

(案)

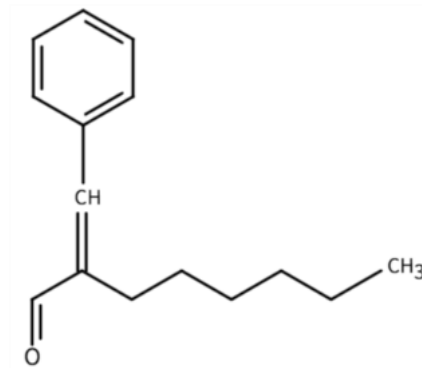
優先評価化学物質のリスク評価(一次)

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

2-ベンジリデンオクタナール

優先評価化学物質通し番号 199



令和7年9月

経済産業省

目 次

20		
21		
22	1 評価対象物質の性状.....	1
23	1-1 評価対象物質の設定.....	1
24	1-2 物理化学的性状及び濃縮性.....	2
25	1-3 分解性	5
26	2 出典	7
27		

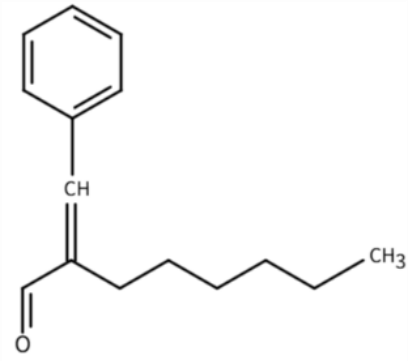
1 評価対象物質の性状

本章では、優先評価化学物質「2-ベンジリデンオクタナール」のリスク評価に用いる物理化学的性状データ、環境中における分解性に係るデータを示す。

1-1 評価対象物質の設定

評価対象物質は、2-ベンジリデンオクタナールとする。

表 1-1 評価対象物質の同定情報

評価対象物質名称	2-ベンジリデンオクタナール
構造式	
分子式	C ₁₅ H ₂₀ O
優先評価化学物質通し番号	199
CAS 登録番号	101-86-0

1-2 物理化学的性状及び濃縮性

下表に、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¹（以下「技術ガイダンス」という。）に従い精査し、モデル推計に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。なお、表中の下線部は、評価Ⅱにおいて精査した結果、評価Ⅰ相当の参考値²から変更した値を示している。

本評価対象物質の物理化学的性状等の精査において、測定データが信頼性の定まった情報源³から得られなかったため、採用値は基本的に推計値あるいは測定値か推計値か不明となっている。

表 1-2 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ

項目	単位	採用値※	採用値の概要	評価Ⅰ相当の参考値
分子量	—	216.33	—	216.33
融点	℃	22	算術平均値（元データが測定値か推計値か不明） ^{1, 2)}	22
沸点	℃	<u>234</u>	算術平均値（元データが測定値か推計値か不明） ^{1, 2)}	252
蒸気圧	Pa	<u>5.5</u>	MPBPWIN による 20℃における推計値 ³⁾	2.3
水に対する溶解度	mg/L	<u>4.92</u>	WSKOWWIN による推計値を 20℃に補正した値 ³⁾	4.67
1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)	—	<u>4.82</u>	KOWWIN による推計値 ³⁾	4.69
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	<u>242</u>	技術ガイダンス ⁴⁾ に従って、蒸気圧と水に対する溶解度から算出	0.766
有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)	L/kg	<u>2,301</u>	KOCWIN による推計値 ³⁾	1,940
生物濃縮係数 (BCF)	L/kg	<u>703.5</u>	BCFBAF による推計値 ³⁾	573.9
生物蓄積係数 (BMF)	—	2	技術ガイダンス ⁴⁾ に従って、logPow と BCF から設定	2
酸解離定数 (pKa)	—	—	環境条件下 (pH:5~9) では解離しないと考えられる	— ⁵⁾

※令和3年度第3回化審法のリスク評価等に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議（令和4年3月1日）で了承された値

1) CRC

2) PhysProp

3) EPI Suite (2012)

4) MHLW, METI, MOE (2014)

5) 評価Ⅰにおいては考慮しない

¹ 「I.4.4.2 物理化学的性状と生物蓄積性に係る追加的な情報収集」において、評価Ⅱでの追加的な情報収集について記載されている。

² 「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【改訂第1版】」に基づいて選定した値。

³ 「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【改訂第1版】」の「3.1 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報源。

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相当の参考値は、CRC 及び PhysProp に記載された値の算術平均値 (22 °C) である。CRC 及び PhysProp において測定値か推計値かの記載はなく不明であるが、これらは信頼性が高い情報源とされており、その他の得られた情報は MPBPWIN (v1.44) による推計値 (44.4 °C) のみであった。

したがって、評価Ⅱにおいても CRC 及び PhysProp に記載された値の算術平均値 (22 °C) を用いる。

② 沸点

評価Ⅰ相当の参考値は、CRC に記載された値 (252 °C) であるが、CRC において測定値か推計値かの記載はなく不明である。その他の信頼性が高いとされている情報源である PhysProp には、測定値か推計値かの記載はないが、15 mmHg において 175.05 °C と記載されており、この値の技術ガイダンスに基づく標準圧力 (101.3 kPa) での換算値は 215.12 °C である。

評価Ⅱにおいては、CRC に記載された値 (252 °C) と上記換算値 (215.12 °C) との算術平均値 (234 °C) を用いる。

③ 蒸気圧

評価Ⅰ相当の参考値は、MPBPWIN (v1.44) を用いた 20 °C における推計値 (2.3 Pa) である。また、信頼性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

評価Ⅱにおいては、沸点 (234 °C) を用いた 20 °C における MPBPWIN (v1.44) による推計値 (5.5 Pa) を用いる。

④ 水に対する溶解度

評価Ⅰ相当の参考値は、Aldrich に記載された 25 °C での値 (5 mg/L) を 20 °C に補正した値 (4.67 mg/L) であるが、測定値か推計値かの記載はなく不明である。

評価Ⅱにおいては、融点 (22 °C) 及び logPow (4.82) を用いた WSKOWWIN (v1.43) による 25 °C での推計値を 20 °C に補正した値 (4.92 mg/L) を用いる。

⑤ 1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)

評価Ⅰ相当の参考値は、Aldrich に記載された値 (4.69) であるが、測定値か推計値かの記載はなく不明である。また、その他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

評価Ⅱにおいては、KOWWIN (v1.69) による推計値 (4.82) を用いる。

⑥ ヘンリー係数

評価Ⅰ相当の参考値は、HENRYWIN (v3.21) による推計値 ($0.766 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$) である。

評価Ⅱにおいては、採用した水に対する溶解度が 1 mol/L 未満 ($2.3 \times 10^{-5} \text{ mol/L}$) であることから、技術ガイダンスに従って 20°C での蒸気圧 (5.5 Pa) と水に対する溶解度 (4.92 mg/L) から推計した値 ($242 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$) を採用する。

⑦ 有機炭素補正土壌吸着係数 (K_{oc})

評価Ⅰ相当の参考値は、KOCWIN (v2.01) による推計値 ($1,940 \text{ L/kg}$) である。

評価Ⅱにおいては、 $\log Pow$ (4.82) を用いた KOCWIN (v2.01) による推計値 ($2,301 \text{ L/kg}$) を用いる。

⑧ 生物濃縮係数 (BCF)

評価Ⅰ相当の参考値は、BCFBAF (v3.02) による推計値 (573.9 L/kg) である。

評価Ⅱにおいては、 $\log Pow$ (4.82) を用いた BCFBAF (v3.02) による推計値 (703.5 L/kg) を用いる。

⑨ 生物蓄積係数 (BMF)

評価Ⅰ相当の参考値は、 $\log Pow$ (4.69) 及び BCF (573.9 L/kg) から技術ガイダンスに従って設定した値 (2) である。また、BMF の測定値は得られなかった。

評価Ⅱにおいても、技術ガイダンスに従って $\log Pow$ (4.82) 及び BCF (703.5 L/kg) から設定した値 (2) を用いる。

⑩ 酸解離定数 (pK_a)

評価Ⅰにおいて解離定数は考慮しない。当該物質は環境条件下 ($pH: 5 \sim 9$) では、プロトンの放出や受け取りはないと考えられるため、評価Ⅱにおいても解離性を考慮しないこととする。

1-3 分解性

下表に、技術ガイダンスに従い精査し、モデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

表 1-3 分解に係るデータのまとめ

項目			半減期※ (日)	概要
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	0.42	AOPWIN ¹⁾ により推計した反応速度定数から、技術ガイダンス ²⁾ に従って算出
		オゾンとの反応	0.76	AOPWIN ¹⁾ により推計した反応速度定数から、技術ガイダンス ²⁾ に従って算出
		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	5	既存化学物質安全性点検における測定値 ³⁾ から技術ガイダンス ²⁾ に従って算出
		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	5	技術ガイダンス ²⁾ に従って、水中生分解と同程度と仮定
		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	20	技術ガイダンス ²⁾ に従って、水中生分解半減期の4倍と仮定
		加水分解	NA	

※令和3年度第3回化審法のリスク評価等に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議（令和4年3月1日）で了承された値

1) EPI Suite (2012)

3) METI (2012)

2) MHLW, METI, MOE (2014)

NA: 情報が得られなかったことを示す

上記分解項目について、精査概要を以下に示す。なお、分解に係る情報には、分解の機序ごとの速度定数又は半減期と、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「総括分解半減期」があり、各環境媒体の「総括分解半減期」に関する情報が得られない場合は、分解の機序別の情報を用いる。

① 大気

大気中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、OH ラジカル及びオゾンとの反応による機序別の半減期に関する情報が得られた。

①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

大気中における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値に関する情報は得られなかったため、AOPWIN (v1.93) により推計された $5.5 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ を半減期算出に採用す

る。この反応速度定数は PhysProp にも記載されている。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイドランスの $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半減期は 0.42 日と算出される。したがって、OH ラジカルとの反応の半減期はこの値 (0.42 日) を用いる。

① -2 オゾンとの反応の半減期

大気中におけるオゾンとの反応速度定数の測定値に関する情報は得られなかったため、AOPWIN (v1.93) により推計された $2.2 \times 10^{-17} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ を半減期算出に採用する。大気中オゾン濃度を技術ガイドランスの $7 \times 10^{11} \text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半減期は 0.76 日と算出される。したがって、オゾンとの反応の半減期はこの値 (0.76 日) を用いる。

② 水中

水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、機序別の生分解の半減期に関する情報が得られた。

② -1 生分解の半減期

METI (2012) において、被験物質濃度 100 mg/L、活性汚泥濃度 30 mg/L で 28 日間試験を行った結果、BOD 分解度、HPLC 分解度はそれぞれ 87%、99%であり、BOD 分解度から技術ガイドランスに従って換算した半減期は 5 日となる。したがって、生分解の半減期はこの値 (5 日) を用いる。

③ 土壌

土壌中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期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、技術ガイドランスに従って、水中の生分解半減期と同じ 5 日とする。

④ 底質

底質中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期に関する情報も得られなかった。

④ -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、底質中での生分解半減期は、技術ガイドランスに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 20 日とする。

2 出典

- 170
- 171
- 172 Aldrich: Sigma-Aldrich 試薬カタログ. <https://www.sigmaaldrich.com/> (2020-2-19 閲覧).
- 173 CRC: Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 98th ed., CRC Press, 2017-2018.
- 174 EPI Suite (2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11, 2012.
- 175 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.
- 176
- 177 METI (2012): 2-ベンジリデンオクタナール (被験物質番号 K-2051) の分解度試験成績報告書. 既存化学物質安全性点検, 2012.
- 178
- 179 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-12-11 閲覧).
- 180
- 181