（2 章参照）ため、感度解析を行った。ヘンリー係数を 10 分の 1 倍、10 倍と
13 したときの排出源ごとの暴露シナリオにおける PEC/PNEC を計算したがほとんど変化がな
14 かった。Koc も同様に、10 分の 1 倍、10 倍としたときの排出源ごとの暴露シナリオにおけ
15 る PEC/PNEC を計算したが、ほとんど変化がなかった。リスク推計結果に及ぼす影響は大
16 きくないと考えられる。

17 「土壌中での生分解半減期」は、排出源ごとの暴露シナリオに使用している。土壌中での
18 生分解半減期は、データが得られず、10,000 日と大きな値を設定しているため、過小評価を
19 しているおそれは低いと考えられる。また、「底質中での生分解半減期」についても、データ
20 が得られず、40,000 日と大きな値を設定しているため、過小評価をしているおそれは低いと
21 考えられる

22 以上より、物理化学的性状等の更なる調査の必要性は低いと判断した。

23

24 5-6-4 PRTR 情報等の不確実性

25 イソプロペニルベンゼンは、化審法における届出対象物質と化管法における PRTR 対象物
26 質が一致している。

27 また、化審法届出情報による出荷量のほとんどが中間物としての用途であり、他の化学物
28 質を合成する原料として使われていると考えられることと PRTR 情報による届出事業所の
29 大半が化学物質を合成する化学工業であること(3 章参照) などから、PRTR 情報は化審法の
30 届出情報から想定されるイソプロペニルベンゼンの用途と用途ごとのライフサイクルステー
31 ジを反映したものであると考えられる（ただし、PRTR 情報には化審法届出情報に基づく長
32 期使用製品の使用段階の推計排出量（5-6-5 参照）は含まれないことに注意）。イソプロペ
33 ニルベンゼンは、すそ切り以下事業者からの排出量が推計されていないが、従業員数 20 人
34 以下事業者の取扱量 1 トン以上の事業所の場合、化審法届出情報でカバーされていると考え
35 られ、化審法届出情報に基づくリスク推計結果がリスク懸念なしであるため、更なる調査の

1 必要性は低いと考えられる。取扱量 1 トン未満の事業所の場合、5-6-5 に後述するように、
2 更なる調査の必要性は低いと考えられる。以上のことから、PRTR 情報は、化審法届出情報
3 に基づく推計排出量より実態を反映しているものと判断した。

4 また、化審法届出情報ではG県が「中間物・合成原料、重合原料、前駆重合体」用途の仮想的
5 的排出源となったが、PRTR 情報ではG県の届出はなかった。ただし、表 5-8 の仮想的排出
6 源 No.8 に示したとおり、化審法届出情報で「リスク懸念なし」のため、更なる調査の必要
7 性は低いと判断した。

8 なお、排出源ごとの暴露シナリオは平成 23 年度の PRTR 情報を利用し、様々な排出源の
9 影響を含めた暴露シナリオ（環境中濃度等の空間的分布の推計）は平成 22 年度の PRTR 情
10 報を利用しているが、PRTR 情報の経年変化がほとんどなかったことから（3 章参照）、この
11 年度の違いによる推計結果の変動は低いと考えられる。

12

13 5-6-5 排出量推計の不確実性

14 イソプロペニルベンゼンについては、保守的な前提¹を置いた評価である化審法届出情報に
15 基づくリスク推計結果が余裕をもってリスク懸念なしであるため、不確実性を検討する必要
16 性は低い。また、PNEC から逆算される公共用水域への排出量の閾値が 1 トンを下回ってい
17 たため、PRTR の届出がされない取扱量 1 トン未満のときに公共用水域に最大で排出される
18 量を推測した。化審法届出情報のうち、工業的使用段階の「合成繊維、繊維処理剤[不織布処
19 理を含む]-均染剤、浸透剤、促染剤（染色助剤）、媒染剤、捺染用糊剤」用途が、点源からの
20 水域への排出係数が最も大きく 0.05 であった。このことから、取扱量 1 トン未満の事業所か
21 らの公共用水域への排出量は最大でも 0.05 トンと推測され、PNEC から逆算された排出量
22 の閾値 0.47 トンよりも低いため、更なる調査の必要性は低いと考えられる

23 なお、イソプロペニルベンゼンは、化審法届出情報に基づく長期使用製品の使用段階から
24 の全国排出量が水域に約 10 トンと推計された。この排出量についてはなお不確実性を有す
25 ると考えられるが、不確実性の程度を推定することは現時点で困難である。

26

27 5-6-6 暴露シナリオの不確実性

28 イソプロペニルベンゼンの場合、logPow の値が 3 以上であるため水生生物に加え底生生物
29 もリスク評価の対象となった。

30 排出源ごとの暴露シナリオについては、保守的な前提を置いた評価である化審法届出情報
31 に基づくリスク推計結果が余裕をもってリスク懸念なしであるため、不確実性を検討する必
32 要性は低い。なお、不確実性の高い数値ではあるが、化審法届出情報に基づく長期使用製品
33 の使用段階からの全国排出量による環境中濃度の増加分を MNSEM3-NITE を用いて計算し、
34 その環境中濃度の増加分を排出源ごとの環境中濃度に加えてリスク推計したところ、リスク
35 懸念となる箇所はなかった。

36 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ（環境中濃度等の空間的分布の推計）について
37 は、環境モニタリング情報と G-CIEMS の水質濃度及び底質濃度の計算結果に乖離は見られ
38 ない。ただし、化審法届出情報に基づく長期使用製品の使用段階からの排出量は不確実性を
39 有しているものの、水域への排出量については PRTR 届出排出量よりも大きいため、PRTR

¹ 前提の 1 つ目は、都道府県別・詳細用途別に複数の出荷があっても、その数量を合計して「仮想的排出源」から排出されるというシナリオを設定しているため、実在する排出源によるリスクよりも大きめに見積もられる仕組みになっていることを指す。2 つ目は、排出係数は過小評価とならないように設定されていることを指す。

1 届出排出量を入力した G-CIEMS の計算結果では、過小評価している可能性もある。しかし
2 ながら、現在推計している濃度では十分な余裕をもってリスク懸念がないため、長期使用製
3 品の使用段階からの排出量を加えたとしてもリスク懸念となる可能性は低いと考えられる。
4 水質及び底質モニタリングデータが不検出であるため定量的な比較は十分に行えないが、物
5 質の性状から環境中の残留性は低く、モニタリングデータにおいて不検出であることとの乖
6 離は見られない。

7 環境モニタリング情報については、直近の 5 年以内のデータが得られていないが、過去 10
8 年での不検出のデータを採用し、余裕をもってリスクが懸念ないため追加的情報の収集の必
9 要性は低いと考えられる。

10

6 まとめと結論

イソプロペニルベンゼンについて、生態に対するリスク評価を行った結果とまとめを示す。

6-1 有害性評価

イソプロペニルベンゼンのリスク推計に用いた有害性情報（有害性評価値）を表 6-1 に再掲する。イソプロペニルベンゼンの水生生物に係る PNEC_{water} は 0.0060mg/L、底生生物に係る PNEC_{sed} は 0.65mg/kg-dry であった（4章参照）。有害性情報の不確実性について、PNEC_{water} は2種の慢性毒性値及び1種の急性毒性値が得られている等により不確実性は比較的小さいものであるが、PNEC_{sed} については、平衡分配法による推計値等であるため慢性毒性値の不確実性が大きく残っている。

表 6-1 有害性情報のまとめ（表 4-2 再掲）

	水生生物	底生生物
PNEC	0.0060mg/L	0.65 mg/kg-dry
キースタディの毒性値	0.300mg/L	—
UFs	50	—
(キースタディのエンドポイント)	生産者（藻類）の生長阻害に係る慢性影響に対する無影響濃度（NOEC）	(水生生物に対する PNEC _{water} と Koc からの平衡分配法による換算値)

6-2 暴露評価とリスク推計

6-2-1 排出源ごとの暴露シナリオによる評価

イソプロペニルベンゼンについて化審法届出情報及び PRTR 情報を用いて暴露評価及びリスク推計を行った。このうち、PRTR 情報に基づく評価結果の方がより実態に即していると考えられ（5-6-4 参照）、結果を表 6-2 に示した。

生態影響に係るリスク推計では、水生生物について 64 の排出源のうち「リスク懸念」と推計されたのは 0 箇所、底生生物についても 0 箇所であった。

表 6-2 生態影響に関する PRTR 情報に基づくリスク推計結果（表 5-13 再掲）

	リスク懸念箇所数	排出源の数
水生生物に対するリスク推計結果	0	64
底生生物に対するリスク推計結果	0	64

6-2-2 様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオによる評価

(1) 環境中濃度の空間的分布の推計

PRTR 情報を用いて G-CIEMS による濃度推計結果を用いた暴露評価及びリスク推計を行った。水生生物について、水質濃度の推計の中から環境基準点を含む 3,705 流域を対象とし

1 て評価した結果、「リスク懸念」と推計された流域は 0 箇所であった。

2

3 **表 6-3 水生生物及び底生生物の G-CIEMS 濃度推計に基づくリスク推計結果(表 5-19 再掲)**

パーセン タイル	順位	水生生物			底生生物		
		暴露濃度 [mg/L]	PNEC water [mg/L]	PECwater/PN ECwater 比 (低水流量) [-]	暴露濃度 (低水流量) [mg/kg-dry]	PNECsed [mg/kg-dry]	PECsed/ PNECsed 比 (低水流量) [-]
0	1	6.9×10^{-41}	0.0060	1.2×10^{-38}	6.4×10^{-39}	0.65	9.9×10^{-39}
0.1	5	6.9×10^{-40}	0.0060	1.2×10^{-37}	6.5×10^{-38}	0.65	1.0×10^{-37}
1	38	1.4×10^{-35}	0.0060	2.4×10^{-33}	9.4×10^{-34}	0.65	1.5×10^{-33}
5	186	1.2×10^{-29}	0.0060	2.0×10^{-27}	1.0×10^{-27}	0.65	1.6×10^{-27}
10	371	3.6×10^{-26}	0.0060	5.9×10^{-24}	3.1×10^{-24}	0.65	4.8×10^{-24}
25	927	2.7×10^{-19}	0.0060	4.4×10^{-17}	2.1×10^{-17}	0.65	3.3×10^{-17}
50	1853	1.3×10^{-14}	0.0060	2.2×10^{-12}	1.0×10^{-12}	0.65	1.6×10^{-12}
75	2779	5.0×10^{-12}	0.0060	8.3×10^{-10}	3.8×10^{-10}	0.65	5.9×10^{-10}
90	3335	1.3×10^{-10}	0.0060	2.2×10^{-8}	9.7×10^{-9}	0.65	1.5×10^{-8}
95	3520	6.2×10^{-10}	0.0060	1.0×10^{-7}	4.5×10^{-8}	0.65	6.9×10^{-8}
99	3668	8.4×10^{-9}	0.0060	1.4×10^{-6}	6.2×10^{-7}	0.65	9.5×10^{-7}
99.9	3701	3.0×10^{-8}	0.0060	5.0×10^{-6}	2.2×10^{-6}	0.65	3.3×10^{-6}
99.92	3702	3.1×10^{-8}	0.0060	5.1×10^{-6}	2.2×10^{-6}	0.65	3.4×10^{-6}
99.95	3703	1.6×10^{-7}	0.0060	2.7×10^{-5}	1.2×10^{-5}	0.65	1.8×10^{-5}
99.97	3704	4.2×10^{-7}	0.0060	6.9×10^{-5}	3.0×10^{-5}	0.65	4.7×10^{-5}
100	3705	6.8×10^{-7}	0.0060	0.00011	4.8×10^{-5}	0.65	7.4×10^{-5}

4

5

6 **(2) 環境モニタリング情報に基づく評価**

7 モニタリングデータに基づくリスク推計を行った結果を以下に示す。水生生物については、
8 平成 17 年度のエコ調査において測定が行われた水質モニタリング結果を用いて評価を行っ
9 た。水質モニタリングにおいて不検出であったため、検出下限値を PECwater 相当として
10 PECwater/PNECwater 比を算出した結果、「リスク懸念」と推計された結果はなかった。ま
11 た、底生生物については、直近年度のモニタリングデータがないため、平成 18 年度のエコ
12 調査において測定が行われた底質モニタリング結果を用いて評価を行った。底質モニタリ
13 ングにおいて不検出であったため、検出下限値を PECsed 相当として底質の PECsed/PNECsed
14 比を算出した結果、「リスク懸念」と推計された結果はなかった。

15

16 **① 水生生物**

17 直近 10 年における水質モニタリングで検出実績がないため、最新の測定実績である平成
18 17 年度 の測定における検出下限値をもとに水質濃度 $< 9.0 \times 10^{-6} \text{mg/L}$ を水生生物の暴露濃度
19 PECwater とし、PECwater/PNECwater 比を算出してリスク推計を行った。リスク推計の
20 結果を表 6-4 に示す。

21

22 **表 6-4 水生生物のモニタリングデータに基づくリスク推計 (表 5-21 再掲)**

PECwater	$< 9.0 \times 10^{-6} \text{mg/L}$ (水質モニタリングデータから設定)
PNECwater	0.0060mg/L
PECwater/PNECwater 比	< 0.0015

23

24 **② 底生生物**

25 直近 10 年における底質モニタリングで検出実績がないため、最新の測定実績である平成
26 18 年度 の測定における検出下限値をもとに底質濃度 $< 0.0007 \text{mg/kg-dry}$ を底生生物の暴露
27 濃度 PECsed とし、PECsed/PNECsed 比を算出してリスク推計を行った。リスク推計結果

1 を表 6-5 に示す。

2

3

表 6-5 底生生物のモニタリングデータに基づくリスク推計(表5-22 再掲)

PECsed	<0.0007 mg/kg-dry (底質モニタリングデータから設定)
PNECsed	0.65mg/kg-dry
PECsed/PNECsed 比	<0.0011

4

5 また、G-CIEMS の環境基準点を含む流域での全国の濃度分布においても、5-3-2(4)の
6 G-CIEMS 推計濃度とモニタリング濃度との比較結果に示すように、モニタリングにおける
7 検出下限値未満の推計濃度であることから、モニタリングにおいて不検出であったことと整
8 合する結果となっており、モニタリングデータを採用しての評価は妥当であると考えられる。

9 なお、G-CIEMS は平成 22 年度の PRTR 排出量データを用いているのに対し、比較して
10 いるモニタリング濃度はエコ調査の水質が平成 17 年度、底質が平成 18 年度のものである点
11 に注意が必要であるが、3 章においてイソプロペニルベンゼンの製造・輸入数量、PRTR 排
12 出量は横ばいであることから、収集した環境モニタリング情報のすべてについて現状の排出
13 状況下の濃度として代表性があるものとして評価を行った。

14

15 6-2-3 用途等に応じた暴露シナリオによる評価

16 化審法届出情報では、本シナリオに該当する用途はなかった。

17

18 6-3 考察とまとめ

19 以下に各評価結果を順に示し、まとめて結論を導く。

20 平成 23 年度 PRTR 情報によると、イソプロペニルベンゼンは主として化学工業を営む事
21 業所から排出され、水生生物・底生生物に対するリスク推計の結果、全国の排出源 64 のう
22 ちリスク懸念となった箇所はいずれも 0 箇所であった。

23 環境モニタリング調査結果では、直近 10 年間の水質モニタリング及び底質モニタリング
24 において検出実績はなかった。この結果からリスク評価を実施し、水質、底質ともにリスク
25 懸念箇所は 0 箇所であった。また、G-CIEMS モデルによるリスク推計結果からもリスク懸
26 念流域は水質、底質ともに評価対象 3,705 流域中 0 流域であった。この解析結果では、
27 G-CIEMS モデルで推計された濃度は、全国的にモニタリング調査における検出下限値未満
28 の濃度であり、環境モニタリング調査結果と乖離は見られない結果となっている。

29 また、PRTR 情報によると水域への排出量は平成 15 年度の 0.046 トンから平成 23 年度の
30 0.0025 トンまで減少又は横ばい(図 3-4 参照)のため、今後、現状程度の排出が続いたと
31 しても、底質中濃度が上昇傾向になることはないと推測される。

32 以上を総合して、現在得られる情報・知見の範囲ではイソプロペニルベンゼンによる水生
33 生物・底生生物に対するリスクが懸念される地域はなく、現状レベルの排出が継続しても近
34 く懸念地域が生じる状況になることは見込まれないと判断する。

35

36 6-4 補足事項

37 特になし。

38

7 【付属資料】

7-1 参照した技術ガイダンス

この評価書を作成するにあたって参照した「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」のバージョン一覧を表 7-1 に示す。

表 7-1 参照した技術ガイダンスのバージョン一覧

章	タイトル	バージョン
-	導入編	1.0
I	評価の準備	1.0
II	人健康影響の有害性評価	1.0
III	生態影響の有害性評価	1.0
IV	排出量推計	1.0
V	暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～	1.0
VI	暴露評価～用途等に応じた暴露シナリオ～	1.0
VII	暴露評価～様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ～	1.0
VIII	環境モニタリング情報を用いた暴露評価	1.0
IX	リスク推計・優先順位付け・とりまとめ	1.0

7-2 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。

7-3 Reference chemical の物理化学的性状等の情報源等

5-5-1 で総括残留性の計算に用いた Reference chemical の物理化学的性状の情報源等を表 7-2 に示す。採用値は 5-5-1 の表 5-23 及び表 5-24 を参照。

表 7-2 Reference chemical の物理化学的性状の情報源等

項目	PCB126	アルドリ ン	デイルト リン	トリクロ エ レン	四塩化 炭素	ベンゼン	ヒフェニ ル
分子量	—	—	—	—	—	—	—
融点	※1	※2	※2	※3	※3	※3	※4
蒸気圧 (20°C)	※1	※4	※2	※3	※3	※3	※2
水溶解度 (20°C)	※1	※4	※2	※3	※3	※3	※4
1-オクタノール/水 分配係数 (対数値)	※1	※4	※2	※3	※3	※3	※3
ヘンリー係数	※1	※2	※2	※3	※3	※3	※4
有機炭素補正土壌 吸着係数	※1	※5	※6	※3	※3	※3	※5
生物濃縮係数	※7	※8	※8	※3	※3	※3	※6

情報源等：

※1 Handbooks of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, 2nd

- 1 Edition, CRC-Press, 1997
- 2 ※2(独)製品評価技術基盤機構,「化学物質の初期リスク評価書」
- 3 ※3(独)製品評価技術基盤機構,化学物質総合情報提供システム(CHRIP),平成21年9月に検索
- 4 ※4 SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
- 5 ※5 Estimation Program Interface (EPI) Suite 内に記載されている実測値
- 6 ※6 回帰式により logPow から計算
- 7 ※7 NEDO 技術開発機構/産総研リスク管理研究センター,「詳細リスク評価書」
- 8 ※8 厚生労働省/経済産業省及び環境省, 化審法データベース(J-CHECK)
- 9

10 5-5-1 で総括残留性の計算に用いた Reference chemical の各媒体における最長半減期と
 11 情報源等を表 7-3 に示す。各媒体において分解の機序別の半減期の環境分配比を考慮した
 12 合算値と全分解の半減期を比べ、より長くなる方を採用した。採用値は5-5-1の表 5-23
 13 及び表 5-24 を参照。

14

15

表 7-3 Reference chemical の最長半減期と情報源等

項目		PCB126	アルドリン	ディルドリン	トリクロロエチレン	四塩化炭素	ベンゼン	ビフェニル
大気	半機 減序 期別							
	OHラジカル反応	120 ^{※3}	0.379 ^{※3}	1.74 ^{※1}	20 ^{※6}	6660 ^{※3}	21 ^{※5}	4.6 ^{※5}
	硝酸反応	-	-	-	119 ^{※2}	-	1114 ^{※2}	-
	オゾン反応	-	-	320 ^{※6}	2238 ^{※6}	-	170000 ^{※1}	-
総括分解半減期		-	-	-	42 ^{※3}	-	33 ^{※3}	-
水域	半機 減序 期別							
	生分解	60 ^{※7}	591 ^{※3}	1080 ^{※3}	360 ^{※3}	360 ^{※3}	37.5 ^{※7}	15 ^{※7}
	加水分解	-	760 ^{※3}	1460 ^{※1}	320 ^{※3}	2555000 ^{※4}	-	-
	光分解	-	-	120 ^{※4}	642 ^{※4}	-	1346 ^{※3}	-
総括分解半減期		-	-	1080 ^{※3}	360 ^{※5}	-	160 ^{※3}	-
土壌	半機 減序 期別							
	生分解	120 ^{※7}	3650 ^{※3}	2555 ^{※4}	75 ^{※7}	360 ^{※5}	75 ^{※7}	30 ^{※7}
	加水分解	-	-	-	-	-	-	-
総括分解半減期		-	-	3285 ^{※3}	360 ^{※3}	-	10 ^{※3}	-
底質	半機 減序 期別							
	生分解	540 ^{※7}	1620 ^{※7}	1620 ^{※7}	337.5 ^{※7}	540 ^{※7}	337.5 ^{※7}	135 ^{※7}
	加水分解	-	-	-	-	-	-	-
総括分解半減期		-	-	629 ^{※3}	43 ^{※3}	-	-	-

- 16 情報源等：
- 17 ※1 Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
- 18 ※2 SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
- 19 ※3 Handbooks of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, 2nd
 20 Edition, CRC-Press, 1997
- 21 ※4 Handbook of Environmental FATE & EXPOSURE, Lewis Pub, 1989
- 22 ※5 Handbook of Environmental Degradation Rates, Lewis Pub, 1991
- 23 ※6 Estimation Program Interface (EPI) Suite 内の AOPWIN による推定値
- 24 ※7 Estimation Program Interface (EPI) Suite 内の BIOWIN3 の格付けから換算
- 25
- 26

1 7-4 生態影響に関する有害性評価Ⅱ

2 7-4-1 各キースタディの概要

3

4 <生産者（藻類）>

5 【キースタディ】

6 *Pseudokirchneriella subcapitata* 生長阻害；72時間 NOEC 0.3mg/L

7 環境庁^[1]は OECD テストガイドライン No.201 (1984)に準拠し、ムレミカヅキモ（緑
8 藻類）*Pseudokirchneriella subcapitata*（旧 *Selenastrum capricornutum*）の生長阻害試験を、
9 和光純薬工業(株)製純度 99.6%の被験物質を用いて、GLP 試験で実施した。試験は密閉
10 系で実施された。設定試験濃度は 0、0.200、0.500、1.30、3.20、8.00、20.0 mg/L（公比
11 2.5）であり、試験溶液の調製には助剤としてメチルセロソルブと界面活性作用のある
12 硬化ひまし油（HCO-30）が用いられた。被験物質の実測濃度は、試験開始時と終了時
13 においてそれぞれ設定値の 79%～90%、41%～47%であった。毒性値の算出には実測
14 濃度（試験開始時と終了時の幾何平均値）が用いられ、0-48 時間の結果をもとに速
15 度法による 72 時間半数影響濃度（EC₅₀）は 5.09mg/L、72 時間最大無影響濃度（NOEC）
16 は 0.3mg/L であった。

17

18 <一次消費者（又は消費者）（甲殻類）>

19 【キースタディ】

20 *Daphnia magna* 繁殖阻害；21日間 NOEC 401 µg/L

21 環境庁^[2]は OECD テストガイドライン No.202 (1984)に準拠し、オオミジンコ *Daphnia*
22 *magna* の繁殖試験を、和光純薬工業(株)製純度 99.6%の被験物質を用いて、GLP 試験で
23 実施した。試験は密閉系・半止水式（24 時間毎換水）で行われた。設定試験濃度は 0、
24 0.080、0.200、0.500、1.20、3.00 mg/L（公比 2.5）であり、試験溶液の調製には試験用
25 水として脱塩素水が、助剤としてジメチルホルムアミド（DMF）と界面活性作用のある
26 硬化ひまし油（HCO-60）が用いられた。被験物質の実測濃度は、試験期間中設定濃
27 度の 70%～106%であった。毒性値の算出には実測濃度（時間加重平均値）が用いられ、
28 21 日間無影響濃度（NOEC）は 0.401 mg/L であった。

29

30 <二次消費者（又は捕食者）（魚類）>

31 【キースタディ】

32 *Oryzias latipes* 96 時間 LC₅₀ 7,280 µg/L

33 環境庁^[2]は OECD テストガイドライン No.203 (1992)に準拠し、メダカ *Oryzias latipes*

1 を用いて急性毒性試験を、和光純薬工業(株)製純度 99.6%の被験物質を用いて、GLP 試
 2 験で実施した。試験は半止水式(24 時間毎換水)で実施された。設定試験濃度は 0、3.00、
 3 6.00、12.0、24.0、48.0 mg/L (公比 2.0) であり、試験溶液の調製には試験用水として脱
 4 塩素水が、助剤としてメチルセロソルブと界面活性作用のある硬化ひまし油 (HCO-30)
 5 が用いられた。被験物質の実測濃度は試験開始時と 24 時間後においてそれぞれ設定濃
 6 度の 86%~96%、71%~76%であった。毒性濃度の算出には実測濃度 (試験開始時と
 7 24 時間後の幾何平均値) が用いられ、96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) は 7.28mg/L となっ
 8 た。

9

10 出典)

11 [1] (独) 国立環境研究所 (2005) : 平成 16 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書

12 [2]環境庁 (1997) : 平成 8 年度 生態影響試験

13

14 7-4-2 平衡分配法による PNEC_{sed} の算出

15 底生生物の信頼できる有害性データは得られなかったため、水生生物に対する
 16 PNEC_{water} から平衡分配法を用いて、底生生物への PNEC_{sed} を導出した。以下に平衡
 17 分配法による算出過程を記載した。表 7-4 に示したパラメータから乾重量換算で
 18 PNEC_{sed} 0.65 mg/kg-dry (湿重量換算 0.14mg/kg-wet) を得た。

19

20
$$PNEC_{sed} = (K_{susp-water} / RHO_{susp}) \times PNEC_{water} \times 1,000$$

21

22

表 7-4 平衡分配法に用いるパラメータ等

パラメータ名	内容	算出式	算出結果	
PNEC _{sed} (湿重量) [mg/kgwwt]	底質の予測無影響濃度 (湿重量ベース)	$= (K_{susp-water} / RHO_{susp}) \times PNEC_{water} \times 1,000$ $= (27.08 / 1150) \times 0.006 \times 1000$	0.141	
K _{susp-water} [m ³ /m ³]	浮遊物質 / 水分配係数	$= F_{water\ susp} + F_{solid\ susp} \times (K_p\ susp) / 1,000 \times RHO_{solid}$ $= 0.9 + 0.1 \times (104.7 / 1000) \times 2500$	27.08	
	F _{water susp} [m _{water} ³ /m _{susp} ³]	浮遊物質の液相率	デフォルト値	0.9
	F _{solid susp} [m _{solid} ³ /m _{susp} ³]	浮遊物質の固相率	デフォルト値	0.1
	K _{p susp} [L/kg _{solid}]	浮遊物質の固相成分と水との分配係数	$= F_{oc\ susp} \times K_{oc} = 0.1 \times 1047$	104.7
	F _{oc susp} [kg _{oc} /kg _{solid}]	浮遊物質の固相成分に対する有機炭素重量比	デフォルト値	0.1
	K _{oc} [L/kg]	有機炭素 / 水分配係数	2 章	1,047
	RHO _{solid} [kg _{solid} /m _{solid} ³]	固体密度	デフォルト値	2,500
RHO _{susp} [kg _{wwt} /m ³]	浮遊物質のかさ密度	デフォルト値	1,150	
PNEC _{water}	水質の予測無影響濃	水生生物 PNEC _{water}	0.0060	

パラメータ名	内容	算出式	算出結果
[mg/L]	度		
PNEC _{sed} (乾重量) [mg/kgdwt]	底質の予測無影響濃度 (乾重量ベース)	$PNEC_{sed} (湿重量) \times CONV_{susp} = 0.141 \times 4.6$	0.65
CONV _{susp} [kgwwt/kgdwt]	浮遊物質中の対象物質濃度換算係数 (湿重量→乾重量)	$RHO_{susp} / (F_{solid\ susp} \times RHO_{solid}) = 1150 / (0.1 \times 2500)$	4.6
RHO _{susp} [kgwwt/m ³]	浮遊物質のかさ密度	デフォルト値	1,150
F _{solid susp} [msolid ³ /msusp ³]	浮遊物質の固相率	デフォルト値	0.1
RHO _{solid} [kgsolid/msolid ³]	固体密度	デフォルト値	2,500

1

2

3 7-4-3 国内外における生態影響に関する有害性評価の実施状況

4 (1) 既存のリスク評価書における有害性評価の結果

5 当該物質のリスク評価に関する各種情報の有無を表 7-5 に、また、評価書等で導出
6 された予測無影響濃度 (PNEC) 等を表 7-6 にそれぞれ示した。

7

表 7-5 イソプロピルベンゼンのリスク評価等に関する情報

リスク評価書等	
化学物質の環境リスク評価 (環境省) [1]	○ (第4巻)
化学物質の初期リスク評価書 (CERI, NITE) [2]	×
詳細リスク評価書 ((独) 産業技術総合研究所) [3]	×
OECD 初期評価書 (SIAR : SIDS* Initial Assessment Report) *Screening Information Data Set [4]	○
欧州連合 (EU) リスク評価書 (EU-RAR) [5]	×
世界保健機関 (WHO) 環境保健クライテリア (EHC) [6]	×
世界保健機関 (WHO) /国際化学物質安全性計画 (IPCS) 国際簡潔評価文書 「CICAD」 (Concise International Chemical Assessment Document) [7]	×
カナダ環境保護法優先物質評価書 (Canadian Environmental Protection Act Priority Substances List Assessment Report) [8]	×
Australia NICNAS Priority Existing Chemical Assessment Reports[9]	×
BUA Report[10]	×
Japan チャレンジプログラム[11]	×

8

凡例) ○ : 情報有り、×情報無し []内数字 : 出典番号

9

10

表 7-6 リスク評価書での予測無影響濃度 (PNEC) 等

リスク評価書等	リスク評価に用いている値	根拠			
		生物群	種名	毒性値	アセスメント係数等
化学物質の環境リスク評価 [1]	0.003mg/L (PNEC)	藻類	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	72 時間 NOEC 0.3mg/L	100
OECD 初期評価書 [4]	淡水 : 0.018mg/L (PNEC)	甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	21 日間 NOEC 1.8mg/L	100

11

[]内数字 : 出典番号 ※慢性毒性での最小値

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

(2) 水生生物保全に関する基準値等の設定状況

水生生物保全に係る基準値等として、米国、英国、カナダ、ドイツ、オランダでの策定状況を表 7-7 に示した。イソプロペニルベンゼンの水質目標値は、これらの国では策定されていない。

表 7-7 水生生物保全関連の基準値等
(イソプロペニルベンゼン)

対象国	担当機関	水質目標値名		水質目標値 (µg/L)
米国[12]	米国環境保護庁	Aquatic life criteria	淡水 CMC ^{*1} /CCC ^{*2}	設定されていない
			海(塩)水 CMC ^{*1} /CCC ^{*2}	設定されていない
英国[13]	環境庁	UK Standard Protection of Fisheries	Salmonid and cyprinid waters:	設定されていない
			Inland surface waters (90th percentile)	設定されていない
			transitional and coastal waters (Annual mean)	設定されていない
カナダ[14]	環境カナダ	Water Quality Guidelines for the Protection of Aquatic Life	Freshwater	設定されていない
			Marine	設定されていない
ドイツ[15]	連邦環境庁	Water Framework Directive Annual average EQS (Watercourses and lakes)		設定されていない
		Water Framework Directive Annual average EQS (Transitional and coastal waters)		設定されていない
オランダ[16]	国立健康環境研究所	Maximum Permissible Concentration(MPC)*3		設定されていない
		Target value*3		設定されていない
		海域		設定されていない

[]内数字：出典番号

*1：CMC (Criterion Maximum Concentration)：最大許容濃度

*2：CCC (Criterion Continuous Concentration)：連続許容濃度

*3：法制度には規定されていないが環境影響評価等に用いられている目標値で、MPC(最大許容濃度：Maximum permissible concentration)は人の健康や生物に影響を及ぼさない予測濃度、target value (目標値)は環境に影響を及ぼさない濃度を示す。[17]

(3) 出典

- [1] 環境省(2005): 化学物質の環境リスク評価 (第4巻)
(<http://www.env.go.jp/chemi/report/h17-21/pdf/chpt1/1-2-2-16.pdf>)
- [2] 財団法人化学物質評価研究機構, 独立行政法人製品評価技術基盤機構: 化学物質の初期リスク評価書. (独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 委託事業)
- [3] 独立行政法人産業技術総合研究所: 詳細リスク評価書

- 1 [4] OECD(1998) : SIDS (Screening Information Data Set) INITIAL ASSESSMENT PROFILE
2 (http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/OECDSIDS/98839.pdf)
- 3 [5] European Union: European Union Risk Assessment Report.
- 4 [6] International REPramme on Chemical Safety : Environmental Health Criteria
- 5 [7] 世界保健機関(WHO)/国際化学物質安全性計画 (IPCS) 国際簡潔評価文書「CICAD」(Concise
6 International Chemical Assessment Document)
- 7 [8] Environmental Canada Health Canada : Canadian Environmental Protection Act Priority
8 Substances List Assessment Report (カナダ環境保護法優先物質評価書)
- 9 [9] Australia NICNAS Priority Existing Chemical Assessment Reports
- 10 [10] BUA Report
- 11 [11] Japan チャレンジプログラム
- 12 [12] United States Environmental Protection Agency Office of Water Office of Science and Technology
13 (2009):National Recommended Water Quality Criteria
14 <http://www.epa.gov/waterscience/criteria/wqctable/index.html>
- 15 [13] Environment Agency: Chemical Standards
16 <http://evidence.environment-agency.gov.uk/chemicalstandards/>
- 17 [14] Canadian Council of Ministers of the Environment(2011): Canadian Environmental Quality
18 Guidelines Summary Table <http://st-ts.ccme.ca/>
- 19 [15] Federal Ministry for the Environment, Nature Conservation and Nuclear Safety(2010): Water
20 Resources Management in Germany Part 2– Water quality –
21 <http://www.umweltdaten.de/publikationen/fpdf-l/3771.pdf>
- 22 [16] Crommentuijn, T., D.F. Kalf, M.D. Polder, R. Posthumus, and E.J. van de Plassche. 1997.Maximum
23 Permissible Concentrations and Negligible Concentrations for Pesticides.Report No. 601501002.
24 National Institute of Public Health and Environmental Protection,Bilthoven, The Netherlands.
- 25 [17] National Institute of Public Health and the Environment(1999):Environmental Risk Limits in
26 Netherlands, Setting Integrated Environmental Quality Standards for Substances in the Netherlands,
27 Environmental quality standards for soil, water & air.
- 28

情報源略称	詳細等
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
ATSDR	ATSDR(米国毒性物質疾病登録局):「Toxicological Profile」
CCD	Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007
CICAD	WHO/IPCS:「国際簡潔評価文書(CICAD)」
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, Version 2013, CRC-Press
EHC	WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
EURAR	EU ECB(European Chemicals Bureau):「リスク評価書(EU Risk Assessment Report)」
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUPAC	The IUPAC Solubility Data Series
JCP	Japanチャレンジプログラム
Lange	Lange's Handbook of Chemistry, McGraw-Hill, 2005
Mackay	Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Second Edition
Merck	The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006
MOE初期評価	環境省環境リスク評価室:「化学物質の環境リスク評価」
NITE初期リスク評価書	(独)製品評価技術基盤機構:「化学物質の初期リスク評価書」
NITE有害性評価書	(財)化学物質評価研究機構・(独)製品評価技術基盤機構:「化学物質有害性評価書」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SIDS	OECD: SIDSレポート
SPARC	SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry
USHPV	US/HPVチャレンジプログラム
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロピルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

融点

収集データ

情報源名	項目	値	値 (統一表記) [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク	評価IIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	融点	-24 °C	-24	-	-	-	-			2B	×	e) Melting point/freezing point/Melting point/range: -24 °C - lit.		Product Number:M80903
2 CCD	凝固点	-23.21 °C	-23.21	-	-	-	-			2B	×	-		α -methylstyrene
3 CRC	融点	-22.36 °C [-22.36(0.05)]	-22.36	-	-	-	-			2B	×	-	Frenkel, M., Chirico, R. D., Diky, V. V., Kazakov, A., and Muzny, C. D., ThermoData Engine, NIST Standard Reference Database 103b, Version 5.0 (Pure Compounds, Binary Mixtures, and Chemical Reactions, TDE-SOURCE Version 5.1), National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD – Boulder, CO, 2010, < http://www.nist.gov/srd/nist103b.cfm >.	Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
4 EPI Suite	融点	-45.01 °C	-45.01	MPBPWIN	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 September 2008	2C	×	-		-
5 HSDB	融点	-23.2 °C	-23.2	-	-	-	-			2B	×	-	Lide, DR (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 81st Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2000, p. 3-55	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
6 JCP	融点	-23 °C	-23	-	no data	-	-			2B	×	-		2.1 融点
7	融点	-23.2 °C	-23.2	-	no data	-	-			2B	×	-	Ullmanns Encyklopädie der techn. Chemie	2.1 融点
8 Mackay	融点	-23.2 °C	-23.2	-	-	-	-			2B	×	-	Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th CRC Press, Boca Raton, FL.	p.582
9 MOE初期 評価	融点	-23.2 °C	-23.2	-	-	-	-			2B	×	-	Lide, D.R. (ed.) (2000): CRC Handbook of Chemistry and Physics. 81st Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL, p. 3-55.	p.1
10 NITE初期 リスク評価 書	融点	-23 °C	-23	-	-	-	-			2B	×	-	IPCS, International Programme on Chemical Safety (2004) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva. (http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtash/index.htm から引用)	p.2
11 PhysProp	融点	-23.2 °C	-23.2	-	-	-	-			2B	×	-		p.1
12 SIDS	融点	-23.2 °C	-23.2	Unknown	no	-	key study			2A	○	-	Kagaku daijiten (Chemical dictionary)	p.226; SIDS Dossier p.246

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロピルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

▲融点

収集データ

情報源名	項目	値	値 (統一表記) [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク	評価IIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
13 既存点検事 業	融点	-23.2 ° C[250.0K (-23.2°C)]	-23.2	-	-	-	-			4A	×	-	化学辞典(株式会社 東京化学同 人)	K0082

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロピルベンゼン(別名 α -メチルstyレン)
CAS番号	98-83-9

▲ 沸点

収集データ

情報源名	沸点	沸点 (統一表記) [°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク	評価IIにお けるキース スタディ	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	165~169 °C	167		-	-	-	-			3	×	f) Initial boiling point andboiling range165 - 169 °C - lit.		Product Number:M80903
2 CCD	165.38 °C	165.38	760 mmHg	-	-	-	-			2B	×	-		α -methylstyrene
3 CRC	165.4 ° C[165.4(0 .3)]	165.4	760 mmHg	-	-	-	-			2B	×	-	Frenkel, M., Chirico, R. D., Diky, V. V., Kazakov, A., and Muzny, C. D., ThermoData Engine, NIST Standard Reference Database 103b, Version 5.0 (Pure Compounds, Binary Mixtures, and Chemical Reactions, TDE-SOURCE Version 5.1), National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD – Boulder, CO, 2010, < http://www.nist.gov/srd/nist103b.cfm >.	Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
4 EPI Suite	162.55 °C	162.55	1 atm	MPBPWIN	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43	2C	×	-		-
5 HSDB	165.4 °C	165.4		-	-	-	-			3	×	-	Lide, DR (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 81st Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2000, p. 3-55	CHEMICAL/PHYSI CAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
6 JCP	165 °C	165		-	-	-	-			3	×	-		2.2 沸点
7	164.7 °C	164.7	1013 hPa	-	-	2: reliable with restrictions	-	experiment al result	-	2B	×	信頼性スコア /2 制限付 きで信頼性あり(定義済 み方法に従う試験方法 でなく、しかしデータ は理解でき、科学的に 受け入れられる)	BASF AG, Verfahrenstechnische Versuchsgruppe, unver<=>ffentlichte Untersuchung, Bericht 168.365.1, 25.07.1968	2.2 沸点
8	165 °C	165	1013 hPa	-	no data	-	-			2B	×	-	Ullmanns Encyclop<=>tdie der techn. Chemie (4),22; 307	2.2 沸点
9 Mackay	165.4 °C	165.4		-	-	-	-			3	×	-	Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th CRC Press, Boca Raton, FL.	p.582
10 MOE初期評 価	165.4 °C	165.4		-	-	-	-			3	×	-	Lide, D.R. (ed.) (2000): CRC Handbook of Chemistry and Physics. 81st Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL, p. 3-55.	p.1

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロピルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

▲ 沸点

収集データ

情報源名	沸点	沸点 (統一表記) [°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるギースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク	評価IIにお けるギース タディー	備考	文献	ページ番号等
11 NITE初期リ スク評価書	164 °C	164	101300 Pa	-	-	-	-			2B	×		IPCS, International Programme on Chemical Safety (2004) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva. (<a href="http://www.ilo.org/public/english/prot
ection/safework/cis/products/icsc/dtas
ht/index.htm">http://www.ilo.org/public/english/prot ection/safework/cis/products/icsc/dtas ht/index.htm から引用)	p.2
12 PhysProp	165.4 °C	165.4		-	-	-	-			3	×			p.1
13 SIDS	161~162 °C	161.5	1013 hPa	Unknown	no	-	key study			2A	○		Kagaku Daijiten (Chemical dictionary)	p.226; SIDS Dossier p.246
14 既存点検事 業	163.5~ 165.5 °C	164.5		-	-	-	-			3	×		提示資料	K0082
15	161~162 °C	161.5		-	-	-	-			3	×			K0082

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロベニルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

◀ 蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	蒸気圧 (統一表記) [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Iにおけ るキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	1.66 mmHg[2B 以上の値を 用いて推定 (2C)]	221.31513	20 °C	MPBPWIN	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 September 2008	2C	×			
2 HSDB	1.9 mmHg	253.3125	25 °C	-	-	-	-			2B	×		Boublik T et al; The vapor pressures of pure substances. Vol. 17. Amsterdam, Netherlands: Elsevier Sci Publ p. 702 (1984)	ENVIRONMENTAL FATE & EXPOSURE: > ENVIRONMENTAL FATE:
3 JCP	253 Pa	253	20 °C	-	-	-	-			2B	×			2.4 蒸気圧
4	3 hPa	300	20 °C	-	no data	-	-			2B	×		Hommel-Merkblatt 615	2.4 蒸気圧
5	15 hPa	1500	50 °C	-	no data	-	-			2B	×		Sicherheitsdatenblatt Phenolchemie GmbH	2.4 蒸気圧
6 Mackay	133.3 Pa	133.3	7.4 °C	-	-	-	-	その 他:summary of literature data, temp range 7.4 -165.4°C		2B	×	133.3* (7.4°C, summary of literature data, temp range 7.4- 165.4°C, Stull 1947) log (P/mmHg) = 7.28240 - 1740.3/(230 + t°C) (Antoine eq., Dreisbach & Martin 1949)	Dreisbach, R.,R., Martin, A.A.I. (1949) Physical data on some organic compounds. Ind. Eng. Chem. 41, 2875- 2878.	p.582
7	333 Pa	333	25 °C	-	-	-	-	外挿 (補外)	extrapolated by formula	4C	×	333 (extrapolated by formula., Dreisbach 1855) log (P/mmHg) = 6.92366 - 1486.88/(202.4 + t°C); temp range 70-220°C (Antoine eq. for liquid state, Dreisbach 1955) log (P/mmHg) = [-0.2185 × 10214.6/(T/K)] + 7.959753; temp range 7.4-165.4°C (Antoine eq., We	Yaws, C.L. (1994) Handbook of Vapor Pressure, Vol. 1 C1 to C4 Compounds, Vol. 2. C5 to C7 Compounds, Vol. 3, C8 to C28 Compounds. Gulf Publishing Co., Houston, Texas.	p.582
8 MOE初期評 価	1.9 mmHg	253.3125	25 °C	-	-	-	-			2B	×		Boublik, T., V. Fried and E. Hala (1984) : The Vapour Pressures of Pure Substances. Second Revised Edition. Amsterdam: Elsevier, 702.	p.1
9	38.7 Pa[0.29mm Hg(=3.87× 101Pa)(32 °C)]	38.7	32 °C	-	-	-	-			2B	×		HOWARD, P.H. and MEYLAN, W.M., ed. (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers, p.138.	p.1
10	1.9 mmHg	253.3125	20 °C	-	-	-	-			2B	×		American Conference of Governmental Industrial Hygienists. Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices. 5th ed. Cincinnati, OH:American Conference of Governmental Industrial Hygienists, 1986. 410. [Hazardous Substances Data Bank]	p.1

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロピルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

▲ 蒸気圧

収集データ

	情報源名	蒸気圧	蒸気圧 (統一表記) [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
11		25 Pa[1.9 mmHg(=25 Pa) (20°C)]	25	20 °C	-	-	-	-			2B	×		American Conference of Governmental Industrial Hygienists. (1986): Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices. 5th ed. Cincinnati, OH: American Conference of Governmental Industrial Hygienists: 410. [Hazardous Substances Data Bank]	p.1
12	NITE初期リス ク評価書	300 Pa	300	20 °C	-	-	-	-			2B	×		Verschueren, K. (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, NY.	p.2
13		1.5 kPa	1500	30 °C	-	-	-	-			2B	×		Verschueren, K. (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, NY.	p.2
14	PhysProp	1.9 mmHg	253.3125	25 °C	-	-	-	-	外挿 (補外)	Extrapolated data is based upon experimental measurement outside the temperature range of the reported value	4C	×		BOUBLIK, T ET AL. (1984)	p.1
15	SIDS	280 Pa	280	20 °C	Unknown	-	-	key study	experimental result	-	2A	○		IUCLID Database (Phenolchemie GmbH Gladbeck)	p.226; SIDS Dossier p.247
16	既存点検事業	280 Pa	280	20 °C	文献資料	-	-	-	その他:文献資料		4A	×	The Sigma-Aldrich Library of Regulatory and Safety Dataの 2.1mmHg(20°C)及び5.2mmHg (37.7°C)をPaに換算した。	The Sigma-Aldrich Library of Regulatory and Safety Data	K0082
17		690 Pa	690	37.7 °C	文献資料	-	-	-	その他:文献資料		4A	×	The Sigma-Aldrich Library of Regulatory and Safety Dataの 2.1mmHg(20°C)及び5.2mmHg (37.7°C)をPaに換算した。	The Sigma-Aldrich Library of Regulatory and Safety Data	K0082

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロピルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

▲ 水溶解度

収集データ

	情報源名	水溶解度	水溶解度 (統一表記) [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク	評価IIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1	CCD	[insoluble]	単位換算不 可			-	-	-	-			3	×			α -methylstyrene
2	CRC	[insoluble]	単位換算不 可			-	-	-	-			3	×	i H_2_O		Physical Constants of Organic Compounds (Section 3) etc
3		0.116 g/Kg	116	20 °C		-	-	-	-			2B	×		Yalkowsky, S. H., and He, Y., Handbook of Aqueous Solubility Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 2003	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
4		0.0116 mass %	116	20 °C		-	-	-	-			2B	×		同上	同上
5	EPI Suite	113.2 mg/L[2B以上の値を用いて推定(2C)]	113.2	25 °C		WSKOWWIN	-	-	key study	(Q)SAR	WSKOWWIN v1.41a September 2008	2C	×			-
6	HSDB	116 mg/L	116	25 °C		-	-	-	-			2B	×		Yalkowsky SH, Dannenfeler RM; The AQUASOL dATABASE of Aqueous Solubility. 5th ed, Tucson, AZ: Univ Az, College of Pharmacy (1992)	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
7	JCP	0.043 wt%	430			-	-	-	-			3	×			2.6.1 水溶解性 (解離定数を含む)
8		<1 g/L	1000	20 °C	5~6	-	no data	-	-			2B	×	水溶解度 1 g/L 未満 温度: 20°C、pH 約 5 - 6 pH測定時の物質濃度 500 g/L	Handbook of Chemistry and Physics, R.C. Weast CRC-Press, Cleveland, Ohio, USA, 58th Ed.	2.6.1 水溶解性 (解離定数を含む)
9	MOE初期評価	116 mg/L	116	25 °C		-	-	-	-			2B	×		Yalkowsky, S.H., R.M. Dannenfeler (1992) : The AQUASOL dATABASE of Aqueous Solubility. 5th ed, Tucson, AZ: Univ Az, College of Pharmacy.	p.1
10		116 mg/L[116mg/L(温度の記載なし)]	116			-	-	-	-			3	×		HOWARD, P.H. and MEYLAN, W.M., ed. (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers, p.138.	p.1

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロピルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

▲ 水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	水溶解度 (統一表記) [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキース タディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク	評価IIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
11 NITE初期リ スク評価書	0.12 g/L	120	20 °C		-	-	-	-			2B	×	-	IPCS, International Programme on Chemical Safety (2004) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva. (http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtasht/index.htm から引用)	p.2
12 PhysProp	116 mg/L	116	25 °C		-	-	-	-	experimen tal result	-	2B	×	-	BOUBLIK, T ET AL. (1984)	p.1
13 SIDS	100 mg/L[Slight ly soluble]	100	25 °C		OECD TG 105	yes	-	key study			1A	○	-	MITI, Japan (1997)	p.226; SIDS Dossier p.247
14 既存点検事 業	100 mg/L	100	25 °C		OECD TG 105	-	-	-	experimen tal result	-	1B	○	-		K0082
15	100 mg/L	100	25 °C		-	-	-	-			4A	×	-		K0082
16	[不溶]	単位換算不 可			-	-	-	-			3	×	-		K0082

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロベニルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

▲ logPow

収集データ

	情報源名	値	値 (統一表 記)	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク	評価Iにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1	CRC	3.63	3.63	25 °C		-	-	-	-			2B	×	-	Sangster, J., J. Phys. Chem. Ref. Data, 18, 1111, 1989.	Octanol-Water Partition Coefficients (Section 16)
2	EPI Suite	3.4423	3.4423			KOWWIN	-	-	key study	(Q)SAR	KOWWIN v1.67a Sept 2008	2C	×	-		-
3	HSDB	3.48	3.48			-	-	-	-			2B	×	-	Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995., p. 56	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT:
4	JCP	2.238	2.238			-	-	-	-			2B	×	-		2.5 分配係数(log Kow)
5		3.265	3.265				no data	-	-			2B	×	-	P07-04: Leo, Hansch: Berechnung mit dem MedChem-Programm, Version 1989(POMONA89).	2.5 分配係数(log Kow)
6	Mackay	3.48	3.48			-	-	-	-	その他:recommended		2B	×	Octanol/Water Partition Coefficient, log KOW: 3.48 (recommended, Hansch et al. 1995)	Hansch, C., Leo, A.J., Hoekman, D. (1995) Exploring QSAR, Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. ACS Professional Reference Book, American Chemical Society, Washington, DC.	p.582
7	MOE初期評価	3.48	3.48			-	-	-	-			2B	×	-	Hansch, C., A. Leo and D. Hoekman (1995) : Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society.	p.1
8	NITE初期リスク評価書	3.44	3.44			-	-	-	-	その他:推定値		4C	×	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2006) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.	p.2
9		3.48	3.48			-	-	-	-	experimental result		2B	×	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2006) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.	p.2
10	PhysProp	3.48	3.48			-	-	-	-	experimental result		2B	×	-	HANSCH,C ET AL. (1995)	p.1
11	SIDS	3.48	3.48	25 °C		OECD TG 107	yes	-	key study	experimental result		1A	○	-	MITI, Japan (1997)	p.226; SIDS Dossier p.247

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロピルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

▲ logPow

収集データ

情報源名	値	値 (統一表 記)	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク	評価Iにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
12 既存点検事 業	3.48	3.48	25±1 °C	6.1~ 6.3	OECD TG 107	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result	-	1A	○			K0082

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロベニルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

▲ Koc

収集データ

情報源名	項目	値	値 (統一表 記)[L/kg]	測定条 件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性 ランク	評価Iにお けるキース タイ	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	1046.868181 34693 L/kg[2B以上 の値を用いて 推定 (2C)]	1046.868			-	KOCWIN	-	-	key study	(Q)SAR	KOCWIN v2.00 February 2009	2C	○	-		-
2 HSDB	Koc	1900	1900			-	-	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	×	-	SRC	ENVIRONMENTAL FATE & EXPOSURE: > SOIL ADSORPTION/MOBILI TY:
3 MOE初期評 価	Koc	820	820			-	PCKOCWIN	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	×	-	U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWIN™ v.1.66.	p.2
4 NITE初期リ スク評価書	Koc	820	820			-	-	-	-	-	その他:推定値	-	4C	×	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2006) PcKocWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.	p.2

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロピルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

▲ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	ヘンリー係数 (統一表記) [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	197 Pa・m ³ /mol	197	20 °C		-	key study	(Q)SAR	HENRYWIN v3.20 October 2008	2C	×	-		-
2 HSDB	0.0026 atm・m ³ /mol	263.445			-	-	estimated by calculation	-	4C	×	-	SRC	ENVIRONMENTAL FATE & EXPOSURE: > ENVIRONMENTAL FATE:
3 NITE初期リス ク評価書	258 Pa・m ³ /mol	258	25 °C		-	-	その他:推定値	-	4C	×	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2006) HenryWin Estimation Software, ver. 3.10, North Syracuse, NY.	p.2
4 PhysProp	0.00255 atm・m ³ /mol	258.37875	25 °C		-	-	estimated by calculation	-	4C	×	-	VP/WSOL	p.1

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロピルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

▲ 解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	値 (統一表 記)	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類 の詳細	備考	文献	ページ番号 等
1 NITE初期リス ク評価書	解離定数	[解離基な し]	算出不可			-	-	-	-			-		p.2

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロピルベンゼン(別名 α -メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

◀ 分解性

収集データ

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
1 NITE初期リスク評価書	not readily biodegradable	0%	O ₂ consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		-	通商産業公報(1979年12月20日), 3省共同化学物質データベース. (http://www.safe.nite.go.jp/tmdb/Init.do から引用)	p.5
2 SIDS	under test condition no biodegradation observed	0 %[under test condition no biodegradation observed]			OECD TG 301C	yes	-	key study			-	M.I.T.I. (1997)	p.226; SIDS Dossier p.250
3 既存点検事業		[負の値が出たので(-)とした]	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result				K0082
4		0%	O ₂ consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result				K0082
5		0%	O ₂ consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		水系及び汚泥系において試料の残留量が少なく、2週間の試験中に大部分が揮散したものであるため文化井戸を算出しなかった。		K0082

基本情報

優先評価化学物質通し番号	48
物質名称	イソプロベニルベンゼン(別名 α-メチルスチレン)
CAS番号	98-83-9

▲蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区番号	被験物質設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	値(統一表記) [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Iにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 NITE初期リス ク評価書	低濃縮性	1	0.03 mg/L		濃縮倍率	下限	12~113	113	化審法TG	-	-	-			1B	×	-	通商産業公報(1979年12月20日), 3省共同化学物質データベース. (http://www.safe.nite.go.jp/tmdb/ nit.doから引用)	p.6,7
	低濃縮性	1	0.3 mg/L		濃縮倍率	下限	15~140	140	化審法TG	-	-	-			1B	×	-	通商産業公報(1979年12月20日), 3省共同化学物質データベース. (http://www.safe.nite.go.jp/tmdb/ nit.doから引用)	p.6,7
3 SIDS	-	1	0.03 mg/L		BCF	-	12~113	113	OECD TG 305C	-	-	key study	experimental result	flow-through	1B	×	-	MITI, Japan (1997)	p.226; SIDS Dossier p.250
	-	2	0.3 mg/L		BCF	-	15~140	140	OECD TG 305C	-	-	key study	experimental result	flow-through	1B	×	-	MITI, Japan (1997)	p.226; SIDS Dossier p.250
5 既存点検事業	-	1	0.03 ppm W/V	2 週	Rawデータ	-	23[参考値]	23	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
6	-	1	0.03 ppm W/V	2 週	Rawデータ	-	26[参考値]	26	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
7	-	1	0.03 ppm W/V	3 週	Rawデータ	-	54[参考値]	54	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
8	-	1	0.03 ppm W/V	3 週	Rawデータ	-	29[参考値]	29	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
9	-	1	0.03 ppm W/V	4 週	Rawデータ	-	15[参考値]	15	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
10	-	1	0.03 ppm W/V	4 週	Rawデータ	-	51[参考値]	51	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
11	-	1	0.03 ppm W/V	6 週	Rawデータ	-	38[参考値]	38	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
12	-	1	0.03 ppm W/V	6 週	Rawデータ	-	12[参考値]	12	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
13	-	1	0.03 ppm W/V	8 週	Rawデータ	-	42[参考値]	42	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
14	-	1	0.03 ppm W/V	8 週	Rawデータ	-	113	113	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
15	-	2	0.3 ppm W/V	2 週	Rawデータ	-	19	19	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
16	-	2	0.3 ppm W/V	2 週	Rawデータ	-	60	60	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
17	-	2	0.3 ppm W/V	3 週	Rawデータ	-	140	140	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
18	-	2	0.3 ppm W/V	3 週	Rawデータ	-	87	87	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0082
19	-	2	0.3 ppm W/V	4 週	Rawデータ	-	91	91	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	○	-		K0082
20	-	2	0.3 ppm W/V	4 週	Rawデータ	-	15	15	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	○	-		K0082
21	-	2	0.3 ppm W/V	6 週	Rawデータ	-	85	85	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	○	-		K0082
22	-	2	0.3 ppm W/V	6 週	Rawデータ	-	113	113	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	○	-		K0082
23	-	2	0.3 ppm W/V	8 週	Rawデータ	-	18	18	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	○	-		K0082
24	-	2	0.3 ppm W/V	8 週	Rawデータ	-	111	111	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	○	-		K0082