

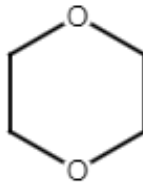
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

人健康影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

1, 4-ジオキサン

優先評価化学物質通し番号 80



令和7年9月

経済産業省

目 次

21		
22		
23	1 評価対象物質の性状.....	1
24	1-1 評価対象物質の設定.....	1
25	1-2 物理化学的性状及び濃縮性.....	2
26	1-3 分解性	6
27	2 出典	9
28		

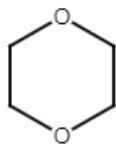
1 評価対象物質の性状

本章では、優先評価化学物質「1, 4-ジオキサン」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、1, 4-ジオキサンとする。

表 1-1 評価対象物質の同定情報

評価対象物質名称	1, 4-ジオキサン
評価対象物質構造	
分子式	C ₄ H ₈ O ₂
優先評価化学物質通し番号	80
CAS 登録番号	123-91-1

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。

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	—	88.11	—	88.1
融点	℃	<u>11.75</u>	101.3 kPa での測定値 ¹⁻³⁾	12
沸点	℃	<u>101.2</u>	101.3 kPa での測定値 ¹⁻³⁾	101.1
蒸気圧	Pa	<u>3,850</u>	20℃での測定値 ¹⁾	4,000
水に対する溶解度	mg/L	<u>(1 × 10⁶)</u>	混和 ^{1), 4)}	1 × 10 ⁶
1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)	—	<u>-0.42</u>	20℃での測定値 ¹⁾	-0.27
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	<u>0.49</u>	25℃での測定値 ^{2), 4)}	1.1
有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)	L/kg	<u>29</u>	3種類の土壌を用いた土壌吸着係数 (Kd) の測定値 0.17 と土壌中の有機炭素含有率 0.58 % からの計算値 ^{2), 5)}	23
生物濃縮係数 (BCF)	L/kg	0.6	技術ガイダンス ⁷⁾ に従って、既存化学物質安全性点検における測定値 ⁶⁾ から設定	0.6
生物蓄積係数 (BMF)	—	1	技術ガイダンス ⁷⁾ に従って、logPow と BCF から設定	1
酸解離定数 (pKa)	—	—	解離性の基を有さない物質	— ⁸⁾

※ 令和5年度第2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6年2月1日）で了承された値。

1) ECHA

2) HSDB

3) CRC

4) PhysProp

5) IUCLID (2000)

6) MITI (1975)

7) MHLW, METI, MOE (2014)

8) 評価Ⅰにおいては考慮しない

() は参考値

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、EU RAR (2002) に記載された測定値 12℃であり、IUCLID (2000) にある BASF (1995) のデータを採用しているが、測定条件等の詳細は記載がなく不明である。他には、Aldrich、ATSDR (1989)、CRC、HSDB 等、複数の情報源に標準気圧で 11℃～13℃の記載がある。ECHA では、HSDB や REAXYS、GESTIS 等のデータベースに採用

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。

されたこれらの値は信頼できるとしつつも、CRC のデータを採用した HSDB の値 11.75 °C (101.3 kPa) をキーパラメータとしている。

評価Ⅱにおいては、ECHA や HSDB と同様に CRC で採用された 11.75 °C (101.3 kPa) を用いる。

② 沸点

評価Ⅰ相当の参考値は、HSDB、NITE (2005)、Merck (2006) 及び MOE (2004) に記載された値 101.1 °C である。これは Merck (2001) や IPCS (1999) の値を採用しており、他にも ATSDR (1989)、CRC、HSDB、IUCLID (2000) 等、複数の報告書に標準気圧で 101 °C 付近の記載がある。ECHA では、HSDB や REAXYS 等のデータベースに採用されたこれらの値については信頼できるとしつつも、CRC のデータを採用した HSDB の値 101.2 °C (101.3 kPa) をキーパラメータとしている。

評価Ⅱにおいては、ECHA や HSDB と同様に CRC で採用された 101.2 °C (101.3 kPa) を用いる。

③ 蒸気圧

評価Ⅰ相当の参考値は、EU RAR (2002) に記載された値 4,000 Pa (20 °C) である。これは IUCLID (2000) にある BASF (1995) のデータを採用しているが、測定値か推定値か含め測定条件等も不明である。HSDB、PhysProp には 25 °C での測定値 5,080 Pa、Mackay (2006) には 25 °C での複数の測定値 5,333 Pa、5,065 Pa、4,932 Pa 等と記載されているほか、Aldrich や IUCLID (2000) 等にも複数の測定値が記載されていた。これらの多くは 20 °C での測定値に換算すると 3,000 Pa～4,000 Pa の範囲内に収まる値となる。また、ECHA では HSDB や REAXYS、GESTIS 等のデータベースに採用されたこれらの値については信頼できるとしつつも、REAXYS における Journal of American Chemical Society に掲載された Crenshaw et al. (1938) と Gallagher and Hibbert (1937) の 20 °C での測定値 3,850 Pa をキーパラメータとしている。

評価Ⅱにおいては、ECHA で採用された 20 °C での測定値 (3,850 Pa) を用いる。

④ 水に対する溶解度

評価Ⅰ相当の参考値は、PhysProp に記載された 20 °C での測定値 (1×10^6 mg/L) である。ECHA でも PhysProp のこの値を採用している他、Mackay (2006)、HSDB、IUCLID (2000) 等に”miscible in all proportions (あらゆる比率で混和)”という記載がある。

溶解度の上限が不明であることから、評価Ⅱにおいては、参考値として 1×10^6 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、EURAR (2002) に記載された測定値 (-0.27) であるが詳細な測定条件等は不明である。HSDB、IUCLID (2000)、MOE (2004)、NITE (2005)、PhysProp 等には測定値や推計値が記載されており、多くが-0.42~-0.27 の値である。また、ECHA では HSDB や REAXYS、GESTIS に採用されたこれらの値については信頼できるとしつつも、REAXYS における Perminova et al. (1998) らの 20 °Cでの測定値 (-0.42) をキーパラメータとしている。

評価Ⅱにおいては、ECHA で採用された 20 °Cでの測定値 (-0.42) を用いる。

⑥ ヘンリー係数

評価Ⅰ相当の参考値は、Mackay (2006) に記載された 25 °Cと 40 °Cのときの測定値の算術平均値 (1.1 Pa・m³/mol) である。ECHA、IUCLID (2000)、Mackay (2006) にはさまざまな温度での値が記載されているが多くが推定値と考えられる。HSDB、PhysProp には 25 °Cでの測定値 (0.49 Pa・m³/mol) が記載されている。

評価Ⅱにおいては、HSDB、PhysProp に記載された 25 °Cでの測定値 (0.49 Pa・m³/mol) を用いる。

⑦ 有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)

評価Ⅰ相当の参考値は、ATSDR (1989) (測定値か推計値か不明) と HSDB (測定値であるが出典が不明) に記載された値の算術平均値 (23 L/kg) である。HSDB と IUCLID (2000) にはカナダ、オンタリオ州の埋立地から採取した灰色粘土土壌 (粘土 45 %、シルト 43 %、砂 10 %) で測定された Kd の測定値 (0.17 L/kg) が示され、この測定値から土壌中の有機炭素を 0.58 %として計算した Koc (29 L/kg) が記載されている。

評価Ⅱにおいては、測定条件が示されている HSDB と IUCLID (2000) に記載された Koc (29 L/kg) を用いる。

⑧ 生物濃縮係数 (BCF)

評価Ⅰ相当の参考値は、MITI (1975) に記載された測定値から算出した値であり、この試験においては定常状態での値が得られていないため、技術ガイダンスに従って BCF (0.6 L/kg) としている。

評価Ⅱにおいても、他に BCF の測定値は得られなかったため、技術ガイダンスに従って BCF (0.6 L/kg)を用いる。

⑨ 生物蓄積係数 (BMF)

評価Ⅰ相当の参考値は、logPow (-0.27) 及び BCF (0.6 L/kg) から技術ガイダンスに従って設定した値 (1) である。

評価Ⅱにおいては、BMF の測定値は得られなかったため、技術ガイダンスに従って logPow

126 (-0.42) 及び BCF (0.6 L/kg) から設定した値 (1) を用いる。

127

128 ⑩ 酸解離定数 (pKa)

129 評価Ⅰにおいては解離を考慮しないため、参考値は設定されていない。また、1, 4-
130 ジオキサンには加水分解に敏感な官能基は含まれておらず加水分解は予想されない。

131 このため、評価Ⅱにおいても、本物質については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半減期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	1.5	技術ガイダンス ¹⁾ に従って、反応速度定数の測定値 ^{2), 3)} から算出した値の算術平均値
		オゾンとの反応	—	分解寄与基を有さない物質
		硝酸ラジカルとの反応	104	技術ガイダンス ¹⁾ に従って、25℃での反応速度定数の測定値 ⁴⁾ から算出
水中	水中における総括分解半減期		NA	
	機序別の半減期	生分解	10,000	技術ガイダンス ¹⁾ に従って、分解度試験の結果 ^{5), 6)} から算出
		加水分解	NA	
		光分解	—	紫外線の吸収が非常に弱く、直接光分解は重要な環境運命プロセスではないとの記載あり ⁴⁾
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	技術ガイダンス ¹⁾ に従って、水中生分解半減期と同程度と仮定
		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	40,000	技術ガイダンス ¹⁾ 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5年度第2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6年2月1日）で了承された値

1) MHLW, METI, MOE (2014)

2) EU RAR (2002)

3) NITE (2005)

4) HSDB

5) ECHA

6) MITI (1975)

NA: 情報が得られなかったことを示す

—: 考慮する必要がないと考えられることを示す

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、機序別の半減期について、OH ラジカル、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応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ついて、EU RAR (2002) や NITE (2005) から $10.8 \pm 1.3 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/\text{molecule}/\text{sec}$ 及び $1.09 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{molecule}/\text{sec}$ という情報が得られた。技術ガイダンスに記載された OH ラジカルの濃度 ($5 \times 10^5 \text{ molecule}/\text{cm}^3$) を用いた半減期を算術平均し、1.5 日とする。

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ついて、IUCLID (2000) から $6.81 \text{ cm}^3/(\text{molecule} \times \text{sec})$ という情報が得られた。当該値と技術ガイダンスに記載されたオゾンの濃度 ($7 \times 10^{11} \text{ molecule}/\text{cm}^3$) を用いて半減期を計算すると 1.7×10^{-18} 日となる。

しかし、一般的には、オゾンはオレフィン系やアセチレン系化合物の分解に寄与すると考えられ、1, 4-ジオキサンはそれらの官能基を持たないのでこのような短い半減期になるとは考えにくい。したがって、オゾンとの反応の半減期は設定しない。

①-3 硝酸ラジカルとの反応の半減期

大気中における硝酸ラジカルとの反応速度定数の 25°C での測定値について、HSDB から $3.2 \times 10^{-16} \text{ cm}^3/\text{molecule}/\text{sec}$ という情報が得られ、技術ガイダンスに記載された硝酸ラジカルの濃度 ($2.4 \times 10^8 \text{ molecule}/\text{cm}^3$) を用いると半減期は 104 日と算出される。したがって、硝酸ラジカルとの反応の半減期は 104 日とする。

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、機序別の半減期について、生分解と光分解に関する情報が得られた。

②-1 生分解の半減期

MITI (1975) において被験物質濃度 $100 \text{ mg}/\text{L}$ 、活性汚泥濃度 $30 \text{ mg}/\text{L}$ で 28 日間試験を行った結果、BOD 分解度が 0 %、GC による直接定量に基づく分解度が 1 %で難分解性と判定されている。また、ECHA のキースタディである OECD TG310 に基づく GLP 試験では、被験物質濃度 $37.1 \text{ mg}/\text{L}$ (Based on test mat.) で試験を行った結果、 CO_2 発生量に基づく分解度は 2 %であった。なお、ECHA によると 1, 4-ジオキサンの微生物に対する影響濃度 (EC5) は $2,700 \text{ mg}/\text{L}$ とあり、これら分解度試験には微生物の阻害影響はないと考えられる。

上記のほかに、ECHA の OECD TG301F に基づく非 GLP 試験では被験物質濃度 $100 \text{ mg}/\text{L}$ で試験を行った結果、 O_2 消費量に基づく分解度は $< 10\%$ であった。また、ECHA の本質的分解性を判断する OECD TG302B に基づく非 GLP 試験では被験物質濃度 $400 \text{ mg-DOC}/\text{L}$ で試験を行った結果、DOC の消失率が約 40 %という結果が記載されているが、減少が見られたのは生分解ではなく、ばっ気に起因するとされており、本質的分解性の物質でもないと考えられる。

以上より、1, 4-ジオキサンは易分解性でも本質的分解性でもないと考えられるため、技術ガイダンスに従って 10,000 日とする。

185 なお、Howard (1991) には水中での好氣的生分解の半減期として専門家判断による 28-180
186 日というデータがあったが、技術ガイダンスに従って分解度から導出した半減期 (10,000
187 日) との何れが適切であるか判断できなかったため、安全側の値を採用とした。

188 また、HSDB には自然環境における 1, 4-ジオキサン(100 mg/L)の生分解性を評価するため、河川
189 水、活性汚泥、化学工場排水土壌、庭土等の合計 20 種類の環境試料を用いた 1, 4-ジオ
190 キサン分解試験の記述があり、20 試料中 14 試料は 1, 4-ジオキサンを分解できなかった
191 が、化学工場排水土壌試料は 1, 4-ジオキサン(100 mg/L)を 33 日以内に<0.8 mg/L まで分
192 解することができたとしている。順化・馴養されたような環境では 1, 4-ジオキサンの分
193 解菌もいると考えられ、10,000 日という設定はかなり安全側の値を採用していると考えら
194 れる。

195 ②-2 光分解の半減期

196 HSDB では、水中に生成した OH ラジカル(濃度: 1×10^{-17} molecule/L)との光酸化反応の半
197 減期として 286 日という結果が記載されているが、1, 4-ジオキサンは紫外線の吸収が非
198 常に弱く、水中光分解試験結果から、直接光分解は重要な環境運命プロセスではないとの記
199 載もある。

200 一般的に、河川や海水等の天然水中では OH ラジカルは過酸化水素や硝酸イオン等との
201 光化学反応により生成されることが知られており、OH ラジカルとの反応は主に水中の表層
202 でのみ起きていると考えられる。このため、HSDB にある 286 日という実験室での測定に基
203 づく半減期を、水深により光の到達率が異なる実際の水環境にはそのまま適用できない。し
204 たがって、水中における光分解の半減期は設定しない。

206 ③ 土壌

207 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
208 る情報も得られなかった。

209 ③-1 生分解の半減期

210 半減期に関するデータは得られなかったため、土壌中での生分解による半減期は、技術ガ
211 イダンスに従って、水中の生分解半減期と同じ 10,000 日とする。

213 ④ 底質

214 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
215 る情報も得られなかった。

216 ④-1 生分解の半減期

217 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
218 ンスに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 40,000 日とする。

219 **2 出典**

220

221 Aldrich: Sigma-Aldrich 試薬カタログ <https://www.sigmaaldrich.com/>

222 ATSDR (1989): Agency for Toxic Substances and Disease Registry. “Toxicological Profile for 1,4-
223 dioxane”, Toxicological Profiles. 1989.

224 BASF (1995): BASF AG, Sicherheitsdatenblatt Dioxan rein (27.06.1995)

225 Crenshaw, et al., (1938): Crenshaw, J.L.; Cope, A.C.; Finkelstein, N. et al., The Dioxanates of the
226 Mercuric Halides, J. Am. Chem. Soc., 1938, 60, 10, 2308-2311

227 CRC: Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 98th ed., CRC Press, 2017.

228 ECHA: Information on Chemicals - ECHA (europa.eu), (2023/12 調査).

229 <https://echa.europa.eu/information-on-chemicals>

230 EU RAR (2002): ECB, 1,4-dioxane (CAS No.: 123-91-1, EINECS No.: 204-661-8)

231 Gallagher and Hibbert, (1937): Gallagher, A.F.; Hibbert, H., Studies on reactions relating to
232 carbohydrates and polysaccharides. LV. Vapor pressures of the polyethylene glycols and their
233 derivatives, J. Am. Chem. Soc., 1937, 59, 2521-2525.

234 GESTIS: GESTIS Substance Database, GESTIS Substance Database (dguv.de). [https://gestis-
235 database.dguv.de/](https://gestis-database.dguv.de/)

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

238 HSDB: Hazardous Substances Data Bank (HSDB) - PubChem Data Source (nih.gov) (2023/12 調
239 査). <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/source/11933>

240 IPCS (1999): International Programme on Chemical Safety (1999) ICSC, International Chemical
241 Safety Cards, Geneva.

242 IUCLID (2000): EU ECB. IUCLID Dataset, 1,4-dioxane. 2000.

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

245 Merck (2001): The Merck Index, 13th Ed, Merck & Co, 2001

246 Merck (2006): The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006

247 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
248 ダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

249 MITI (1975): 1, 4-ジオキサン (試料 No.K-110)の分解度試験成績報告書. 既存化学物質
250 安全性点検, 1975.

251 MOE (2004): 化学物質の環境リスク評価 第2巻, 1, 4-ジオキサン. 2004.

252 NITE (2005): 化学物質の初期リスク評価書, 1, 4-ジオキサン. Ver. 1.0, No. 13, 2005.

253 Perminova et al. (1998): Crenshaw, J.L.; Perminova Irina V., Frimmel Fritz H., Kovalevskii Dmitrii
254 V., Abbt-Braun Gudrun, Kudryavtsev Alexey V., Hesse Sebastian, Water Res., EN, 32, 3, 1998, p 872|-
255 881

256 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database.

257 REAXYS: Reaxys | An expert-curated chemical database | Elsevier.
258 <https://www.elsevier.com/products/reaxys>
259