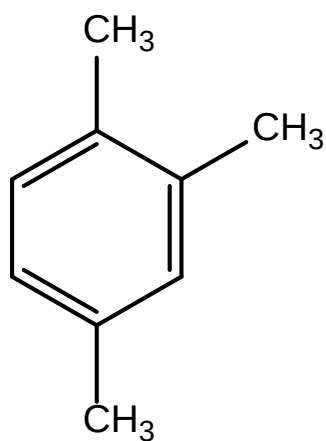


優先評価化学物質のリスク評価(一次)

生態影響に係る評価Ⅱ

1, 2, 4-トリメチルベンゼン

優先評価化学物質通し番号 49



平成 27 年 7 月

厚生労働省

経済産業省

環 境 省

目 次

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

1	5-2-3 環境モニタリングデータ	38
2	5-3 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	39
3	5-4 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	39
4	5-4-1 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	
5	利用）	39
6	（1）推計条件	39
7	（2）推計結果	40
8	5-4-2 環境中濃度等の空間的分布の推計（PRTR 情報の利用）	40
9	（1）推計条件	40
10	（2）環境中濃度の推計結果	43
11	① 全排出量	43
12	② 化審法対象範囲	45
13	（3）環境中分配比率等の推計結果	47
14	（4）G-CIEMS の推計結果とモニタリングデータとの比較解析	47
15	5-4-3 環境モニタリング情報に基づく評価	48
16	（1）水生生物	48
17	（2）底生生物	48
18	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	48
19	5-5-1 総括残留性	49
20	5-5-2 定常到達時間の推計	51
21	5-6 暴露評価とリスク推計に関する不確実性解析	52
22	5-6-1 不確実性解析の概要	52
23	5-6-2 評価対象物質	55
24	5-6-3 物理化学的性状等	56
25	5-6-4 PRTR 情報等の不確実性	56
26	5-6-5 排出量推計の不確実性	56
27	5-6-6 暴露シナリオの不確実性	56
28	6 まとめと結論	58
29	6-1 有害性評価	58
30	6-2 暴露評価とリスク推計	58
31	6-2-1 排出源ごとの暴露シナリオによる評価	58
32	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	58
33	（1）環境中濃度の空間的分布の推計	58
34	（2）環境モニタリング情報に基づく評価	59
35	① 水生生物	59
36	② 水生生物	60
37	6-3 考察とまとめ	60
38	6-4 補足事項	61
39	7 【付属資料】	62
40	7-1 参照した技術ガイダンス	62
41	7-2 物理化学的性状等一覧	62
42	7-3 Reference chemical の物理化学的性状等の情報源等	63
43	7-4 環境モニタリングデータとモデル推計結果の比較解析	65

1	(1) 地点別のモニタリング濃度と G-CIEMS のモデル推計濃度との比較.....	65
2	(2) 地点別のモニタリング濃度と PRAS-NITE のモデル推計濃度との比較.....	66
3	7-5 生態影響に関する有害性評価Ⅱ	67
4	7-5-1 各キースタディの概要	67
5	(1) 水生生物	67
6	7-5-2 平衡分配法による PNEC _{sed} の算出	67
7	7-5-3 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	68
8	(1) 既存のリスク評価書における有害性評価の結果	68
9	(2) 水生生物保全に関する基準値等の設定状況	69
10	(3) 出典.....	69
11		
12		

1 化学物質のプロファイル

1-1 優先評価化学物質等の情報等

優先評価化学物質「1, 2, 4-トリメチルベンゼン」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、「化審法」という。）に係わる情報を表 1-1 に示す。

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	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
優先評価化学物質通し番号	49
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	3-7 : トリ又はテトラメチルベンゼン 3-3427 : トリアルキル(C=1~4)ベンゼン
過去の物質区分	既存化学物質 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
既存化学物質安全性点検結果(生態影響)	未実施
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

(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、ブロック重合物、グラフト重合物等)及び優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、環保企発第 110331007 号)

国内におけるその他の関連法規制情報を表 1-2 に示す。

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)		1, 2, 4-トリメチルベンゼン : 第一種指定化学物質 1-296
(旧)化管法 (平成 21 年 9 月 30 日まで)		—
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	トリメチルベンゼン、対象となる範囲 ≥ 1 (重量%): 政令第 18 条の 2 別表第 9 の 404
	化学物質の有害性の調査	—
化学兵器禁止法		—

国内における関係法規制	対象
オゾン層保護法	—
大気汚染防止法	—
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),

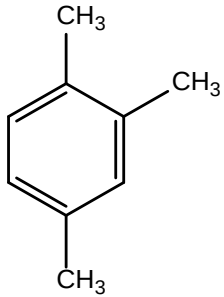
URL : <http://www.safe.nite.go.jp/japan/db.html>,

平成 27 年 5 月 28 日に CAS 登録番号 95-63-6 で検索

1-2 評価対象物質の同定情報

評価対象とする 1, 2, 4-トリメチ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	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
構造式	
分子式	C ₉ H ₁₂
CAS 登録番号	95-63-6

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 1, 2, 4-トリメチ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。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	—	120.2	—	120.2
融点	℃	-43.8 ²⁾	測定値か推計値か不明	-43.8 ²⁾
沸点	℃	<u>169.2⁴⁾</u>	複数データの算術平均値	169.4 ³⁾
蒸気圧	Pa	198.5 ^{3, 5, 6)}	25℃の測定値を 20℃の値に補正	198.5 ^{3, 5, 6)}
水に対する溶解度	mg/L	<u>51.6⁵⁾</u>	複数の 25℃の測定値の算術平均値を 20℃の値に補正	52.7 ⁵⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	3.78 ^{3, 5, 6)}	HPLC 法による測定値	3.78 ^{3, 5, 6)}
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	<u>624.2^{6, 7)}</u>	25℃での測定値	704 ⁵⁾
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	537 ⁶⁾	測定値	537 ⁶⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	<u>171⁸⁾</u>	既存化学物質安全性点検での試験結果	159.33 ⁸⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ⁹⁾	1
解離定数	—	—	解離性の基を有さない物質	— ¹⁰⁾

1) 平成 26 年度第 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 27 年 1 月 26 日）で了承された値

2) CRC(2013)

3) MOE(2009)

4) NIST

5) Mackay(2006)

6) HSDB

7) PhysProp

8) MITI(1976)

9) MHLW, METI, MOE(2014)

10) 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、複数の信頼性の定まった情報源¹⁾(CRC 2013, PhysProp, MOE 2009)に記載されたデータである。評価Ⅱにおいても、この値(-43.8℃)を用いる。

¹⁾「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」の「3.1 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報源のこと。

②沸点

評価Ⅰで用いたデータは、化学物質の環境リスク初期評価 (MOE 2009) に記載された標準圧力 (101,325 Pa)でのデータ (169.4℃) である。

複数の信頼性の定まった情報源 (CRC 2013, HSDB, PhysProp, Mackay 2006, CCD 2007) では 168.89℃または 169.38℃の記載が多いが、評価Ⅱにおいては、同じく信頼性の定まった情報源 (NIST) に記載されている 34 データの内、重複が認められるものや NIST において平均値を算出する際に除外されたものを除いた 28 データの算術平均値 169.2℃を用いる。

③蒸気圧

評価Ⅰで用いたデータは、信頼性の定まった複数の情報源 (MOE 2009, Mackay 2006, HSDB) に記載されている測定値 (280 Pa) を 20℃に補正した値 (198.5 Pa) である。評価Ⅱにおいても、この値 (198.5 Pa) を用いる。

④水に対する溶解度

評価Ⅰで用いたデータは、信頼性の定まった情報源 (Mackay 2006) に記載されている複数の 25℃の測定データ 57 mg/L (shake flask 法)、59 mg/L (shake flask 法)、51.9 mg/L (shake flask 法)、51.9 mg/L (shake flask 法)及び 56.5 mg/L (vapor saturation 法)の中央値 (56.5 mg/L) を 20℃に補正した値 (52.7 mg/L) である。

評価Ⅱでは、上記の測定データの算術平均値 (55.3 mg/L) を 20℃に補正した値 (51.6 mg/L)を用いる。

⑤logPow

評価Ⅰで用いたデータは、信頼性の定まった複数の情報源 (MOE 2009, Mackay 2006, HSDB) に記載されている HPLC 法での測定値 (3.78) である。評価Ⅱにおいても、この値 (3.78) を用いる。

⑥ヘンリー係数

評価Ⅰで用いたデータは、信頼性の定まった情報源 (Mackay 2006) に記載されている 27℃での測定値 (704 Pa・m³/mol) である。

評価Ⅱにおいては、信頼性の定まった複数の情報源 (HSDB, PhysProp) に記載された 25℃での測定値 (624.2 Pa・m³/mol) を用いる。

⑦Koc

評価Ⅰで用いたデータは、信頼性の定まった情報源 (HSDB) に記載された測定値であり、評価Ⅱにおいても、この値 (537 L/kg) を用いる。なお、KOCWIN (v2.00) の MCI 法による推計値は、614.3 L/kg であった。

⑧BCF

評価Ⅰで用いたデータは、既存化学物質安全性点検 (MITI 1976) の濃縮度試験における高濃度区 (0.2 ppm)の後半 3 回の算術平均値 (159.33 L/kg) である。

評価Ⅱにおいては、化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。) に従い、複数濃度区における後半 3 回の測定値の算術平均の最大値である低濃度区 (0.02 ppm) の算術平均値 (171 L/kg) を採用する。

1
2
3
4
5
6

⑨BMF

評価Ⅰで採用した BMF は、logPow と BCF の値から技術ガイダンスに従って設定した値である。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）を用いる。

2-2 分解性

1, 2, 4-トリメチ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 に示す。

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。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 章に記載している。

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	23℃で測定された反応速度定数 ²⁾ から OH ラジカル濃度 5×10^5 molecule/cm ³ として算出
		オゾンとの反応	24℃で測定された反応速度定数 ²⁾ からオゾン濃度 7×10^{11} molecule/cm ³ として算出
		硝酸ラジカルとの反応	23℃で測定された反応速度定数 ^{2,3)} から硝酸ラジカル濃度 2.4×10^8 molecule/cm ³ として算出
水中	水中における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	科学的判断に基づいて既報データから選択された値 ⁴⁾
		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	科学的判断に基づいて既報データから選択された値 ⁴⁾
		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	水中の生分解半減期の 4 倍と仮定
		加水分解	NA

1) 平成 26 年度第 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 27 年 1 月 26 日）で了承された値

2) NIST

3) Mackay (2006)

4) Howard (1991)

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、「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とを示す。

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が、機序別の半減期についての情報が得られた。

①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

信頼性の定まった情報源 (NIST) では、23℃での測定データとして、 $(3.25 \pm 0.482) \times 10^{-11}$

cm³/molecule/s (相対法)、25℃での測定データとして、 $(4.0 \pm 0.448) \times 10^{-11}$ cm³/molecule/s (フラッシュ光分解-共鳴蛍光法) と $(3.32 \pm 0.133) \times 10^{-11}$ cm³/molecule/s (相対法) が記載されている。20℃により近い 23℃での測定値 $(3.25 \pm 0.482) \times 10^{-11}$ cm³/molecule/s を半減期算出に採用する。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの 5×10^5 molecule/cm³ とした場合、半減期は 0.5 日と算出される。この値 (0.5 日) を大気に適用する。

①-2 オゾンとの反応の半減期

信頼性の定まった情報源 (NIST) では、直接法で測定された 24℃の反応速度定数データ $(1.3 \pm 0.299) \times 10^{-21}$ cm³/molecule/s が記載されている。これ以外の情報がないため、この値 (1.3×10^{-21} cm³/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ダンスの 7×10^{11} molecule/cm³ とした場合、半減期は 8,816 日と算出される。この値 (8,816 日) を大気に適用する。

①-3 硝酸ラジカルとの反応の半減期

複数の信頼性の定まった情報源 (NIST, Mackay 2006) では、相対法による 23℃での反応速度定数の測定データ $(5.4 \pm 2.49) \times 10^{-16}$ cm³/molecule/s が記載されている。これ以外にも 2.7×10^{-15} cm³/molecule/s と 1.8×10^{-15} cm³/molecule/s が Mackay (2006) に記載されているが、試験法、試験条件に関する情報がないため、NIST の値 (5.4×10^{-16} cm³/molecule/s) を半減期算出に採用する。大気中硝酸ラジカル濃度を技術ガイダンスの 2.4×10^8 molecule/cm³ とした場合、半減期は 62 日と算出される。この値 (62 日) 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、生分解に関する情報が得られた。

②-1 生分解の半減期

信頼性の定まった情報源 (Howard 1991, Mackay 2006) では、7~28 日の水中での好気的な生分解半減期が記載されている。

既存化学物質安全性点検 (MITI 1980) では、難分解性 (4 週間後の分解度、20%未満) と判定されているため、生分解の半減期は、上記範囲の最大値 28 日を採用する。この半減期 (28 日) を溶存態および吸着態の両方に適用する。

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が、生分解に関する情報が得られた。

③-1 生分解の半減期

信頼性の定まった情報源 (Howard 1991, Mackay 2006) では、7~28 日の土壌中での好気的な生分解半減期が記載されている。

既存化学物質安全性点検 (MITI 1980) では、難分解性と判定されているため、生分解の半減期は、上記範囲の最大値 28 日を採用する。この半減期 (28 日) を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

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 112 日と設定する。

- 1 この半減期は、溶存態および吸着態の両方に適用する。
- 2

3 排出源情報

3 章では1, 2, 4-トリメチ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1, 2, 4-トリメチ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

1, 2, 4-トリメチルベンゼンは、平成22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。

1, 2, 4-トリメチルベンゼンの平成22年度から平成24年度までの3年間の製造数量、輸入数量を図3-1に示す。1, 2, 4-トリメチルベンゼンは、約30,000トンから40,000トンまでの間で製造されており、約300トンから約4,000トンまでの間で輸入されている。1, 2, 4-トリメチルベンゼンの製造数量、輸入数量は平成22年度から平成24年度の間ほぼ横ばいであった。

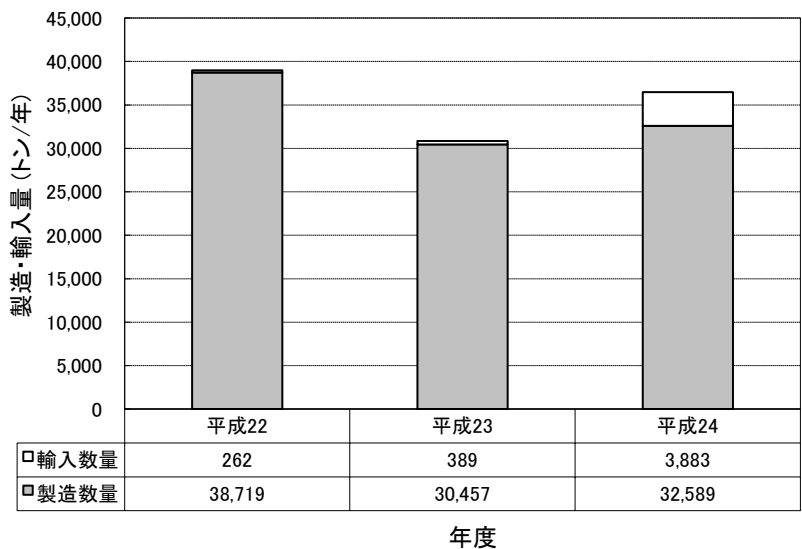


図 3-1 製造・輸入数量の経年変化

平成22年度から平成24年度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24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』、『塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤・塗料用溶剤、塗料希釈剤』、『金属洗浄用溶剤-その他』、『工業用溶剤・合成反応用溶剤』、『工業用溶剤・希釈溶剤』、『燃料、燃料添加剤・燃料』等の13用途であった。

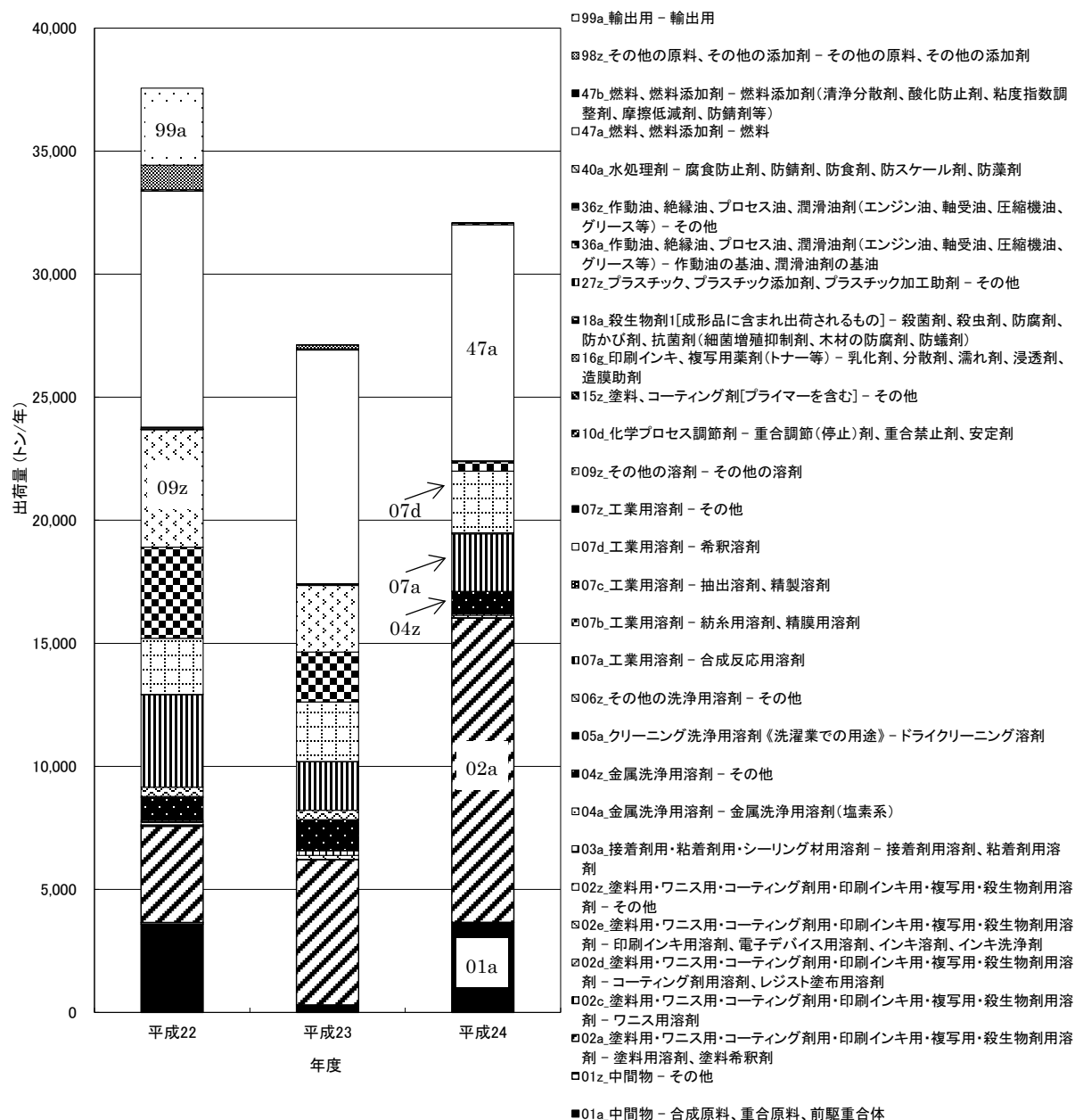


図 3-2 年度別用途別出荷量

注：本評価の際に、平成 24 年度は用途を精査した

平成 24 年度の化審法届出情報を用いてリスク推計を行うため、1，2，4-トリメチ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 24 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1	調合 段階2	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	9	-	-	9	9
02-a	塗料用・ワニス用・ コーティング剤用・ 印刷インキ用・複写 用・殺生物剤用溶 剤	塗料用溶剤、塗料希 釈剤	32	32	-	32	64
02-c	塗料用・ワニス用・ コーティング剤用・ 印刷インキ用・複写 用・殺生物剤用溶 剤	ワニス用溶剤	2	2	-	2	4
02-d	塗料用・ワニス用・ コーティング剤用・ 印刷インキ用・複写 用・殺生物剤用溶 剤	コーティング剤用溶 剤、レジスト塗布用溶 剤	1	1	-	1	2
02-e	塗料用・ワニス用・ コーティング剤用・ 印刷インキ用・複写 用・殺生物剤用溶 剤	印刷インキ用溶剤、電 子デバイス用溶剤、イ ンキ溶剤、インキ洗浄 剤	8	8	-	8	16
03-a	接着剤用・粘着剤 用・シーリング材用 溶剤	接着剤用溶剤、粘着 剤用溶剤	9	9	-	9	18
04-z	金属洗浄用溶剤	その他	17	17	-	17	34
05-a	クリーニング洗浄用 溶剤《洗濯業での 用途》	ドライクリーニング溶剤	2	2	-	2	4
07-a	工業用溶剤	合成反应用溶剤	7	7	-	7	14
07-b	工業用溶剤	紡糸用溶剤、精膜用 溶剤	2	2	-	2	4
07-d	工業用溶剤	希釈溶剤	18	18	-	18	36
07-z	工業用溶剤	その他	6	6	-	6	12
36-a	作動油、絶縁油、プ ロセス油、潤滑油剤	作動油の基油、潤滑 油剤の基油	2	2	-	2	4

	(エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等)						
47-a	燃料、燃料添加剤	燃料	6	-	6	-	6
47-b	燃料、燃料添加剤※	燃料添加剤(清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等)	12	12	12	-	24
			製造事業所数				
	製造		13				13
計							264

※燃料添加物等の成分となる化学物質を配合する段階を調合段階 1、燃料に燃料添加物等を配合する段階を調合段階 2 と設定している。

表 3-2 1, 2, 4-トリメチ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		調合段階 2		工業的使用段階		家庭用・業務用での使用段階	
		大気	水域	大気	水域	大気	水域	大気	水域
01-a	中間物	-	-	-	-	0.0005	0.00005	-	-
02-a	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	0.0025	0.000025	-	-	0.5	0.00001	-	-
02-c	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	0.0025	0.000025	-	-	0.6	0.00001	-	-
02-d	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	0.0025	0.000025	-	-	0.6	0.00001	-	-
02-e	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	0.0025	0.000025	-	-	0.5	0.00001	-	-

	物剤用溶剤								
03-a	接着剤用・粘着剤用・シーリング材用溶剤	0.0025	0.000025	-	-	0.5	0.00005	-	-
04-z	金属洗浄用溶剤	0.0025	0.000025	-	-	0.01	0.00001	-	-
05-a	クリーニング洗浄用溶剤《洗濯業での用途》	0.0025	0.000025	-	-	0.05	0.00001	-	-
07-a	工業用溶剤	0.0001	0.0001	-	-	0.05	0.0001	-	-
07-b	工業用溶剤	0.0001	0.0001	-	-	0.1	0.002	-	-
07-d	工業用溶剤	0.0001	0.0001	-	-	0.2	0.0001	-	-
07-z	工業用溶剤	0.0001	0.0001	-	-	0.2	0.002	-	-
36-a	作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤（エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等）	0.00025	0.000001	-	-	0.0005	0.000005	-	-
47-a	燃料、燃料添加剤	-	-	0.00001	0.000001	-	-	0.00001	0
47-b	燃料、燃料添加剤	0.00005	0.000001	0.00001	0.000001	-	-	0.00001	0
コード		製造段階							
	製造	0.00005	0.000001						

なお、『作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤（エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等）-作動油の基油、潤滑油剤の基油』の大気・調合段階 1 及び大気・工業的使用段階の排出係数（蒸気圧区分 4（100-1000 Pa））は設定されていないため、排出係数の検討を実施した。『作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤（エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等）-作動油の基油、潤滑油剤の基油』の大気・調合段階 1 及び大気・工業的使用段階の排出係数（蒸気圧区分 1（＜1 Pa）、蒸気圧区分 2（1-10 Pa））は『作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤（エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等）-作動油添加剤、潤滑油剤添加剤』の同じ蒸気圧区分の排出係数を準用しており、双方の排出形態は類似していると考えられることから、蒸気圧区分 4 についても『作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤（エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等）-作動油添加剤、潤滑油剤添加剤』の同じ蒸気圧区分の排出係数を準用することとした。

1, 2, 4-トリメチルベンゼンの製造箇所は 13 箇所、詳細用途別都道府県別出荷先の数は 133 である。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、264 箇所と仮定される。

平成 24 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図

3-3 及び表 3-3 に示す。参考のため、平成 22 及び 23 年度の推計排出量も示す。平成 24 年度の推計排出量の合計は約 7,000 トンと推計され、『塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤・塗料用溶剤、塗料希釈剤』用途からの排出が最も多かった。また、大気への排出は、水域への排出の約 2,700 倍であった。

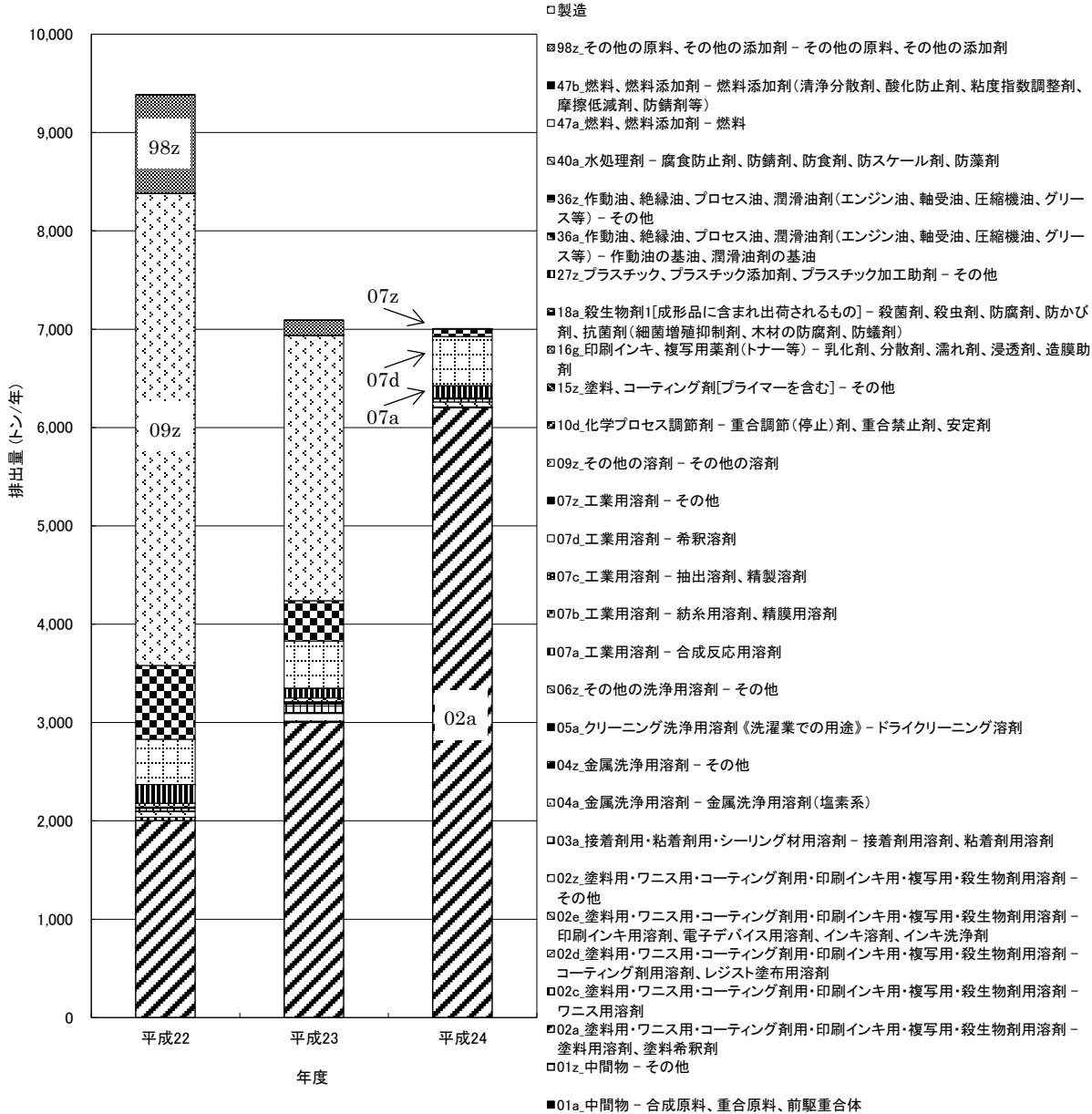


図 3-3 年度別推計排出量

注：本評価の際に、平成 24 年度は用途を精査した

表 3-3 年度別推計排出量の内訳

用途番号 -詳細用途番号	用途分類	詳細用途分類	推計排出量(トン／年)		
			平成 22 年度	平成 23 年度	平成 24 年度
	製造		2.0	1.6	1.7
01-a	中間物	合成原料、重合原料、前駆重合体	2.0	2.0	2.0
01-z	中間物	その他	0.11	0	0
02-a	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	塗料用溶剤、塗料希釈剤	2000	3000	6200
02-c	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	ワニス用溶剤	35	12	6.6
02-d	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	コーティング剤用溶剤、レジスト塗布用溶剤	0.60	0	1.2
02-e	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	印刷インキ用溶剤、電子デバイス用溶剤、インキ溶剤、インキ洗浄剤	55	79	51
02-z	塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤	その他	1.2	0	0
03-a	接着剤用・粘着剤用・シーリング材用溶剤	接着剤用溶剤、粘着剤用溶剤	34	95	30
04-a	金属洗浄用溶剤	金属洗浄用溶剤(塩素系)	0	7.0	0
04-z	金属洗浄用溶剤	その他	12	16	11
05-a	クリーニング 洗浄用 溶 剤 《洗濯業での用途》	ドライクリーニング溶剤	2.1	0.26	0.37
06-z	その他の洗浄用溶剤	その他	38	38	0
07-a	工業用溶剤	合成反応用溶剤	190	100	120
07-b	工業用溶剤	紡糸用溶剤、精膜用溶剤	0	0.41	4.3
07-c	工業用溶剤	抽出溶剤、精製溶剤	0.30	0	0
07-d	工業用溶剤	希釈溶剤	460	480	500
07-z	工業用溶剤	その他	750	410	77
09-z	その他の溶剤	その他の溶剤	4800	2700	0
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	0.027	0.016	0

15-z	塗料、コーティング剤[プライマーを含む]	その他	0.0040	0.0080	0
16-g	印刷インキ、複写用薬剤(トナー等)	乳化剤、分散剤、濡れ剤、浸透剤、造膜助剤	0	0.0035	0
18-a	殺生物剤 1[成形品に含まれ出荷されるもの]	殺菌剤、殺虫剤、防腐剤、防かび剤、抗菌剤(細菌増殖抑制剤、木材の防腐剤、防蟻剤)	0.14	0	0
27-z	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	0.078	0.41	0
36-a	作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤(エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等)	作動油の基油、潤滑油剤の基油	0	0	0.029
36-z	作動油、絶縁油、プロセス油、潤滑油剤(エンジン油、軸受油、圧縮機油、グリース等)	その他	0.036	0.018	0
40-a	水処理剤	腐食防止剤、防錆剤、防食剤、防スケール剤、防藻剤	0.29	0.36	0
47-a	燃料、燃料添加剤	燃料	0.20	0.20	0.11
47-b	燃料、燃料添加剤	燃料添加剤(清浄分散剤、酸化防止剤、粘度指数調整剤、摩擦低減剤、防錆剤等)	0.0044	0.0041	0.0042
98-z	その他の原料、その他の添加剤	その他の原料、その他の添加剤	1000	150	0
計			9383	7092	7005

1 注：本評価の際に、平成 24 年度は用途を精査した

2

3-2 PRTR 情報

化管法に基づく「平成 24 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」（以下、平成 24 年度 PRTR 情報）から、平成 22 年度から平成 24 年度までの 1, 2, 4-トリメチルベンゼンの排出量等の経年変化を図 3-4 に、平成 24 年度の排出量等の内訳を図 3-5 に示す（ここでの排出量は自家消費分からの排出を含んでいる）。

1, 2, 4-トリメチルベンゼンは、平成 24 年度の 1 年間に全国合計で届出事業者から大気へ 2,288 トン、公共用水域へ 0.579 トン、土壌へ 0.002 トン排出され、下水道に 2.504 トン、廃棄物として 563 トン移動している。埋め立ての届出はない。また、届出外排出量としては対象業種の届出外事業者から 1,083 トン、非対象業種から 36 トン、家庭から 0.054 トン、移動体から 179 トンの排出量が推計されている。

PRTR 情報によると、1, 2, 4-トリメチルベンゼンの届出排出量は平成 22 年度以降ほぼ横ばいである。なお、平成 24 年度にすそ切り以下事業者に係る排出量の推計方法を一部変更し、塗料を推計対象に追加しており、推計排出量が増加している。

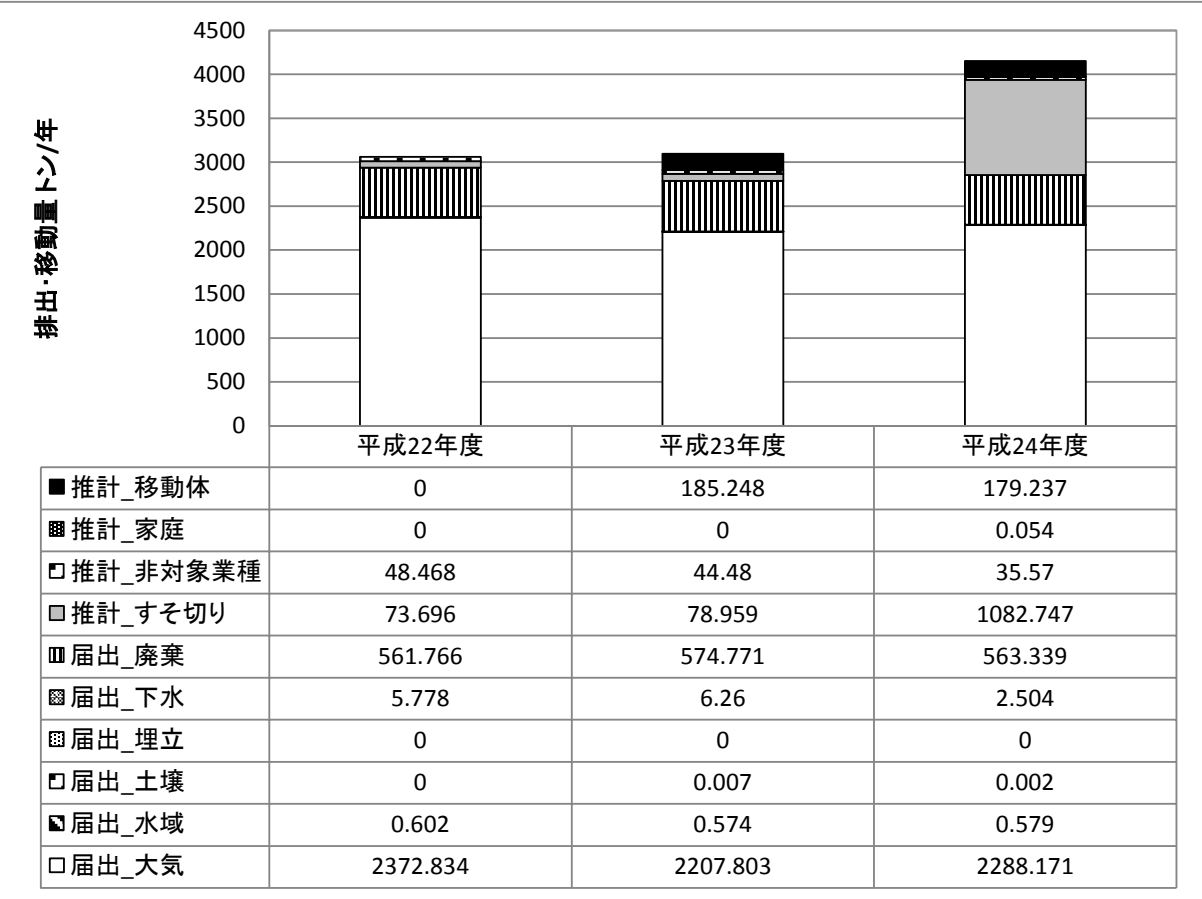


図 3-4 PRTR 制度に基づく排出・移動量の経年変化

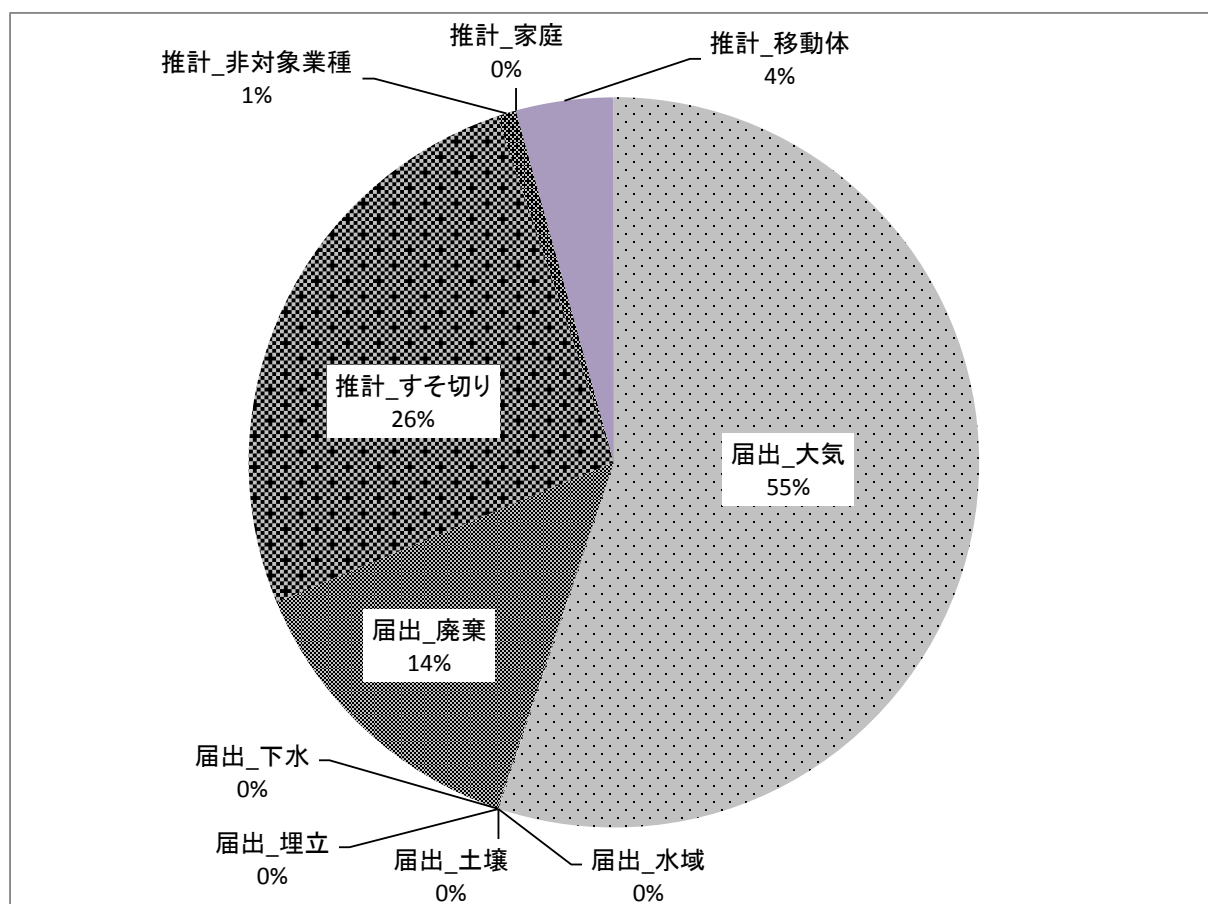


図 3-5 平成 24 年度の排出・移動量の内訳

続いて、平成 24 年度 PRTR 情報に基づき、1, 2, 4-トリメチ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。

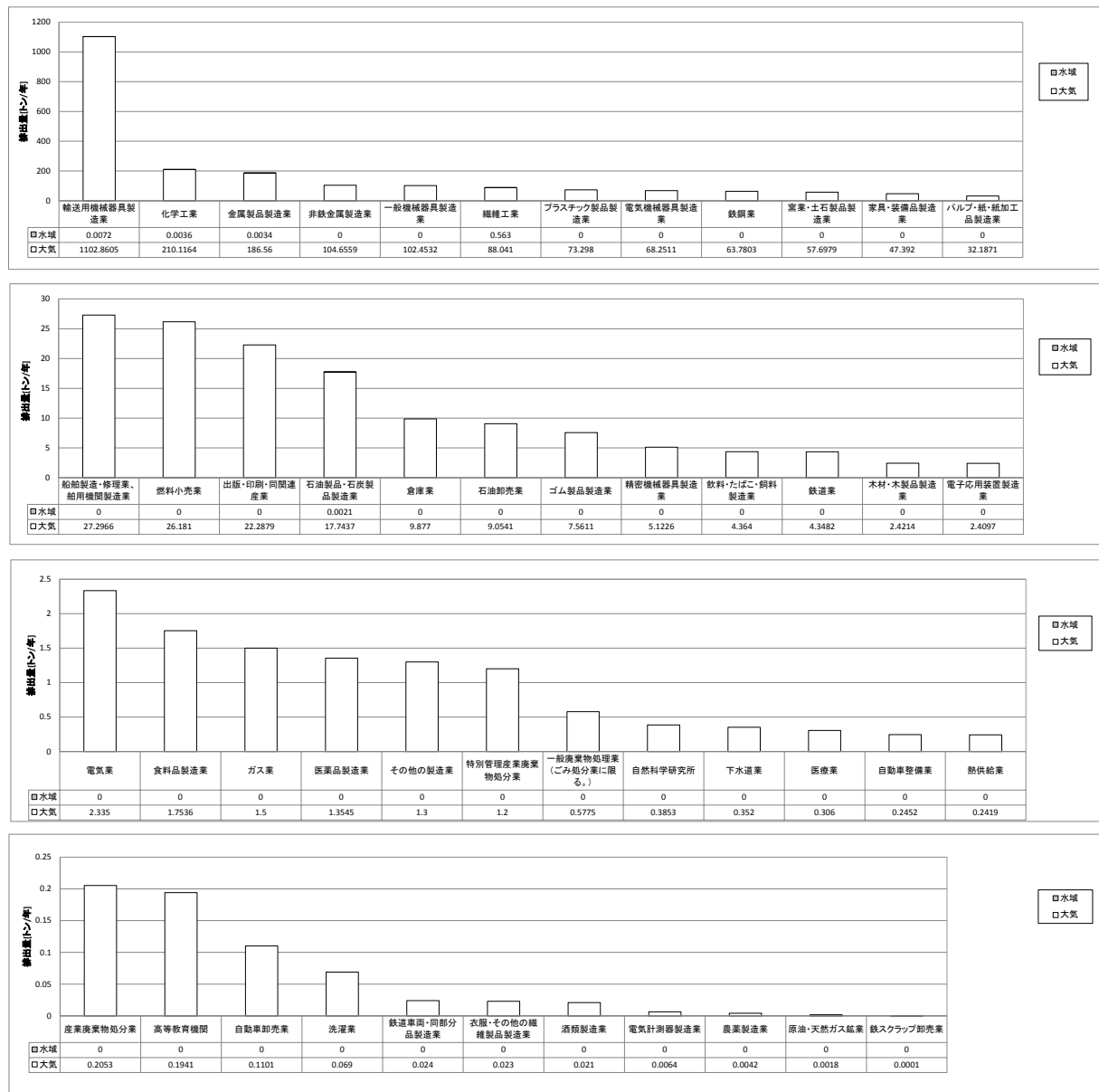


図 3-6 PRTR 届出排出量の業種別・媒体別内訳(平成 24 年度)

1, 2, 4-トリメチルベンゼンの届出事業所数は 18,346 であり、化審法届出情報の仮想的排出源の数 264 より多い。PRTR 届出事業者数が多いのは、1, 2, 4-トリメチルベンゼンがガソリンの成分であり、燃料小売業等から多くの届出があるためと考えられる。

図 3-5 に示したように平成 24 年度の 1, 2, 4-トリメチルベンゼンの排出量のうち、届出排出量は届出外排出量の約 2 倍になっている。平成 24 年度の 1, 2, 4-トリメチルベンゼンの届出外排出量（対象業種、非対象業種、家庭、移動体）について、内訳を表 3-4 に示す。1, 2, 4-トリメチルベンゼンは対象業種の事業者のすそ切り以下の排出量の推計と農業、特殊自動車及び下水処理施設に係る排出量の推計が行われている。

化審法届出情報を用いた推計排出量約 7,000 トンは、PRTR 排出量（届出排出量＋届出外排出量）約 3,600 トンの約 2 倍と見積もられた。

表 3-4 PRTR 届出外排出量の内訳(平成 24 年度)

		年間排出量(トン/年)																					合計
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	
		対象業種の事業以下	農業	殺虫剤	接着剤	塗料	漁網汚汚剤	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	
大区分	移動体											○	○	○		○	○	○	○	○			179.237
	家庭		○	○	○	○		○	○		○							○	○	○			0.054
	非対象業種		○	○	○	○	○	○		○								○	○	○			35.57
	対象業種(すそ切り)	○	○															○	○	○	○	○	1082.747
	推計量	1077.566	35.623											179.237								5.181	1297.608

3-3 排出等に係るその他の情報

下記の情報源において、1，2，4-トリメチルベンゼンのその他の排出源等に関して、以下のような記述がある。

- ・ Hazardous Substance Data Bank (HSDB) (2015-07-08 閲覧)

1，2，4-トリメチルベンゼンは廃棄物処理場や石炭火力発電所から環境へ直接排出される。また、トリメチルベンゼンはコールタールやミネラルオイル中に存在し、原油を加工する際にも生成する。

4 有害性評価（生態）

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る評価や国内外の規制値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。

1, 2, 4-トリメチルベンゼンは、logPow が 3.78 とされ、底質への残留が考えられるため、底生生物に関する有害性評価を行う物質に該当する。したがって、1, 2, 4-トリメチルベンゼンの生態影響に関する有害性評価は水生生物に加えて、底生生物も実施した。

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¹では、オオミジンコ *Daphnia magna* の遊泳阻害に対する 48 時間半数影響濃度（EC₅₀）0.003mg/L をキースタディとして不確実係数積「1000」で除した 0.00003mg/L が PNEC 値とされたが、この毒性値についてはその後、試験法からの逸脱等があり信頼できないと判断され、リスク評価（一次）評価 I²では、ニジマス *Oncorhynchus mykiss* の 96 時間 LC₅₀ 9.22mg/L を不確実係数積「10000」で除した 0.000922 mg/L が PNEC 値とされている。

4-1 生態影響に関する毒性値の概要

4-1-1 水生生物

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。

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)	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	-	-	-	-	-	-	-	-	-
一次消費者(又は消費者)(甲殻類)	-	-	-	-	-	-	-	-	-
二次消費者(又は捕食者)(魚類)	○		7.72	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッドミノー	LC ₅₀	MOR	96 時間	【1】

[]内数字：出典番号

【エンドポイント】

LC₅₀ (Median Lethal Concentration)：半数致死濃度

【影響内容】

MOR (Mortality)：死亡

¹平成 22 年度第 11 回薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会化学物質調査会
化学物質審議会第 102 回審査部会 第 108 回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会
(平成 23 年 1 月 21 日開催) 資料 5 生態影響に関する優先度判定案
(<http://www.env.go.jp/council/05hoken/y051-108-1/mat05rev.pdf>)

²平成 25 年 7 月 18 日公表 優先評価化学物質のリスク評価（一次）評価 I の結果及び対応について
資料 3-2 リスク評価（一次）評価 I で用いた生態影響のデータ
(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/ra/130718006.pdf)

4-1-2 底生生物

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。

4-2 予測無影響濃度 (PNEC) の導出

水生生物に対する予測無影響濃度(PNEC_{water})は、評価の結果、採用可能とされた知見を基に、情報量に応じて定められた不確実係数積 (UFs) を適用して求めた。また、底生生物の予測無影響濃度(PNEC_{sed})については、毒性値が得られなかったため、PNEC_{water} と Koc からの平衡分配法による換算にて求めた。

4-2-1 水生生物

<慢性毒性値>

水生生物の信頼性のある慢性毒性値は得られていない。

<急性毒性値>

二次消費者 (魚類) *Pimephales promelas* 死亡 ; 96 時間 LC₅₀ 7.72mg/L

Geiger *et al.* (1986)は、ファットヘッドミノー *P. promelas* の急性毒性試験を、Aldrich Chemical Co.製純度 99%の被験物質を用いて実施した。試験は流水式 (6.6 回転/日)で実施され、(助剤) 対照区、5 濃度区 (設定濃度希釈率 0.50-0.65、設定濃度公比 1.67-2.0) で行われている。助剤としておそらく分散剤が用いられている。被験物質はガスクロマトグラフィで実測され、実測濃度 (corrected average) は 1.60、2.85、4.38、8.09、11.9 mg/L (公比 1.5-1.8) であった。実測濃度に基づき、半数致死濃度(LC50)7.72mg/L が算出された。

<PNEC の導出>

二次消費者(魚類)に対する急性毒性値 7.72mg/L のみ得られており、この値を ACR (Acute chronic ratio : 急性慢性毒性比) 「100」、毒性値が不足している他の 2 栄養段階との感受性差 「10」、さらに室内試験から野外への外挿 「10」、すなわち不確実係数積 「10000」 で除し、1, 2, 4-トリメチルベンゼンの PNEC_{water} は 0.00077mg/L (0.77µg/L) となった。評価 I で得られた PNEC 値 (0.000922 mg/L) に比べて小さな値となった。

4-2-2 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 PNEC_{water}、Koc から平衡分配法を用いて、底生生物に対する PNEC_{sed} 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 PNEC_{sed} 0.044mg/kg-dry が得られた(湿重量換算で 0.0096mg/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、信頼できる有害性データとして、二次消費者 (魚類) の急性毒性値 (ファットヘッドミノー *P. promelas* 96 時間 LC₅₀ 7.72mg/L) のみ得られており、PNEC_{water} はこの値から推計された値である。そのため、急性毒性から慢性毒性への不確実性、栄養

段階間の感受性差に関する不確実性、室内試験から野外環境への不確実性が存在し、不確実係数積は「10000」となっている。

当該物質を含む複数物質によるカテゴリー評価を実施している OECD 化学物質共同評価プログラム¹では、このカテゴリーに含まれる化学物質の魚類、甲殻類及び藻類への急性毒性値は 1～10mg/L の範囲とされていることから、急性毒性に関しては、栄養段階間の感受性差は大きくないと推定される。

PNEC_{sed} は、PNEC_{water} 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毒性値の実測を得る以外に明らかでないことから、この値を用いて評価を進めることとした。

4-4 結果

有害性評価Ⅱの結果、1，2，4-トリメチルベンゼンの水生生物に係る PNEC_{water} は 0.00077mg/L を、底生生物に係る PNEC_{sed} は 0.044mg/kg-dry をそれぞれ採用した。

表 4-1 有害性情報のまとめ

	水生生物	底生生物
PNEC	0.00077 mg/L	0.044 mg/kg-dry
キースタディの毒性値	7.7 mg/L	—
不確実計数積 UFs	10000	—
キースタディのエンドポイント	二次消費者（魚類稚魚）の 96 時間半数致死濃度（LC50）	水生生物の PNEC _{water} と Koc から推計した値

4-5 有害性情報の有無状況

1，2，4-トリメチ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害性情報の有無状況を表 4-3に整理した。

スクリーニング生態毒性試験、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た。

¹ OECD(2012) : SIDS INITIAL ASSESSMENT PROFILE C9Aromatic Hydrocarbon Solvents Category(<http://webnet.oecd.org/hpv/ui/handler.axd?id=bd162768-5b30-44e0-bfc0-0f639b113191>))

1
2

表 4-2 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 試験 ^{注1)}	藻類生長阻害試験	化審法、 OECD TG. 201	×	
		ミジンコ急性遊泳 阻害試験	化審法、 OECD TG. 202	×	
		魚類急性毒性試験	化審法、 OECD TG. 203	○	【1】
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 ^{注1)}	藻類生長阻害試験	化審法、 OECD TG. 201	×	
		ミジンコ繁殖阻害 試験	化審法、 OECD TG. 211	×	
		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	×	
その他の試験					

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 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
OECD：「OECD GUIDELINES FOR THE TESTING OF CHEMICALS」に記載された試験方法

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）。

4-6 出典

【1】 Geiger, D.L., S.H. Poirier, L.T. Brooke, and D.J. Call (1986): Acute Toxicities of Organic Chemicals to Fathead Minnows (*Pimephales promelas*) Volume III. Ctr. for Lake Superior Environ. Stud., Univ. of Wisconsin-Superior, Superior, WI :328. (AQUIRE Ref.no. 12858)

5 暴露評価と各暴露シナリオでのリスク推計

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)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。得られる情報に応じて、適用可能な手法が分かれる。1, 2, 4-トリメチルベンゼンは化審法情報、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。

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 行われていれば推計	【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 行われていれば推計 【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 行われていれば推計	【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 行われていれば推計 【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 行われていれば推計	【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 行われていれば推計

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以降では1, 2, 4-トリメチルベンゼンに対して環境への排出量を抑制するための指導・助言の必要性、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とに示す。

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。

5-1 環境媒体中の検出状況

5-1-1 水質モニタリングデータ

水質モニタリングの直近年度及び過去10年分¹のモニタリン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大濃度相当値として不等

¹ モニタリングが実施されたのは、平成16年度から平成25年度のうち、平成21年度のみであり、その他の年度はモニタリングが実施されていない。

号つきで示した。また、各モニタリング事業、年度別のモニタリング結果を表 5-3 に示す。

検出濃度範囲については、検出のあった地点の測定濃度（年度内に複数回測定している場合は地点別の算術平均濃度）についての全国最大値と全国最小値を示している。なお、本評価では同一地点で複数の試料を採取している場合、各検体値の算術平均値をモニタリング濃度としている。

なお、表中の「エコ調査」は環境省（環境庁）の化学物質環境実態調査—化学物質と環境における詳細環境調査を表す。

エコ調査の調査結果では個別検体の値が記されているが、リスク評価における地点の濃度は算術平均値とする。表 5-3 によれば、年度別の最大濃度は平成 21 年度のエコ調査において検出のあった地点の濃度は 0.000018mg/L である。この地点では、3 検体のうち 1 検体で 0.000032mg/L の検出結果があり、他の 2 検体は不検出であったため、各検体値の算術平均により算出した濃度は 0.000018mg/L となる。

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 21～25 年度)	エコ調査(平成 21 年度)	0.000018
過去 10 年分(平成 16～25 年度)	エコ調査(平成 21 年度)	0.000018

表 5-3 近年の水質モニタリング結果(平成 16～25 年度)

年度	モニタリング事業名	濃度範囲[mg/L]	検出下限値 [mg/L]	検出地点数
平成 21 年度	エコ調査	0.000018※	0.0000057～ 0.000031	1/30

※検出のあった地点の 3 検体の nd、nd、0.000032mg/L の平均値(平均値の算出において nd は検出下限値の半値とした。)とした。

5-1-2 底質モニタリングデータ

直近 5 年及び過去 10 年分における底質モニタリングデータはなかった。

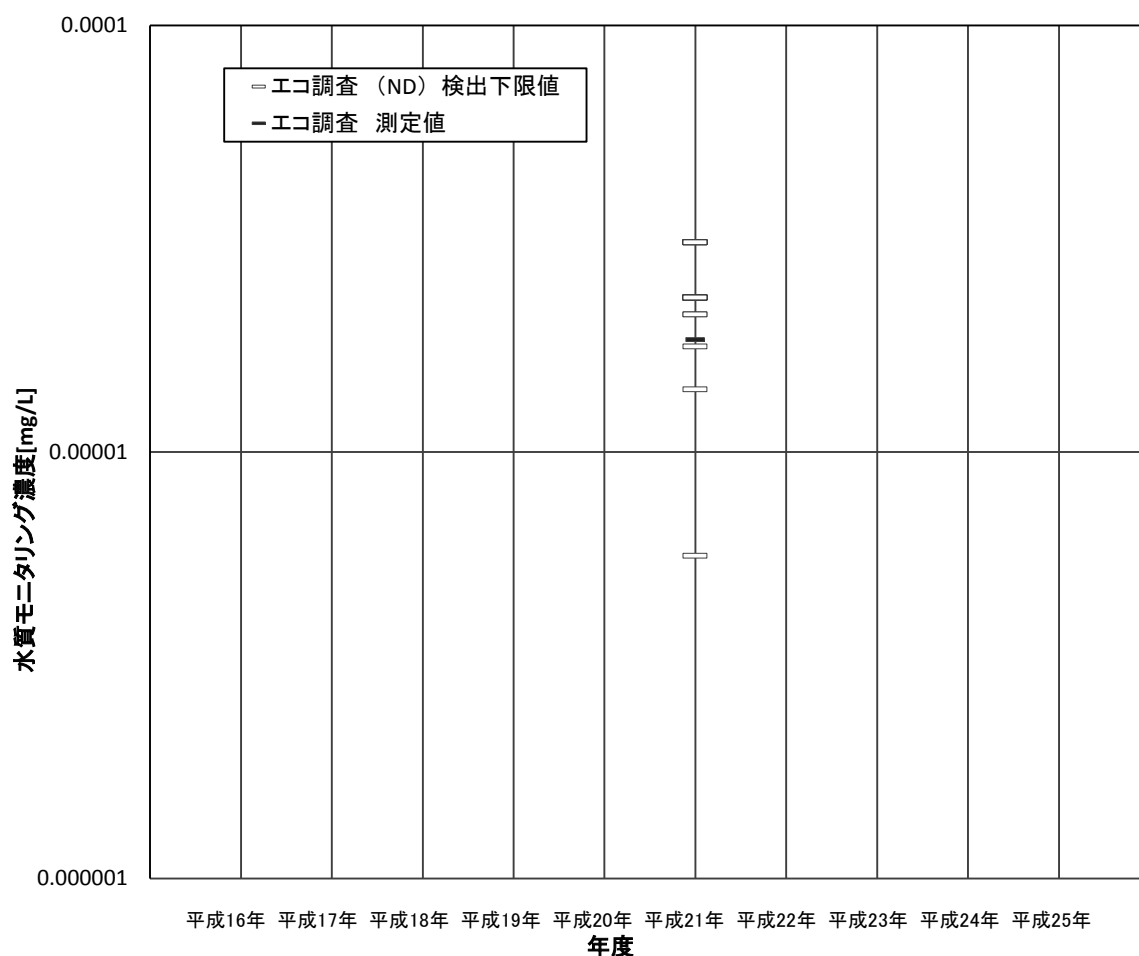


図 5-1 1, 2, 4-トリメチルベンゼンの過去 10 年間の年度別水質環境モニタリング調査結果のプロット図

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¹、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、PRAS-NITE を用いて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。

1, 2, 4-トリメチ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。

¹ PRTR 情報において、下水道への移動量が届け出られている場合は、移動先の下水道終末処理施設を固定排出源として扱っている。

この5-2では化審法届出情報と PRTR 情報は平成 24 年度実績のデータを用いている。

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

1, 2, 4-トリメチ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 5-2 参照)

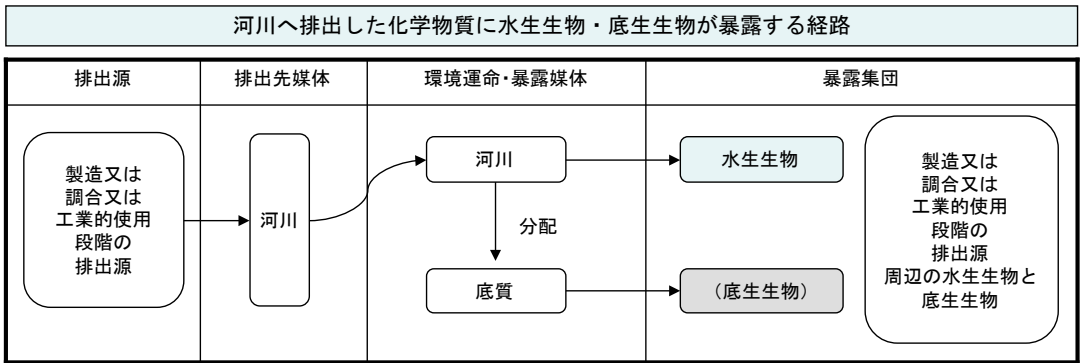


図 5-2 排出源ごとの暴露シナリオ(logPow が 3 以上の物質の場合は底生生物も対象)

② 排出量推計結果

平成 24 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 264 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 5-4 に示す。

1

表 5-4 仮想的排出源ごとの排出量推計結果

No.	都道府県	用途分類名	詳細用途分類名	用途番号	詳細用途番号	ライフサイクル ステージ	製造数量 [t/year]	出荷数量 [t/year]	大気排出 係数	水域排出 係数	大気排出 量[t/year]	水域排出 量[t/year]
1	A県	工業用溶剤[#02-06 の溶剤を除く]	その他	07	z	工業的使用 段階	0	373	0.2	0.002	-	0.75
2	B県	工業用溶剤[#02-06 の溶剤を除く]	合成反应用溶剤	07	a	調合段階1	0	2025	0.0001	0.0001	-	0.20
3	B県	工業用溶剤[#02-06 の溶剤を除く]	合成反应用溶剤	07	a	工業的使用 段階	0	2025	0.05	0.0001	-	0.20
4	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	0	2047	0.0005	0.00005	-	0.10
5	D県	工業用溶剤[#02-06 の溶剤を除く]	希釈溶剤	07	d	調合段階1	0	862	0.0001	0.0001	-	0.086
6	D県	工業用溶剤[#02-06 の溶剤を除く]	希釈溶剤	07	d	工業的使用 段階	0	862	0.2	0.0001	-	0.086
7	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	0	1361	0.0005	0.00005	-	0.068
8	E県	工業用溶剤[#02-06 の溶剤を除く]	紡糸用溶剤、製膜 用溶剤	07	b	工業的使用 段階	0	30	0.1	0.002	-	0.060
9	A県	塗料用・ワニス用・ コーティング剤用・ 印刷インキ用・複写 用・殺生物剤用溶剤	塗料用溶剤、塗料 希釈剤	02	a	調合段階1	0	2276	0.0025	0.000025	-	0.057
10	F県	塗料用・ワニス用・ コーティング剤用・ 印刷インキ用・複写 用・殺生物剤用溶剤	塗料用溶剤、塗料 希釈剤	02	a	調合段階1	0	1712	0.0025	0.000025	-	0.043

2

3

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

4

③ 環境媒体中濃度の推計結果

6

暴露シナリオ(図 5-2)に基づき、仮想的排出源ごとの排出量と2章で示した1, 2, 4-トリメチ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 5-5 に示す。

8

9

10

11

表 5-5 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	1.75×10^{-3}	1.00×10^{-1}
2	4.75×10^{-4}	2.72×10^{-2}
3	4.75×10^{-4}	2.72×10^{-2}
4	2.40×10^{-4}	1.38×10^{-2}
5	2.02×10^{-4}	1.16×10^{-2}
6	2.02×10^{-4}	1.16×10^{-2}
7	1.60×10^{-4}	9.15×10^{-3}
8	1.41×10^{-4}	8.07×10^{-3}
9	1.34×10^{-4}	7.65×10^{-3}
10	1.00×10^{-4}	5.76×10^{-3}

12

13

14

15

注1) No に示す番号は、表 5-4 における仮想的排出源と対応している。

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

(2) リスク推計結果

リスク推計は、4章で導出した PNEC_{water} 0.00077 mg/L, PNEC_{sed} 0.044 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（PEC_{water}）及び底質中濃度（PEC_{sed}）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 5-6 にリスク推計結果を示す。水生生物がリスク懸念となる仮想的排出源は 1 箇所であった。底生生物がリスク懸念となる仮想的排出源も 1 箇所であった。

表 5-6 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(PEC/PNEC)

No.	都道府県	用途分類名	ライフサイクル ステージ	水域排出 量[t/year]	河川水中濃度 [mg/L]	底質中濃度 [mg/kg-dry]	PNEC (水生生物) [mg/L]	PEC/PNEC (水生生物)	PNEC (底生生物) [mg/kg-dry]	PEC/PNEC (底生生物)
1	A県	工業用溶剤[#02-06 の溶剤を除く]	工業的使用 段階	0.75	1.75×10^{-3}	1.00×10^{-1}	0.00077	2.3	0.044	2.3
2	B県	工業用溶剤[#02-06 の溶剤を除く]	調合段階1	0.20	4.75×10^{-4}	2.72×10^{-2}	0.00077	0.62	0.044	0.62
3	B県	工業用溶剤[#02-06 の溶剤を除く]	工業的使用 段階	0.20	4.75×10^{-4}	2.72×10^{-2}	0.00077	0.62	0.044	0.62
4	C県	中間物	工業的使用 段階	0.10	2.40×10^{-4}	1.38×10^{-2}	0.00077	0.31	0.044	0.31
5	D県	工業用溶剤[#02-06 の溶剤を除く]	調合段階1	0.086	2.02×10^{-4}	1.16×10^{-2}	0.00077	0.26	0.044	0.26
6	D県	工業用溶剤[#02-06 の溶剤を除く]	工業的使用 段階	0.086	2.02×10^{-4}	1.16×10^{-2}	0.00077	0.26	0.044	0.26
7	A県	中間物	工業的使用 段階	0.068	1.60×10^{-4}	9.15×10^{-3}	0.00077	0.21	0.044	0.21
8	E県	工業用溶剤[#02-06 の溶剤を除く]	工業的使用 段階	0.060	1.41×10^{-4}	8.07×10^{-3}	0.00077	0.18	0.044	0.18
9	A県	塗料用・ワニス用・ コーティング剤用・ 印刷インキ用・複写 用・殺生物剤用溶剤	調合段階1	0.057	1.34×10^{-4}	7.65×10^{-3}	0.00077	0.17	0.044	0.17
10	F県	塗料用・ワニス用・ コーティング剤用・ 印刷インキ用・複写 用・殺生物剤用溶剤	調合段階1	0.043	1.00×10^{-4}	5.76×10^{-3}	0.00077	0.13	0.044	0.13

264 箇所の仮想的な排出源のうち、表 5-6 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（PEC_{water}）の高い順に図 5-3 に、また、底質中濃度（PEC_{sed}）の高い順に図 5-4 に示した。また、図 5-3 及び図 5-4 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、「調 1」は調合段階 1、「工」は工業的使用段階の各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。

1

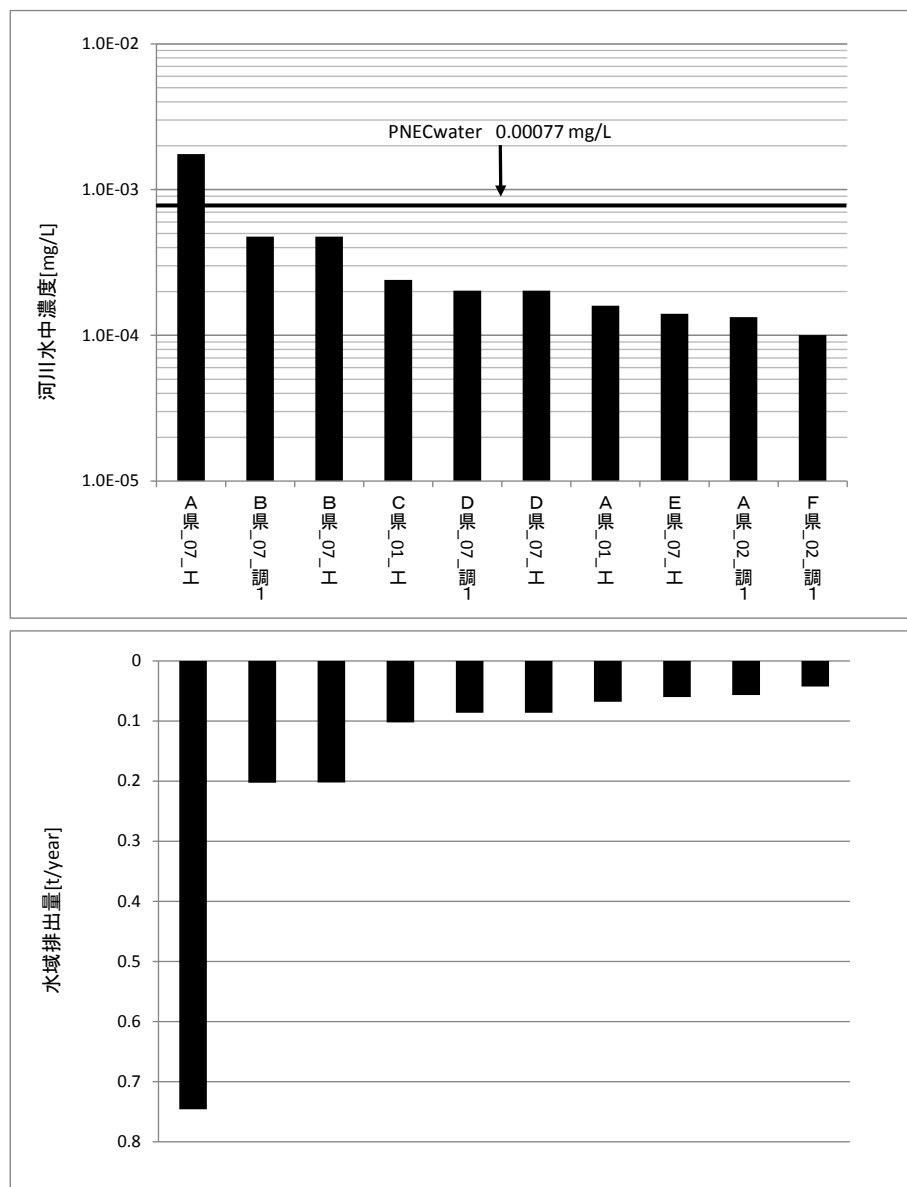


図 5-3 化審法届出情報に基づく仮想的な排出源(水域)の推計排出量に対する河川水中濃度

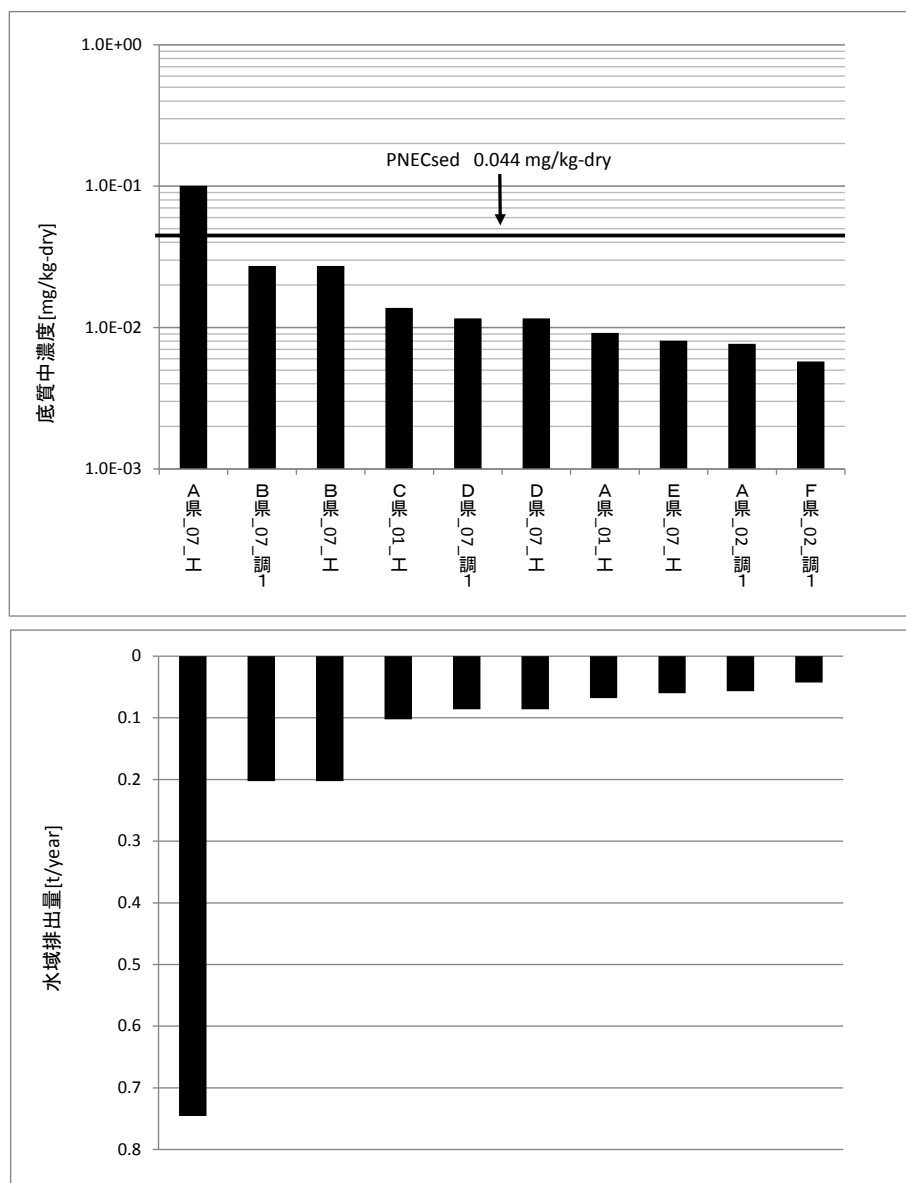


図 5-4 化審法届出情報に基づく仮想的な排出源(底質)の推計排出量に対する底質中濃度

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 5-7 に示した。

表 5-7 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	1	264
底生生物に対するリスク推計結果	1	264

リスク懸念となる仮想的排出源の数は、水生生物、底生生物ともに同一の 1 箇所であった。また、リスク懸念箇所の用途及びライフサイクルステージの内訳を図 5-5 に示した。

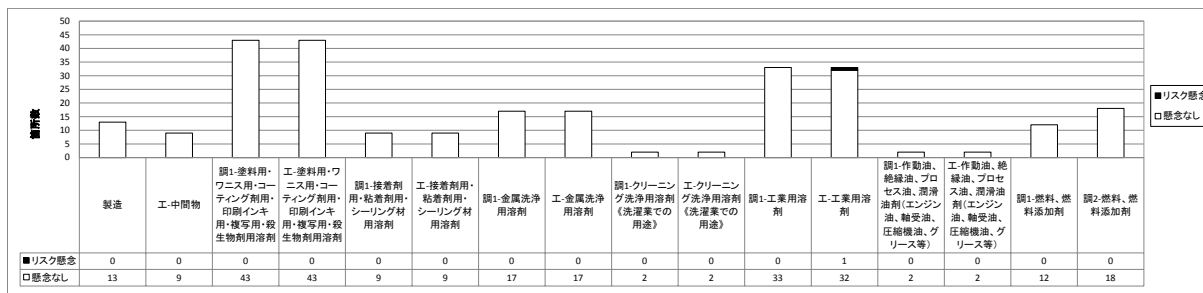


図 5-5 化審法届出情報に基づく仮想的な排出源の用途別リスク懸念箇所数

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 5-2 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。1, 2, 4-トリメチルベンゼンの下水道終末処理施設における大気及び水域への移行率はそれぞれ 53.1%及び 26.6%（PRTR 届出外排出量の推計手法¹と 2 章で示した 1, 2, 4-トリメチルベンゼンの性状を用いて算出した数値）として排出量を推計した。

② 排出量の情報

平成 24 年度実績の PRTR 届出 18,346 事業所及び移動先の下水道終末処理施設 9 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 5-8 にその排出量を示す。

表 5-8 PRTR 届出事業所ごとの排出量

No.	都道府県	大気排出量[t/year]	水域排出量[t/year]	合計排出量[t/year]	業種名等	排出先水域名称
1	G県	3.4	0.48	3.88	繊維工業	A川
2	H県	0.5841	0.2926	0.8767	下水道終末処理施設	A海域
3	F県	0.38232	0.19152	0.57384	下水道終末処理施設	B川
4	I県	0.24957	0.12502	0.37459	下水道終末処理施設	C川
5	G県	0.1062	0.0532	0.1594	下水道終末処理施設	D川
6	J県	8.7	0.044	8.744	繊維工業	B海域
7	K県	4.4	0.036	4.436	繊維工業	E川
8	L県	0.0029	0.0058	0.0087	輸送用機械器具製造業	F川
9	M県	6.2	0.0034	6.2034	金属製品製造業	C海域
10	K県	0.03	0.003	0.033	繊維工業	E川

¹ 平成 24 年度届出外排出量推計方法の詳細 21. 下水処理施設に係る排出量

(<http://www.env.go.jp/chemi/prtr/result/todokedegaiH24/syosai/21.pdf>)

推定式は次のとおり。EF=1-(EM+SL)、EM=(1-1/(1+5.149H_c^{0.904}))×0.8898、SL=1-1/(1+4.2162×10⁻⁵Pow)、EF：放流水への移行率、EM：大気への移行率、SL：汚泥への移行率、H_c：無次元化したヘンリー係数、Pow：オクタノール/水分配係数

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 1, 2, 4-トリメチ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 5-9 に示す（No に示す番号は、表 5-8 における排出源と対応している）。

表 5-9 排出源周辺の環境媒体中濃度推計結果

	環境媒体中濃度 水域排出分	
	水中濃度 [mg/L]	底質中濃度 [mg/kg-dry]
No.		
1	7.52×10^{-4}	4.31×10^{-2}
2	3.69×10^{-4}	2.11×10^{-2}
3	2.41×10^{-3}	1.38×10^{-1}
4	1.58×10^{-3}	9.03×10^{-2}
5	6.70×10^{-4}	3.84×10^{-2}
6	5.54×10^{-5}	3.18×10^{-3}
7	4.54×10^{-4}	2.60×10^{-2}
8	7.31×10^{-5}	4.19×10^{-3}
9	4.28×10^{-6}	2.45×10^{-4}
10	3.78×10^{-5}	2.17×10^{-3}

(2) リスク推計結果

リスク推計は、4 章で導出した PNECwater 0.00077 mg/L, PNECsed 0.044 mg/kg-dry と、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 以上となった排出源は「リスク懸念」と判別する。表 5-10 にリスク推計結果を示す。なお、No.1 の地点については、デフォルトの河川流量（2.51 m³/sec）ではリスク懸念が認められたため、技術ガイダンス V 章にしたがって国土交通省の水文水質データベース¹に収載されている、近傍の観測所における低水流量（20.19 m³/sec）を用いた。No.3 及び 4 の地点については、近傍に流量の観測所が存在しなかった。

¹ <http://www1.river.go.jp/>

表 5-10 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[t/year]	水中濃度[mg/L]	底質中濃度[mg/kg-dry]	PNEC (水生生物) [mg/L]	PEC/PNEC (水生生物)	PNEC (底生生物) [mg/kg-dry]	PEC/PNEC (底生生物)
1	G県	繊維工業	0.48	7.52×10^{-4}	4.31×10^{-2}	0.00077	0.98	0.044	0.98
2	H県	下水道終末処理施設	0.2926	3.69×10^{-4}	2.11×10^{-2}	0.00077	0.48	0.044	0.48
3	F県	下水道終末処理施設	0.19152	2.41×10^{-3}	1.38×10^{-1}	0.00077	3.1	0.044	3.1
4	I県	下水道終末処理施設	0.12502	1.58×10^{-3}	9.03×10^{-2}	0.00077	2.0	0.044	2.1
5	G県	下水道終末処理施設	0.0532	6.70×10^{-4}	3.84×10^{-2}	0.00077	0.87	0.044	0.87
6	J県	繊維工業	0.044	5.54×10^{-5}	3.18×10^{-3}	0.00077	0.072	0.044	0.072
7	K県	繊維工業	0.036	4.54×10^{-4}	2.60×10^{-2}	0.00077	0.59	0.044	0.59
8	L県	輸送用機械器具製造業	0.0058	7.31×10^{-5}	4.19×10^{-3}	0.00077	0.095	0.044	0.095
9	M県	金属製品製造業	0.0034	4.28×10^{-6}	2.45×10^{-4}	0.00077	0.0056	0.044	0.0056
10	K県	繊維工業	0.003	3.78×10^{-5}	2.17×10^{-3}	0.00077	0.049	0.044	0.049

また、図 5-6 及び図 5-7 に、表 5-10 に示した排出源ごとの排出量と環境媒体中濃度を示す。

1

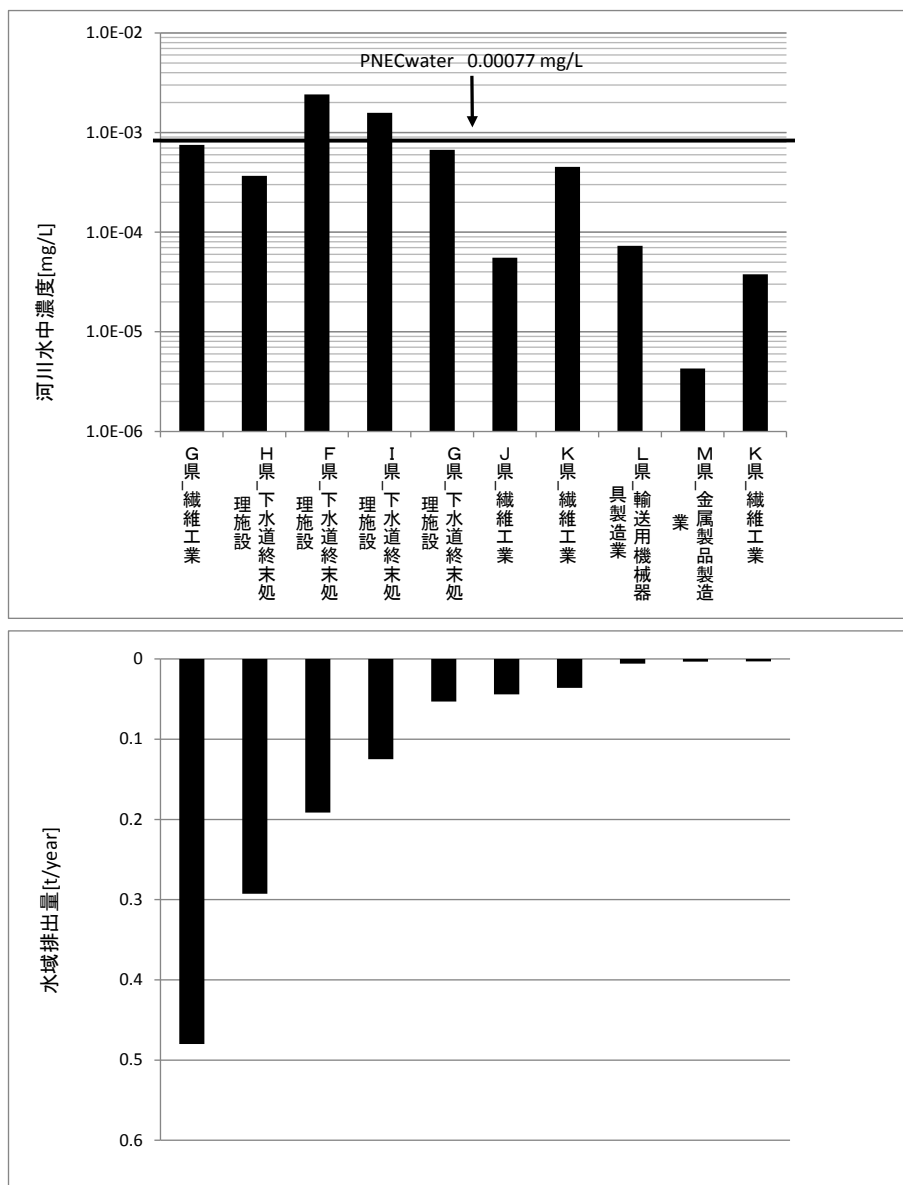


図 5-6 PRTR 届出事業所毎の排出量に対する水中濃度

2

3

4

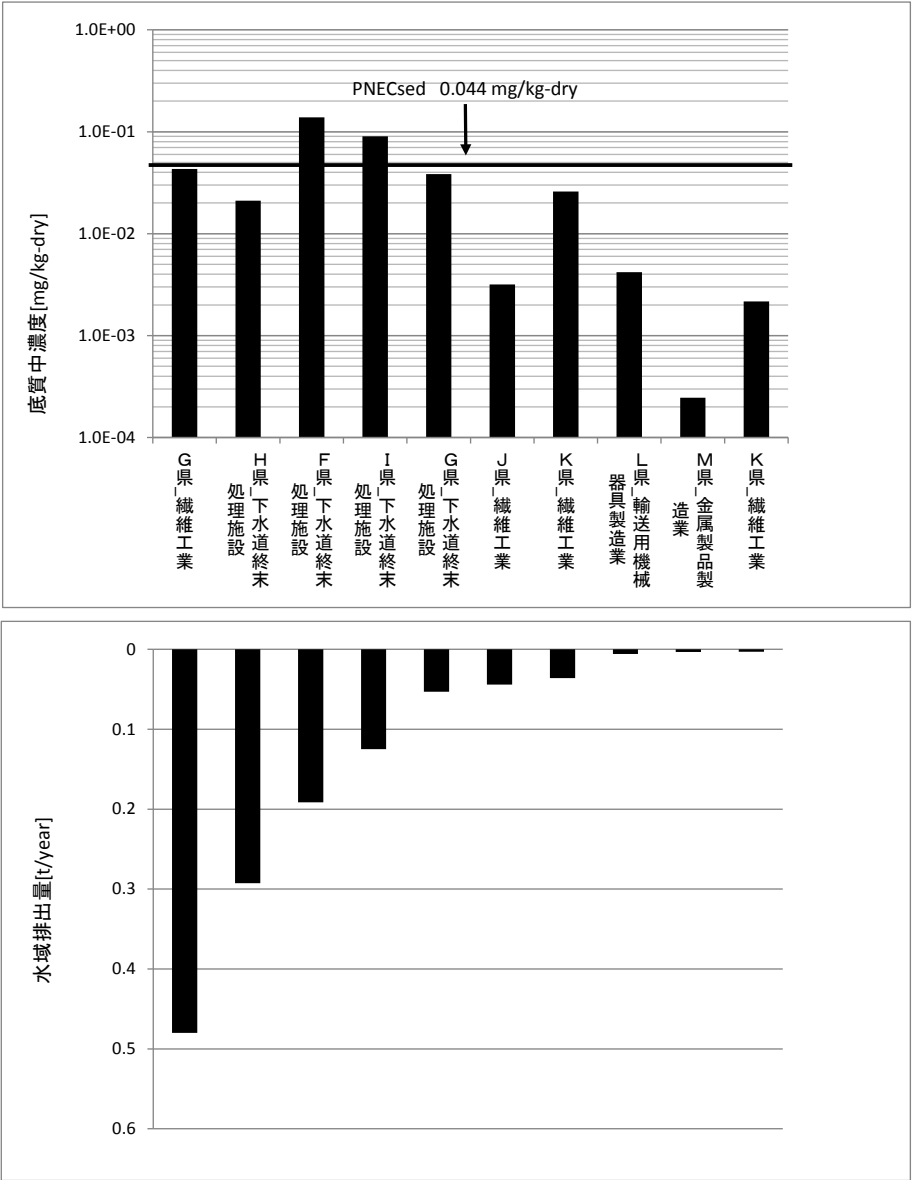


図 5-7 PRTR 届出事業所毎の排出量に対する底質中濃度

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 5-11 に示した。

表 5-11 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	2	18355
底生生物に対するリスク推計結果	2	18355

リスク懸念となる排出源の数は、水生生物、底生生物ともに同一の 2 箇所であった。また、リスク懸念箇所の業種の内訳を図 5-8 に示した。

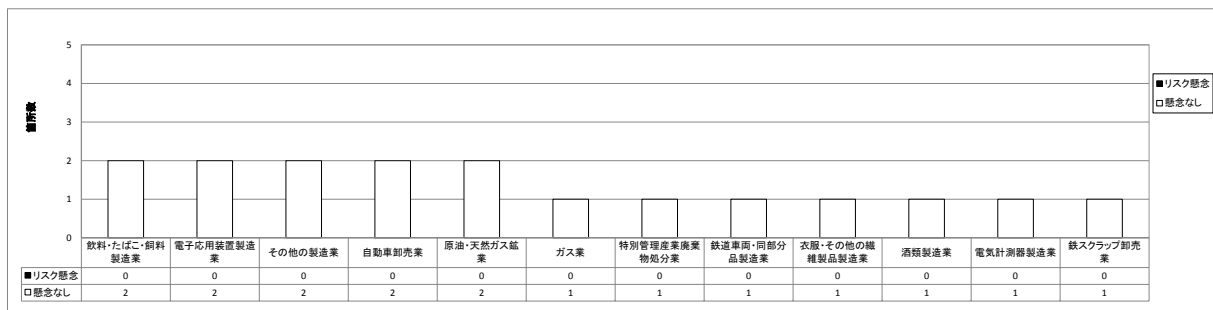
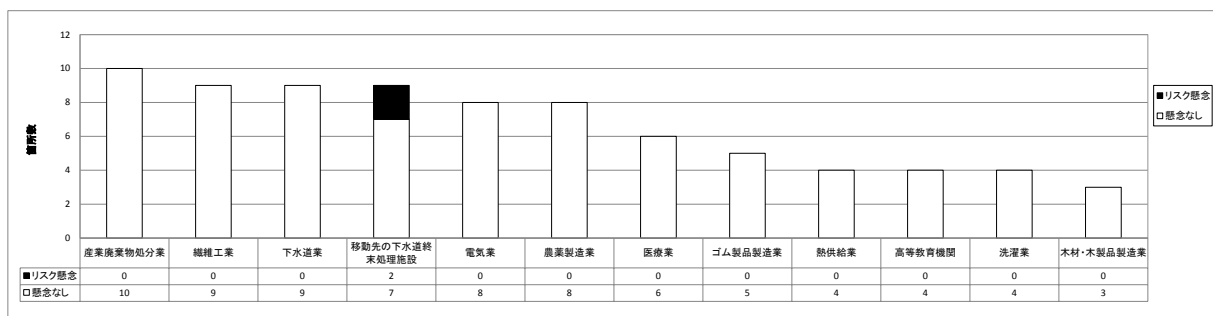
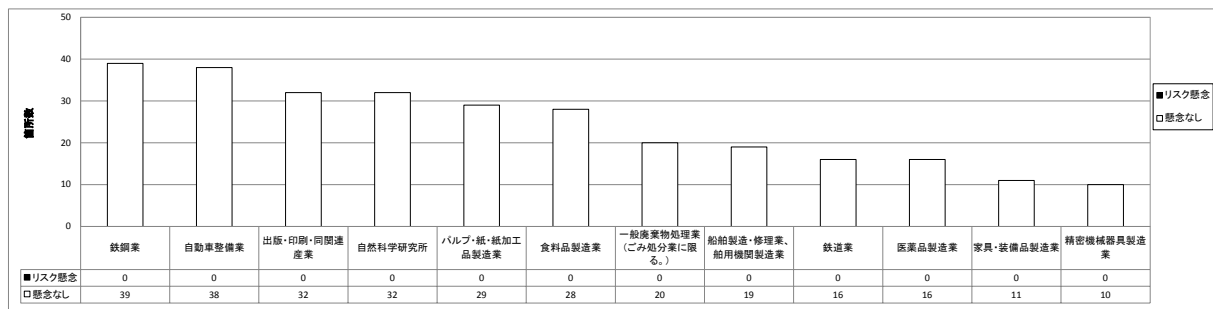
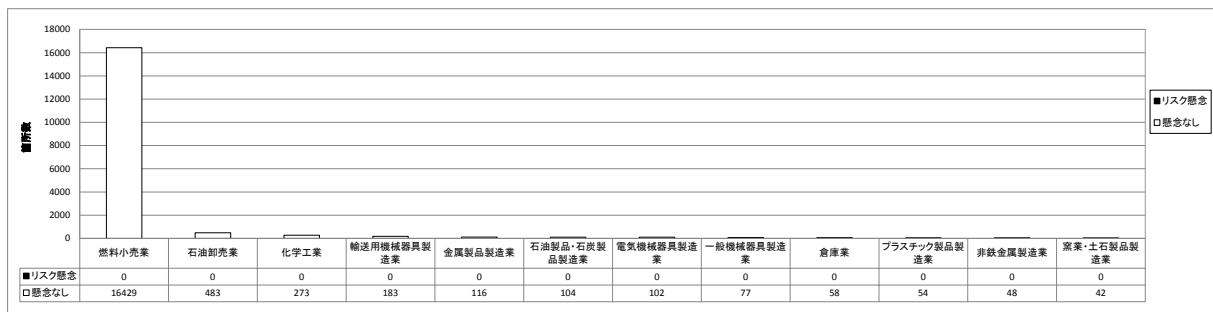


図 5-8 PRTR 情報に基づく排出源の業種別リスク懸念箇所数

5-2-3 環境モニタリングデータ

平成 21 年度の環境モニタリングデータに基づくリスク推計においては、リスク懸念箇所はなかった（後述の 5-3-3 参照）。平成 24 年度の PRTR 情報に基づく排出源ごとの暴露シナリオによる暴露評価におけるモデル推計では、2 箇所の排出源で PEC/PNEC 比が 1 以上となった（前述の 5-2-2 参照）が、当該地点の近傍における環境モニタリングデータは得られなかった。

5-3 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

1, 2, 4-トリメチルベンゼンについては、本シナリオに該当する用途はなかった。

5-4 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

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～中流の固定排出源の排出量に加え、家庭用・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（5-4-1）。

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、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、環境中濃度等の空間的分布を全国レベルで推計する（5-4-2）。

5-4-1 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）

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。

推計手法については技術ガイダンスⅦ章に準じている。

(1) 推計条件

推計条件

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全国排出量及び PRTR 情報に基づく全国排出量を用いた。

平成 24 年度の化審法届出情報による全国排出量の内訳を表 5-12 に示す。

表 5-12 化審法届出情報(平成 24 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	1.63	0.0326	
調査・工業的使用段階	7000	2.53	該当する主な用途は、 ・塗料用・ワニス用・コーティング剤用・印刷インキ用・複写用・殺生物剤用溶剤 ・接着剤用・粘着剤用・シーリング材用溶剤 ・工業用溶剤
家庭等使用段階	0.0966	0	該当する用途は、 ・燃料、燃料添加剤
長期使用製品の 使用段階	0	0	該当用途なし
廃棄段階	-	-	考慮しない

図中の数値は、各区分の推計排出量（トン／年）である。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、家庭等使用段階の非点源からの排出量を考慮した。

次に PRTR 情報による全国排出量の内訳を表 5-13 に示す。これは 3 章の図 3-4 から平成 24 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 5-13 PRTR 情報による全国排出量の内訳(平成 24 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_ すそ切り	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)	2288.171	0.579	0.002	0	1082.429	35.57	0.054	179.237	3586.042

注) 推計_すそ切り中の下水処理施設からの排出量については、PRTR 届出外排出量の推計手法と 2 章で示した 1, 2, 4-トリメチルベンゼンの性状を用いて算出している。

推計に用いた 1, 2, 4-トリメチルベンゼンの物理化学的性状と環境中半減期は 2 章に記載のあるとおりである(後述の 5-5 の表 5-22 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、1, 2, 4-トリメチルベンゼンが大気、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。

各種排出量に基づく環境中分配比率等の詳細を表 5-14 に示す。PRTR 排出量に基づく、土壌に残留する割合が多いという結果になった。

表 5-14 環境中の排出先比率と環境中分配比率

		化審法 推計排出量	PRTR 届出+ 届出外排出量
排出先 比率	大気	>99%	99%
	水域	<1%	<1%
	土壌	0%	<1%
環境中 分配比率	大気	93%	29%
	水域	4%	2%
	土壌	3%	69%
	底質	<1%	<1%

5-4-2 環境中濃度等の空間的分布の推計 (PRTR 情報の利用)

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 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。

(1) 推計条件

1, 2, 4-トリメチルベンゼンの G-CIEMS に基づく濃度推計の条件について以下に示

す。

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 次メッシュ上に割り当てたデータ(「平成 26 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用いた。なお、排出先が海域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として推計している。なお、平成 24 年度の PRTR 届出外推計では、1, 2, 4-トリメチルベンゼンの自動車からの推計排出量が算出されていない。そのため、本評価では、PRTR の届出外排出量推計における 1, 2, 4-トリメチルベンゼンの自動車からの推計排出量を 1, 3, 5-トリメチルベンゼンの推計排出量を基に推計し、3 次メッシュに割り当てた。また、1, 2, 4-トリメチルベンゼンの下水への推計排出量を PRTR の届出の移動量と 5-2-2 で用いた大気移行率(53.1%)、水域移行率(26.6%)を用いて、3 次メッシュに割り当てた。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 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 5-15 に示す値を用いた。

表 5-15 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	6.24×10 ²	25℃値
Sblty	水溶解度	mol/m ³	4.60×10 ⁻¹	25℃温度補正值
VaporPrssr	蒸気圧	Pa	2.80×10 ²	25℃温度補正值
Kow	オクタノールと 水との間の分 配係数	-	6.03×10 ²	10 ^{logKow}
DgrdtnRate_Air_gas	大気中分解速 度定数(ガス)	s ⁻¹	1.64×10 ⁻⁵	大気における機序別分解半減期 の総括値 0.49 日の換算値
DgrdtnRate_Air_prtcl	大気中分解速 度定数(粒子)	s ⁻¹	1.64×10 ⁻⁵	大気における機序別分解半減期 の総括値 0.49 日の換算値
DgrdtnRate_Water_sol	水中分解速度 定数(溶液)	s ⁻¹	2.87×10 ⁻⁷	水中における機序別分解半減期 の総括値 28 日の換算値
DgrdtnRate_Water_SS	水中分解速度 定数(懸濁粒 子)	s ⁻¹	2.87×10 ⁻⁷	水中における機序別分解半減期 の総括値 28 日の換算値
DgrdtnRate_Soil DgrdtnRate_Soil_0~6	土壌中分解速 度定数	s ⁻¹	2.87×10 ⁻⁷	土壌中における機序別分解半減 期の総括値 28 日の換算値
DgrdtnRate_Sdmnt	底質中分解速 度定数	s ⁻¹	7.16×10 ⁻⁸	底質中における機序別分解半減 期の総括値 112 日の換算値
DgrdtnRate_Canopy	植生中分解速 度定数	s ⁻¹	1.64×10 ⁻⁵	大気における機序別分解半減期 の総括値 0.49 日の換算値

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 5-16 に示す。なお、本物質は化審法対象範囲外の PRTR 届出外推計排出量として、農薬、自動車及び特殊自動車からの推計排出量を含む。そこで、農薬、自動車及び特殊自動車からの推計排出量を除外した場合の推計も行った。化審法対象範囲における全国の合計排出量を表 5-17 に示す。

1
2

3
4

5
6

表 5－16 PRTR 排出量情報(平成 24 年度)の全国排出量(全排出量)の内訳

PRTR 排出量データ使用年度	平成 24 年度
排出量	○届出排出量 : 2,290,748kg/年 G-CIEMS 用大気排出量: 2,289,501kg/年 G-CIEMS 用水域排出量: 901kg/年 G-CIEMS 用土壌排出量: 1kg/年 ○届出外排出量: 2,513,062kg/年 G-CIEMS 用大気排出量: 2,477,167kg/年 G-CIEMS 用水域排出量: 260kg/年 G-CIEMS 用土壌排出量: 33,442kg/年 (G-CIEMS で対応付けられない沿岸域の水域排出分 356kg/年、土壌排出分 2,183kg/年は、考慮しない。自動車からの排出分として、類縁物質である1, 3, 5-トリメチルベンゼンの推計排出量を基に推計した排出量約 122 万 kg/y を含む。)

表 5－17 PRTR 排出量情報(平成 24 年度)の全国排出量(化審法対象範囲)の内訳

PRTR 排出量データ使用年度	平成 24 年度
排出量	○届出排出量 : 2,290,748kg/年 G-CIEMS 用大気排出量: 2,289,501kg/年 G-CIEMS 用水域排出量: 901kg/年 G-CIEMS 用土壌排出量: 1kg/年 ○届出外排出量: 1,077,555kg/年 G-CIEMS 用大気排出量: 1,077,294kg/年 G-CIEMS 用水域排出量: 260kg/年 G-CIEMS 用土壌排出量: 1kg/年 (G-CIEMS で対応付けられない沿岸域の排出分 63kg/年は、考慮しない。) ※届出外の排出量のうち農薬、自動車及び特殊自動車用途として推計されている排出量を除いた。

(2) 環境中濃度の推計結果

G-CIEMS の計算で得られた全河川流域濃度の中から、水域における評価対象地点 3,705 流域での濃度情報を PEC として、4 章で導出した PNECwater 0.00077mg/L 及び PNECsed 0.044mg/kg-dry を用いて、流域別に PEC/PNEC 比を算出した。

① 全排出量

評価対象地点 3,705 流域の水質濃度及び底質濃度並びに PECwater/PNECwater 比及び PECsed/PNECsed 比の各パーセンタイル値¹を表 5-18に、水質濃度分布を図 5-9に、底質濃度分布を図 5-10に示す。1≤PECwater/PNECwater 比となる評価対象地点は 1 流域、0.1≤PECwater/PNECwater 比<1 となる評価対象地点は 6 流域であった。また、PECsed/PNECsed 比≥1 となる評価対象地点はなく、0.1≤PECsed/PNECsed 比<1 となる評価対象地点は 5 流域であった。

表 5-18 G-CIEMS の評価対象地点における水質濃度及び底質濃度並びに PEC/PNEC 比(全排出量)

パーセン タイル	順位	水生生物			底生生物		
		水質濃度 [mg/L]	PNECwater [mg/L]	PECwater/PNEC water 比 (低水流量) [-]	底質濃度 [mg/kg-dry]	PNECsed [mg/kg-dry]	PECsed/PNEC sed 比 (低水流量) [-]
0	1	8.0×10 ⁻¹⁰	0.00077	1.0×10 ⁻⁶	1.9×10 ⁻⁸	0.044	4.4×10 ⁻⁷
0.1	5	1.0×10 ⁻⁹	0.00077	1.3×10 ⁻⁶	2.5×10 ⁻⁸	0.044	5.6×10 ⁻⁷
1	38	5.0×10 ⁻⁹	0.00077	6.5×10 ⁻⁶	1.2×10 ⁻⁷	0.044	2.8×10 ⁻⁶
5	186	2.1×10 ⁻⁸	0.00077	2.7×10 ⁻⁵	5.1×10 ⁻⁷	0.044	1.1×10 ⁻⁵
10	371	4.2×10 ⁻⁸	0.00077	5.4×10 ⁻⁵	1.0×10 ⁻⁶	0.044	2.3×10 ⁻⁵
25	927	1.2×10 ⁻⁷	0.00077	0.00015	2.9×10 ⁻⁶	0.044	6.5×10 ⁻⁵
50	1853	4.2×10 ⁻⁷	0.00077	0.00054	1.0×10 ⁻⁵	0.044	0.00023
75	2779	1.6×10 ⁻⁶	0.00077	0.0020	3.8×10 ⁻⁵	0.044	0.00087
90	3335	4.3×10 ⁻⁶	0.00077	0.0056	0.00011	0.044	0.0024
95	3520	7.7×10 ⁻⁶	0.00077	0.010	0.00019	0.044	0.0043
99	3668	1.9×10 ⁻⁵	0.00077	0.025	0.00048	0.044	0.011
99.9	3701	0.00021	0.00077	0.27	0.0051	0.044	0.12
99.92	3702	0.00034	0.00077	0.44	0.0084	0.044	0.19
99.95	3703	0.00057	0.00077	0.73	0.014	0.044	0.32
99.97	3704	0.00072	0.00077	0.93	0.018	0.044	0.40
100	3705	0.0012	0.00077	1.5	0.028	0.044	0.64

※0.1≤PEC/PNEC<1 のセルを網掛け、PEC/PNEC≥1 を白抜きで表示した。

¹ ここでのパーセンタイル値は、「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。

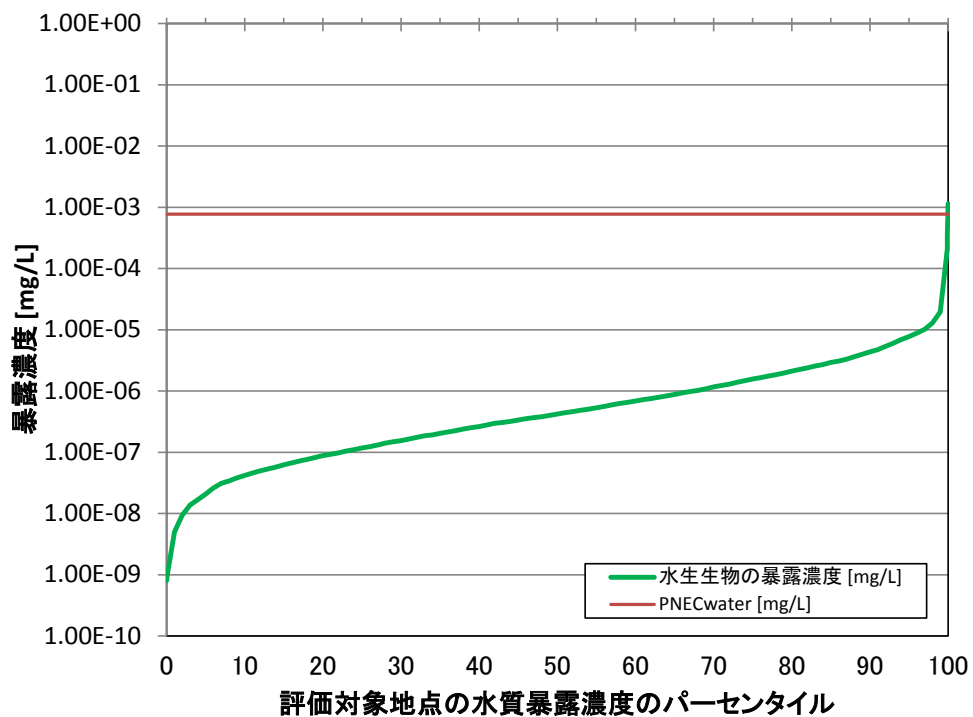


図 5-9 G-CIEMS で計算された評価対象地点における水質濃度分布（全排出量）

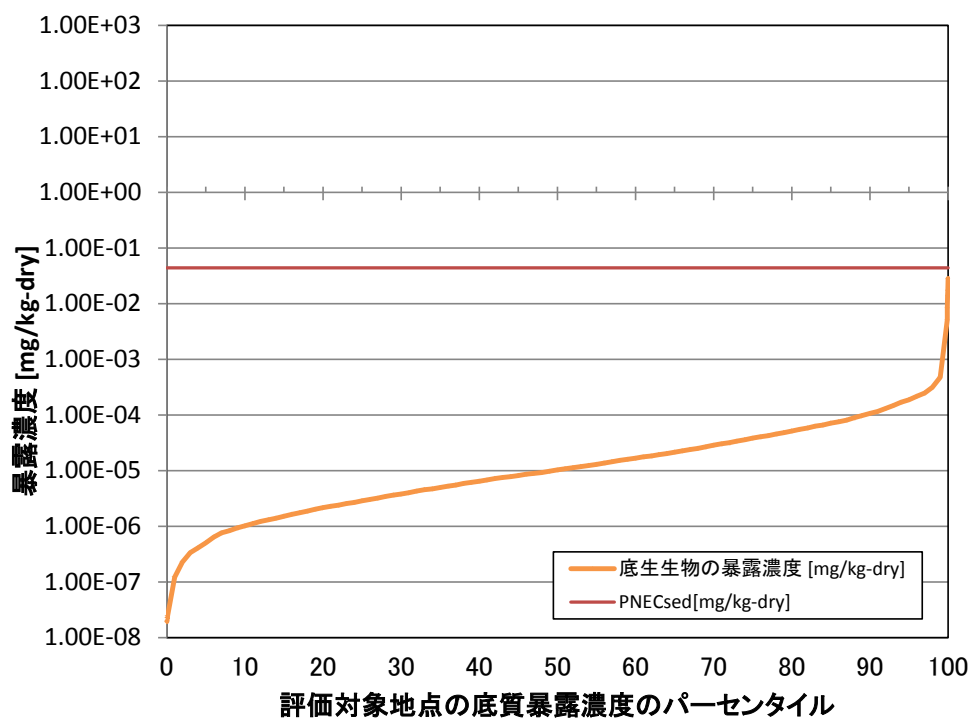


図 5-10 G-CIEMS で計算された評価対象地点における底質濃度分布（全排出量）

② 化審法対象範囲

評価対象地点 3,705 流域の水質濃度及び底質濃度並びに PECwater/PNECwater 比及び PECsed/PNECsed 比の各パーセンタイル値¹を表 5-19に、水質濃度分布を図 5-11 に、底質濃度分布を図 5-12 に示す。1≤PECwater/PNECwater 比となる評価対象地点は 1 流域、0.1 ≤PECwater/PNECwater 比<1 は 6 流域であった。また、1≤PECsed/PNECsed 比となる評価対象地点はなく、0.1≤PECsed/PNECsed 比<1 は 5 流域であった。

表 5-19 G-CIEMS の評価対象地点における水質濃度及び底質濃度並びに PEC/PNEC 比(化審法対象範囲)

パーセン タイル	順位	水生生物			底生生物		
		水質濃度 [mg/L]	PNECwater [mg/L]	PECwater/PNEC water 比 (低水流量) [-]	底質濃度 [mg/kg-dry]	PNECsed [mg/kg-dry]	PECsed/PNEC sed 比 (低水流量) [-]
0	1	4.3×10^{-10}	0.00077	5.6×10^{-7}	1.0×10^{-8}	0.044	2.4×10^{-7}
0.1	5	5.1×10^{-10}	0.00077	6.7×10^{-7}	1.2×10^{-8}	0.044	2.8×10^{-7}
1	38	2.9×10^{-9}	0.00077	3.8×10^{-6}	7.1×10^{-8}	0.044	1.6×10^{-6}
5	186	1.3×10^{-8}	0.00077	1.7×10^{-5}	3.2×10^{-7}	0.044	7.4×10^{-6}
10	371	2.8×10^{-8}	0.00077	3.7×10^{-5}	6.9×10^{-7}	0.044	1.6×10^{-5}
25	927	9.1×10^{-8}	0.00077	0.00012	2.2×10^{-6}	0.044	5.0×10^{-5}
50	1853	3.6×10^{-7}	0.00077	0.00046	8.7×10^{-6}	0.044	0.00020
75	2779	1.4×10^{-6}	0.00077	0.0018	3.5×10^{-5}	0.044	0.00079
90	3335	4.1×10^{-6}	0.00077	0.0052	9.9×10^{-5}	0.044	0.0023
95	3520	7.3×10^{-6}	0.00077	0.0095	0.00018	0.044	0.0041
99	3668	1.9×10^{-5}	0.00077	0.025	0.00047	0.044	0.011
99.9	3701	0.00021	0.00077	0.27	0.0051	0.044	0.12
99.92	3702	0.00034	0.00077	0.44	0.0084	0.044	0.19
99.95	3703	0.00057	0.00077	0.73	0.014	0.044	0.32
99.97	3704	0.00072	0.00077	0.93	0.018	0.044	0.40
100	3705	0.0012	0.00077	1.5	0.028	0.044	0.64

※0.1≤PEC/PNEC<1 のセルを網掛け、PEC/PNEC≥1 を白抜きで表示した。

¹ ここでのパーセンタイル値は、「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。

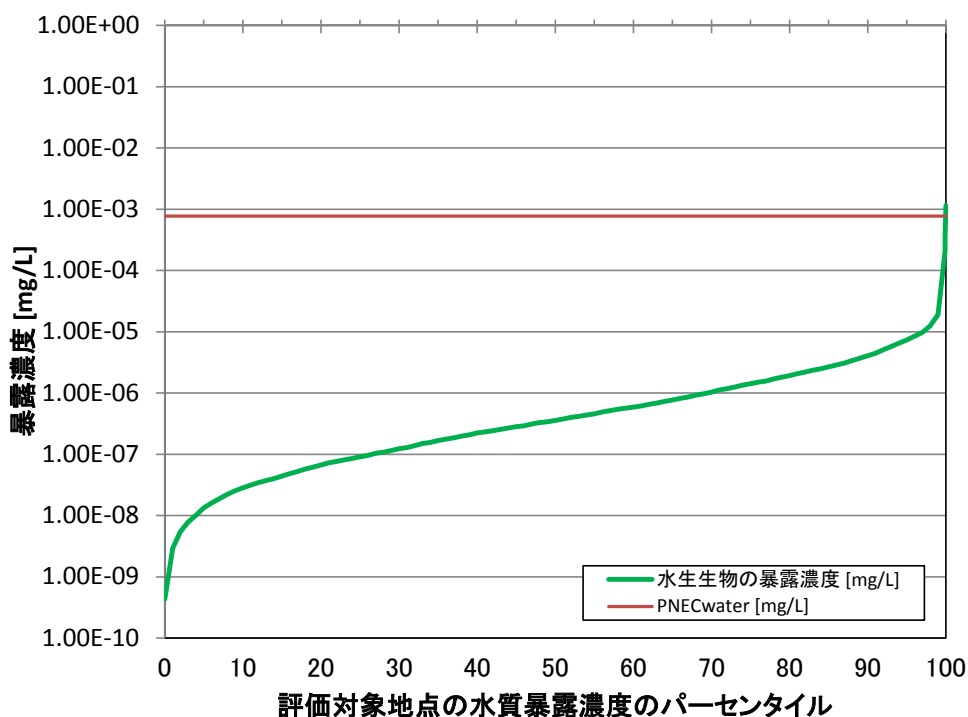


図 5-11 G-CIEMS で計算された評価対象地点における水質濃度分布（化審法対象範囲）

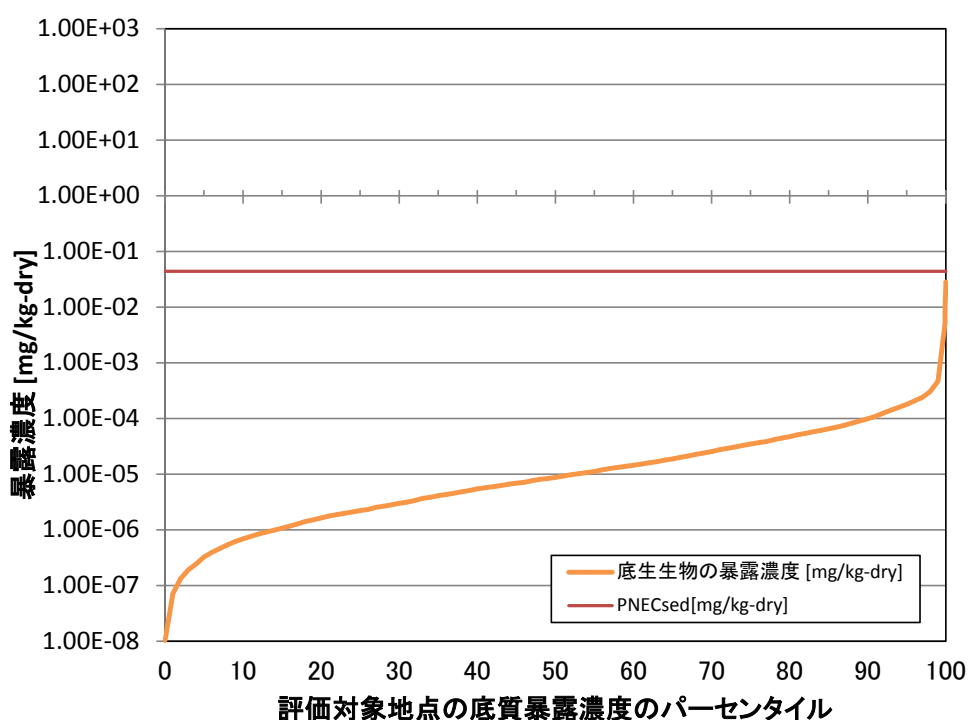


図 5-12 G-CIEMS で計算された評価対象地点における底質濃度分布（化審法対象範囲）

表 5-18と表 5-19を比較すると、環境中濃度に差違がほとんど見られないことから、本評価では全排出量を用いた推計濃度に基づく評価のみを行うこととする。以降、断わりの

ない限り、PRTR 排出量とは化審法対象範囲外の排出も含む全排出量を指すものとする。

(3) 環境中分配比率等の推計結果

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比率等の詳細を表 5-20 に示す。

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 (全排出量)
PRTR 情報による 排出先比率	大気	>99%
	水域	<1%
	土壌	<1%
G-CIEMS で計算された 環境中分配比率	大気	74%
	水域	<1%
	土壌	26%
	底質	<1%

(4) G-CIEMS の推計結果とモニタリングデータとの比較解析

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度範囲と、水生生物の暴露濃度として用いる G-CIEMS (PRTR 全排出量を使用した推計結果) の水質の推計濃度のパーセンタイル値を示した結果を図 5-13 に示す。なお、底質については、直近 5 年及び過去 10 年の底質モニタリングデータはないため比較を行わなかった。

なお、こ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 ($<3.1 \times 10^{-5}$ 、 1.8×10^{-5} 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データで検出結果がある場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。なお、平成 21 年度エコ調査のモニタリングデータでは、検出地点における濃度範囲も年間平均値では検出下限値未満となるため、当該年度の全モニタリング地点における濃度範囲としては検出下限値未満となるが、検出地点の年間平均値が算出できるため、図中では全モニタリング地点の検出下限値未満と、検出地点における 2 つを濃度範囲として示した。

この図より、モニタリングデータの濃度範囲よりも、G-CIEMS の推計濃度の方が高い傾向がみられた。

また、G-CIEMS の評価対象地点での推計結果とモニタリングデータの測定地点別比較を 7-4 節に示す。水質モニタリング濃度と G-CIEMS の水質の推計濃度の比較では、モニタリングデータにおいて不検出であることと乖離は見られないものの、検出地点の比較が行えないため、推計と実態の差の程度については言及できない。なお、G-CIEMS は平成 24 年度の PRTR 排出量データを用いているのに対し、比較しているモニタリング濃度はエコ調査が平成 21 年度のものであり、年度が異なるものを比較している点に注意が必要である。

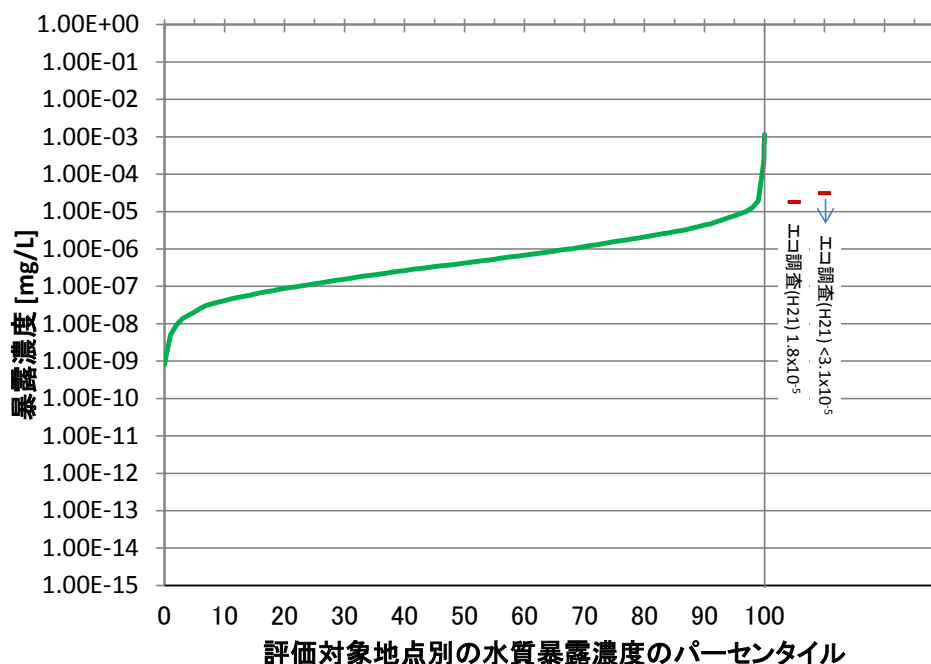


図 5-13 G-CIEMS 推計濃度とモニタリング濃度の範囲の比較(水質)

5-4-3 環境モニタリング情報に基づく評価

(1) 水生生物

直近 5 年及び過去 10 年における検出地点の水質濃度の最大値である 0.000018mg/L を年平均値とみなし水生生物の暴露濃度 PECwater に採用し、PNECwater=0.00077 mg/L との比較によりリスク推計を行った。リスク推計の結果、表 5-21 に示すように、PECwater/PNECwater 比は 0.023 となる。この地点を含め、他に PECwater/PNECwater 比が 1 以上のリスクが懸念される地点はなかった。

表 5-21 に過去 10 年の水生生物のモニタリングデータに基づくリスク推計を示す。

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	0.000018 mg/L
PNECwater	0.00077 mg/L
PECwater/PNECwater 比	0.023

(2) 底生生物

直近 5 年及び過去 10 年における底質モニタリングデータはないためリスク推計は行わなかった。

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

ここでは、5-4-1 と同じ日本版多媒体モデル MNSEM3-NITE を用いて、時間的に長期

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、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残留量の増加傾向の有無等を推し量る指標となる。

推計手法については技術ガイダンス本編Ⅶ章に準じた。

5-5-1 総括残留性 位置付け

1, 2, 4-トリメチ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 等において提唱されている計算式²を、本評価で用いているモデル MNSEM3-NITE に当てはめて求めた（詳細は技術ガイダンスⅦ章参照）。

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 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 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ンゼン、ビフェニルの合計 7 物質とした。

推計条件

モデルに入力する排出量は、5-4-1(1)で用いた 1, 2, 4-トリメチルベンゼンの数値（化審法推計排出量及び PRTR 排出量）を Reference chemical も共通で用いた。

1, 2, 4-トリメチルベンゼンと Reference chemical の物理化学的性状と環境媒体別半減期を表 5-22 及び表 5-23 に示した。

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.

² 上記資料の 4.1.1 Persistence.

表 5-22 1,2,4-トリメチルベンゼンと Reference chemical (POPs) の物理化学的性状等のデータ

項目		単位	1, 2, 4- トリメチルベンゼン	PCB126	アルドリン	デルトリン
分子量		—	120.2	326.4	364.9	380.9
融点		[℃]	-43.8	106	104	176
蒸気圧（20℃）		[Pa]	198.5	3.19×10^{-4}	1.60×10^{-2}	4.13×10^{-4}
水溶解度（20℃）		[mg/L]	51.6	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）		—	3.78	7.1	6.5	6.2
ヘンリー係数		[Pa・m ³ /mol]	624.2	7.6	4.46	1.01
有機炭素補正土壌 吸着係数		[L/kg]	537	1.51×10^6	4.90×10^4	5.62×10^4
生物濃縮係数		[L/kg]	171	17800	20000	14500
半減期	大気	[day]	0.5	120	0.4	2
	水域	[day]	28	60	332	1080
	土壌	[day]	28	120	3650	3285
	底質	[day]	112	540	1620	1620

※これらの出典については、付属資料に示した。

表 5-23 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℃）		[Pa]	7. 80 × 10 ³	1. 20 × 10 ⁴	1. 01 × 10 ⁴	1. 19
水溶解度（20℃）		[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（対数値）		—	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

※これらの出典については、付属資料に示した。

推計結果

1, 2, 4-トリメチルベンゼンと Reference chemical の Pov の推計結果を表 5-24 に示す。1, 2, 4-トリメチルベンゼンの Pov は化審法届出情報の場合で 0.1 日、PRTR 情報の場合で 0.2 日であった。このことから、1, 2, 4-トリメチルベンゼンの残留性は化審法届出情報及び PRTR 情報を用いたいずれの場合も non-POPs と同程度である。

表 5-24 1, 2, 4-トリメチルベンゼンと 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		1, 2, 4-トリメチル ベンゼン	0.1	0.2	
Reference Chemical	POPs	第一種特定 化学物質	PCB126	5.3	7.0
			アルドリン	6.0	53.1
			ディルドリン	24.5	67.5
	non-POPs	第二種特定 化学物質	トリクロロエチレン	0.1	0.1
			四塩化炭素	0.1	0.1
		良分解物質	ベンゼン	0.1	0.1
				ビフェニル	0.1

※ 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。

5-5-2 定常到達時間の推計

位置付け

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てから環境中から消失するまでの時間は、媒体別に異なる。

推計条件

1, 2, 4-トリメチ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到達時間と定義した。

ここでも、モデルに入力する排出量と排出先媒体比率は、5-4-1(1) で用いたものと同様であり、物理化学的性状と環境媒体別半減期は表 5-22 と表 5-23 に示したものである。

推計結果

化審法届出情報に基づく推計排出量を用いた場合は、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 1 ヶ月以内、土壌で 3 ヶ月以内に定常濃度に達する。一方、底質は定常到達までに 1 年程度の時間を要する。

PRTR 排出量を用いた場合は、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 1 ヶ月程度、土壌で 3 ヶ月以内に定常濃度に達する。一方、底質は定常到達までに 1 年程度の時間を要する。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。

5-6 暴露評価とリスク推計に関する不確実性解析

5-6-1 不確実性解析の概要

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う。不確実性解析は図 5-14 のフローに沿い以下の i)～v)の 5つの項目を対象とした。

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

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、性状等のデータの取得後に再評価を行う必要がある。

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。

図 5-14 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。

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、リスク懸念が十分に余裕をもってなけ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。

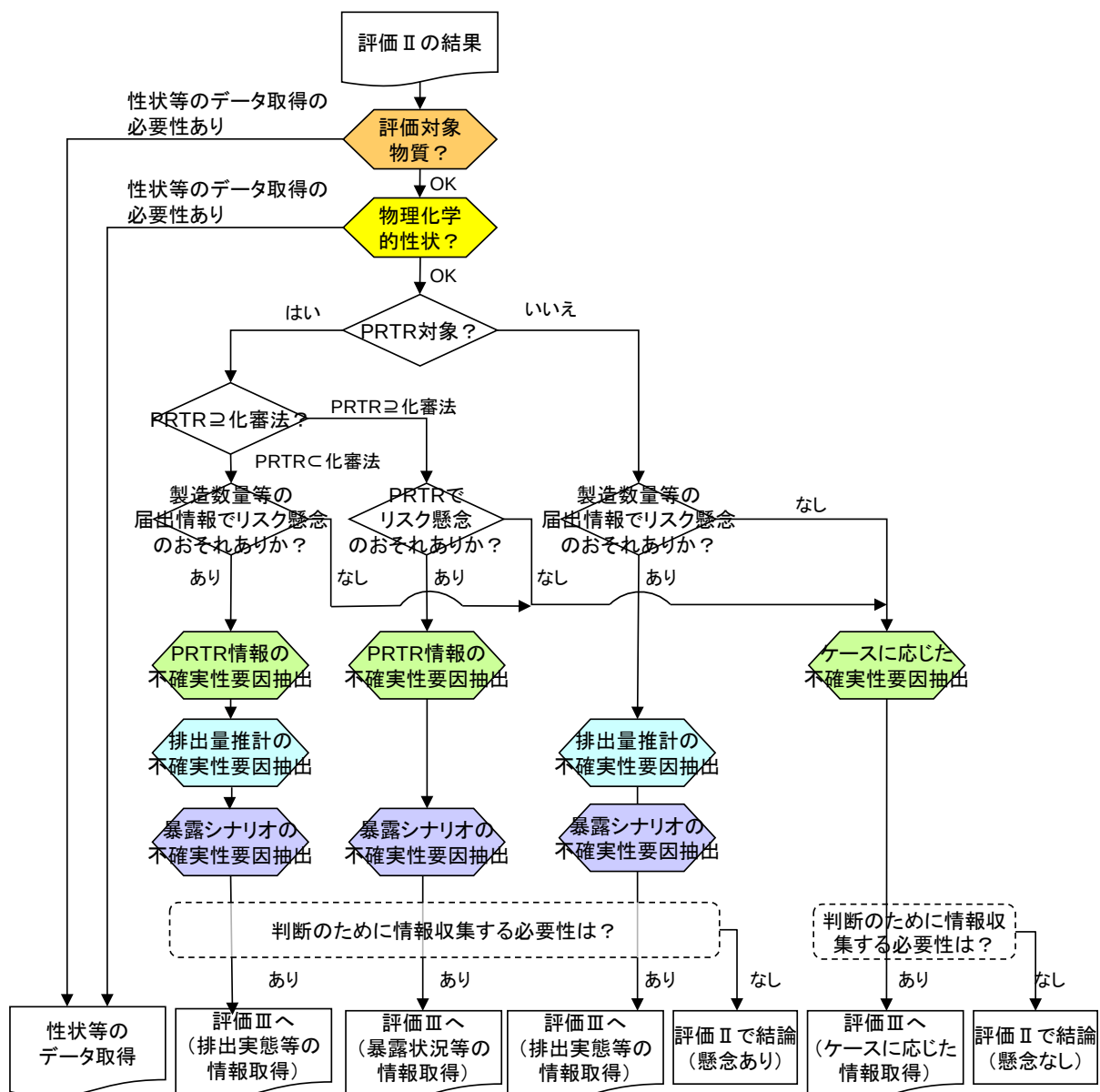


図 5-14 リスク評価における不確実性解析フロー

1, 2, 4-トリメチルベンゼンについて、不確実性解析結果の概要を表 5-25 に、詳細については以下順に示す。

表 5-25 1, 2, 4-トリメチ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。
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	—	・ 1 土壌のみでの測定値である 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。 ・ 分解半減期に推計値を用いてはいないため、不確実性は低いと考えられる。
iii) PRTR 情報等	・ 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	高	—	・ 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、PRTR 情報は化審法では届出不要となっている燃料小売業等からの排出も含まれるため、カバーする排出源の範囲については化審法届出情報より広い。また、本評価でリスク懸念となる排出源は燃料由来ではないこと、PRTR 情報は個別具体的な排出源の情報を有していることから、PRTR 情報を用いた評価結果を優先してよいと考えられる。 ・ 下水処理施設からの排出分として、PRTR 届出移動量と下水処理施設から大気移行率及び水域移行率を基に推計排出量を算出している。この推計排出量を用いたリスク推計においてリスク懸念が認められているものの、下水処理施設から大気及び水域への移行率は、物理化学的性状を基にした推算値を使用しているが、施設に依らない代表的な値として一律に設定していることから、移行率に基づく推計排出量に不確実性がある。また、本物質の移行率には生分解による寄与が考慮されておらず、この点においては推計排出量が安全側となっている。
iv) 排出量推計	・ 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	低	—	・ 化審法届出情報に基づくリスク推計結果では 1 箇所リスク懸念が認められたが、iii) から、より実態を反映していると考えられる PRTR 情報を用いた評価結果を優先してよいと考えられる。
v) 暴露シナリオ等	・ 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	—	・ 本暴露シナリオでは水域への排出量のみが考慮されているが、実際には大気排出量が多いため過小評価の可能性はある。しかし、G-CIEMS による分配比率の推計結果によれば、ほとんどが水域ではなく大気に分配される。このことから、本暴露シナリオの不確実性は、推計結果に大きく影響を及ぼすほどの不確実性ではないと考えられる。
		➤ 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）		

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
		高	—	・ モニタリングデータと G-CIEMS モデルに基づく推計水質濃度は、モニタリングデータにおいて不検出であることと乖離は見られないものの、G-CIEMS の推計で高濃度となる地点のモニタリングデータが十分でないことから整合性については言及できない。 ・ 底質モニタリングデータがないため、底質濃度の推計と実態との乖離については言及できない。 ・ 自動車からの排出分は PRTR 届出外推計排出量に含まれていなかったため、1, 3, 5-トリメチルベンゼンの自動車からの推計排出量情報より大気への排出量を推計して G-CIEMS に基づく濃度推計に用いたため、排出量に不確実性がある。しかし、G-CIEMS による分配比率の推計結果によれば、環境中では、ほとんどが水域ではなく大気に分配されることから、暴露シナリオの不確実性は、推計結果に大きく影響を及ぼすほどではないと考えられる。 ・ (再掲) 下水処理施設からの排出分として、PRTR 届出移動量と下水処理施設から大気移行率及び水域移行率を基に推計排出量を算出している。この推計排出量を用いたリスク推計においてリスク懸念が認められているものの、下水処理施設から大気及び水域への移行率は、物理化学的性状を基にした推算値を使用しているが、施設に依らない代表的な値として一律に設定していることから、移行率に基づく推計排出量に不確実性がある。また、本物質の移行率には生分解による寄与が考慮されておらず、この点においては推計排出量が安全側となっている。
		➤ 環境モニタリング情報		
		高	—	・ 水質においては、採用した環境モニタリング情報では直近 5 年の最大濃度でリスク懸念はなかった。ただし、水質のモニタリングデータは PRTR 届出排出量の多い事業所付近での測定結果ではないため不確実性が大きい。 ・ 底質のモニタリングデータがないため、底質のリスク推計の不確実性は大きい。

1

2 5-6-2 評価対象物質

3 評価対象物質について、以下の点を検討する。

- 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
5 ータの被験物質など）は一致しているか。

6 評価対象物質（1, 2, 4-トリメチルベンゼン）の性状データ等の被験物質は、1, 2,

4-トリメチルベンゼンであり、評価対象物質と一致している。

5-6-3 物理化学的性状等

Kocについては、1 土壌のみでの測定値であった（2 章参照）ため、感度解析を行った。技術ガイダンス（I 章）における実測値の感度解析の方法に従い、排出源ごとの暴露シナリオにおける PEC/PNEC を計算したが、リスク懸念箇所数に変化がなかった。また、分解半減期については、半減期データに推計値を用いてはいないため、不確実性は低いと考えられる。以上より、リスク推計結果に及ぼす不確実性は低いと考えられるため、更なる調査の必要性は低いと判断した。

5-6-4 PRTR 情報等の不確実性

1, 2, 4-トリメチルベンゼンは、化審法における届出対象物質と化管法における PRTR 対象物質が一致しており、PRTR 情報は化審法では届出不要となっている燃料小売業等からの排出も含まれるため、カバーする排出源の範囲については化審法届出情報より広い。また、本評価でリスク懸念となる排出源は燃料由来ではないこと、PRTR 情報は個別具体的な排出源の情報を有していることから、PRTR 情報を用いた評価結果を優先してよいと考えられる。

下水処理施設からの排出分として、PRTR 届出移動量と下水処理施設から大気移行率及び水域移行率を基に推計排出量を算出している。この推計排出量を用いたリスク推計においてリスク懸念が認められているものの、下水処理施設から大気及び水域への移行率は、物理化学的性状を基にした推算値を使用しているが、施設によらない代表的な値として一律に設定していることから、移行率に基づく推計排出量に不確実性がある。また、本物質の移行率には生分解による寄与が考慮されておらず、この点においては推計排出量が安全側となっている。

5-6-5 排出量推計の不確実性

1, 2, 4-トリメチルベンゼンについては、化審法届出情報に基づくリスク推計結果では 1 箇所ですリスク懸念が認められたが、PRTR 情報は個別具体的な排出源の情報を有しており、PRTR 情報を用いた評価結果を優先してよいと考えられるため、化審法届出情報に基づく排出量推計について不確実性を検討する必要性は低いと考えられる。なお、PRTR 情報に基づくリスク推計結果では 2 箇所ですリスク懸念が認められたが、リスク懸念が認められた地点は化審法届出情報に基づくリスク推計ではカバーしていない下水道終末処理施設からの排出を考慮した地点である。

5-6-6 暴露シナリオの不確実性

排出源ごとの暴露シナリオについては、水域への排出量のみが考慮されているが、実際には大気排出量が多いため過小評価の可能性はある。しかし、G-CIEMS による分配比率の推計結果（5-4-2(3)の表 5-20）によれば、ほとんどが水域ではなく大気に分配される。このことから、暴露シナリオの不確実性は、推計結果に大きく影響を及ぼすほどの不確実性ではないと考えられる。

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）については、モニタリングデータと G-CIEMS モデルに基づく比較において、モニタリングデータが不検出であることと G-CIEMS の推計水質濃度の間に乖離は見られない。しかし、G-CIEMS

1 の推計で高濃度となる地点のモニタリングデータが十分でないことから整合性については言
2 及できない。また、底質モニタリングデータがないため、底質濃度の推計と実態との乖離に
3 ついては言及できない。また、G-CIEMS による濃度推計に用いた平成 24 年度の PRTR 届出
4 外推計では、自動車からの排出分は PRTR 届出外推計排出量に含まれていなかったため、1,
5 3, 5-トリメチルベンゼンの自動車からの推計排出量情報より大気への排出量を推計して
6 G-CIEMS に基づく濃度推計に用いたため、排出量に不確実性がある。しかし、G-CIEMS に
7 よる分配比率の推計結果によれば、環境中では、ほとんどが水域ではなく大気に分配される
8 ことから、暴露シナリオの不確実性は、推計結果に大きく影響を及ぼすほどではないと考え
9 られる。下水処理施設からの排出分については、前述のように推計排出量に不確実性がある。

10
11 環境モニタリング情報については、水質モニタリングの採用データは、直近 5 年の範囲の
12 データであり、製造輸入数量実績が概ね横ばいであることから採用可能であるとした。リス
13 ク推計においてリスク懸念とされた情報はなかった。ただし、PRTR 届出排出量の多い事業
14 所付近での測定結果ではないため、リスク推計の不確実性は大きい。底質モニタリングにつ
15 いては、直近 5 年及び過去 10 年分における底質モニタリングデータはなかったため、リス
16 ク推計の不確実性は大きい。

6 まとめと結論

1, 2, 4-トリメチ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

1, 2, 4-トリメチ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。1, 2, 4-トリメチルベンゼンの水生生物に係る PNEC_{water} は二次消費者（魚類）の急性毒性値のみから得られた値であり、不確実性が大きい。また、PNEC_{sed} は、PNEC_{water} に平衡分配法を用いて求めており、平衡分配法による算出には方法とパラメータ双方に不確実性があると考えられる。

表 6-1 有害性情報のまとめ(表 4-2の再掲)

	水生生物	底生生物
PNEC	0.00077 mg/L	0.044mg/kg-dry
キースタディの毒性値	7.7 mg/L	—
不確実計数積 UFs	10000	—
キースタディのエンドポイント	二次消費者（魚類稚魚）の 96 時間 半数致死濃度（LC50）	水生生物の PNEC _{water} と Koc から 推計した値

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

1, 2, 4-トリメチ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 18355 の排出源のうち「リスク懸念」と推計されたのは 2 箇所、底生生物についても 2 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 5-11 の再掲)

	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	2	18355
底生生物に対するリスク推計結果	2	18355

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結果を表 6-3 に示す。水生生物及び底生生物について、水質濃度及び底質濃度の推計の

中から評価対象地点 3,705 流域を対象として評価した結果、「リスク懸念」と推計された流域は 1 地点あった。水生生物の PECwater/PNECwater 比は最大で 1.5、底生生物の PECsed/PNECsed 比は最大で 0.64 であった。

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 5-18再掲)

パーセン タイル	順位	水生生物			底生生物		
		水質濃度 [mg/L]	PNECwater [mg/L]	PECwater/PNEC water 比 (低水流量) [-]	底質濃度 [mg/kg-dry]	PNECsed [mg/kg-dry]	PECsed/PNEC sed 比 (低水流量) [-]
0	1	8.0x10 ⁻¹⁰	0.00077	1.0x10 ⁻⁶	1.9x10 ⁻⁸	0.044	4.4x10 ⁻⁷
0.1	5	1.0x10 ⁻⁹	0.00077	1.3x10 ⁻⁶	2.5x10 ⁻⁸	0.044	5.6x10 ⁻⁷
1	38	5.0x10 ⁻⁹	0.00077	6.5x10 ⁻⁶	1.2x10 ⁻⁷	0.044	2.8x10 ⁻⁶
5	186	2.1x10 ⁻⁸	0.00077	2.7x10 ⁻⁵	5.1x10 ⁻⁷	0.044	1.1x10 ⁻⁵
10	371	4.2x10 ⁻⁸	0.00077	5.4x10 ⁻⁵	1.0x10 ⁻⁶	0.044	2.3x10 ⁻⁵
25	927	1.2x10 ⁻⁷	0.00077	0.00015	2.9x10 ⁻⁶	0.044	6.5x10 ⁻⁵
50	1853	4.2x10 ⁻⁷	0.00077	0.00054	1.0x10 ⁻⁵	0.044	0.00023
75	2779	1.6x10 ⁻⁶	0.00077	0.0020	3.8x10 ⁻⁵	0.044	0.00087
90	3335	4.3x10 ⁻⁶	0.00077	0.0056	0.00011	0.044	0.0024
95	3520	7.7x10 ⁻⁶	0.00077	0.010	0.00019	0.044	0.0043
99	3668	1.9x10 ⁻⁵	0.00077	0.025	0.00048	0.044	0.011
99.9	3701	0.00021	0.00077	0.27	0.0051	0.044	0.12
99.92	3702	0.00034	0.00077	0.44	0.0084	0.044	0.19
99.95	3703	0.00057	0.00077	0.73	0.014	0.044	0.32
99.97	3704	0.00072	0.00077	0.93	0.018	0.044	0.40
100	3705	0.0012	0.00077	1.5	0.028	0.044	0.64

※0.1≤PEC/PNEC<1 のセルを網掛け、PEC/PNEC≥1 を白抜きで表示した。

(2) 環境モニタリング情報に基づく評価

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、直近 5 年及び過去 10 年のモニタリングデータで最大の PECwater/PNECwater 比は 0.023 であった。底生生物については、直近 5 年及び過去 10 年における底質モニタリングデータはなかったため、リスク推計を行わなかった。

① 水生生物

過去 10 年における最大の水質濃度 0.000018mg/L を水生生物の暴露濃度 PECwater とし、PECwater/PNECwater 比を算出してリスク推計を行った。リスク推計の結果を表 6-4 に示す。

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	0.000018 mg/L (水質モニタリングデータから設定)
PNECwater	0.000772 mg/L
PECwater/PNECwater 比	0.023

また、G-CIEMS の評価対象地点での全国の濃度分布においては、5-3-2(4)の G-CIEMS 推計濃度とモニタリング濃度との比較結果から、G-CIEMS の推計で高濃度となる地点のモニタリングデータが十分でないことから整合性については言及できないが、モニタリング結果で不検出であることと G-CIEMS の推計濃度とは矛盾していない。

なお、G-CIEMS は平成 24 年度の PRTR 排出量データを用いているのに対し、比較しているモニタリング濃度はエコ調査が平成 21 年度のものであり、年度が異なるものを比較している点に注意が必要である。

② 水生生物

直近 5 年及び過去 10 年における底質モニタリングデータはないためリスク推計は行わなかった。

6-3 考察とまとめ

以下に各評価結果を順に示し、まとめて結論を導く。

生態影響の観点での有害性評価を実施した結果、水生生物に対する PNEC_{water} は、二次消費者である魚類の急性毒性値を、急性毒性から慢性毒性への不確実係数「100」、栄養段階間の感受性差に関する不確実係数「10」、室内試験から野外環境への不確実係数「10」、すなわち、不確実係数積「10000」で除して得られた。底生生物に対する PNEC_{sed} は PNEC_{water}、Koc から平衡分配法により求めた値である。

水生生物に対する当該物質を含む複数物質によるカテゴリー評価を実施している OECD 化学物質共同評価プログラムでは¹、このカテゴリーに含まれる化学物質の魚類、甲殻類及び藻類の急性毒性値は 1～10mg/L の範囲とされていることから、急性毒性に関しては、栄養段階間の感受性差は大きくないと推定される。

平成 24 年度実績の PRTR 届出情報によると、1，2，4-トリメチルベンゼンは主として輸送用機械器具製造業を営む事業所から排出される。PRTR 届出情報を用いた排出源ごとの暴露シナリオに基づく水生生物・底生生物に対するリスク推計の結果、全国の排出源 18355 のうちリスク懸念はどちらも 2 箇所であった。

環境モニタリング調査結果に基づき、直近 5 年間及び過去 10 年間の水質データを用いて水生生物に対するリスク推計を行った結果、リスクが懸念される箇所はなかった。

平成 24 年度実績の PRTR 情報を用いた様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオに基づく G-CIEMS モデルの解析結果からは、水生生物に対するリスク懸念流域は評価対象 3,705 流域中 1 流域で、PEC_{water}/PNEC_{water} 比は最大で 1.5 となった。底生生物に対するリスク懸念流域は評価対象 3,705 流域中 0 流域で、PEC_{sed}/PNEC_{sed} 比は最大で 0.64 となった。また、G-CIEMS 推計濃度とモニタリング濃度は比較可能な地点数が十分でないが、比較可能であった地点での結果を考慮して、計算された PEC には誤差が生じるため、PEC/PNEC 比が 0.1～1 となる場合をリスク懸念の可能性が考えられる範囲とみなした場合、リスク懸念の可能性のある評価対象地点としては、水生生物では、 $0.1 \leq \text{PEC}_{\text{water}}/\text{PNEC}_{\text{water}}$ 比 < 1 となる 6 流域、底生生物では、 $0.1 \leq \text{PEC}_{\text{sed}}/\text{PNEC}_{\text{sed}}$ 比 < 1 となる 5 流域が挙げられる。

なお、G-CIEMS の解析結果とモニタリング結果は、水質モニタリング結果で不検出であることと G-CIEMS の推計濃度とは矛盾していないが、データが十分でなく整合性については言及できない。また、底質モニタリングデータがないため、底質濃度の推計と実態との乖離については言及できない。

¹ OECD では「C9 Aromatics Hydrocarbon Solvents」に含まれる物質として、1，2，4-トリメチルベンゼン、1，3，5-トリメチルベンゼン (CAS108-67-8)、Benzene, ethylmethyl (ethyltoluene mixed isomers) (CAS25550-14-5)、Solvent naphtha, (petroleum), light aromatic (CAS64742-95-6) の 4 物質を対象に有害性評価を実施。(出典：OECD(2012) : SIDS INITIAL ASSESSMENT PROFILE C9Aromatic Hydrocarbon Solvents Category(<http://webnet.oecd.org/hpv/ui/handler.axd?id=bd162768-5b30-44e0-bfc0-0f639b113191>))

また、自動車からの排出分は PRTR 届出外推計排出量に含まれていなかったため、1, 3, 5-トリメチルベンゼンの自動車からの推計排出量情報より推計して G-CIEMS に基づく濃度推計に用いたため、排出量に不確実性がある。しかし、G-CIEMS モデルの予測では大気排出後、主に大気と土壌に分配すると考えられ、水質及び底質濃度への寄与は小さいと考えられることから、不確実性は低いと考えられる。

下水処理施設からの排出分として、PRTR 届出移動量と下水処理施設から大気移行率及び水域移行率を基に推計排出量を算出している。この推計排出量を用いたリスク推計においてリスク懸念が認められているものの、下水処理施設から大気及び水域への移行率は、物理化学的性状を基にした推算値を使用しているが、施設に依らない代表的な値として一律に設定していることから、移行率に基づく推計排出量に不確実性がある。また、本物質の移行率には生分解による寄与が考慮されておらず、この点においては推計排出量が安全側となっている。

PRTR 届出情報による 1, 2, 4-トリメチルベンゼンの水域への排出量は平成 22 年度以降おおむね横ばいであり、当該物質の性状から大気への排出が水域へは移行しにくいと考えられること、平成 22 年度以降製造数量は概ね横ばいと見られることから、現在の状況が継続する限り、全体として環境濃度が大きく上昇する可能性は低いのではないかと考えられる。

以上を総合して、現在得られる情報・知見の範囲では現状レベルの排出が継続しても、広範な地域においてリスクが懸念される状況になるとは見込まれないと判断される。

6-4 補足事項

特になし。

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	1.1
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。

出典)

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

CRC(2013): Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 94th ed., CRC Press, 2013-2014.

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

HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, (2014-07-23 閲覧).

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

MHLW, METI, MOE(2014): 化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

MITI(1976): MITI. 1,2,4-トリメチルベンゼン (試料 No.K-113) の濃縮度試験成績報告書. 既存化学物質点検, 1976.

MITI(1980): MITI. 1,2,4-トリメチルベンゼン (試料 No.K-113) の分解度試験報告書. 既存化学物質点検, 1980.

MOE(2009): MOE. 化学物質の環境リスク評価 第7巻, 1,2,4-トリメチルベンゼン. 2009.

NIST: NIST. Chemistry WebBook. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>, (2014-07-23 閲覧).

PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2014-07-23 閲覧).

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 5-22 及び表 5-23 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	デルトリ	トリクロエ	四塩化	ベンゼン	ビフェニル
分子量	—	—	—	—	—	—	—
融点	※1	※2	※2	※3	※3	※3	※4
蒸気圧 (20℃)	※1	※4	※2	※3	※3	※3	※2
水溶解度 (20℃)	※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 Edition, CRC-Press, 1997

※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(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 SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009

※5 Estimation Program Interface (EPI) Suite 内に収載されている実測値

※6 回帰式により logPow から計算

※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 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)

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 5-22 及び表 5-23 を参照。

表 7-3 Reference chemical の最長半減期と情報源等

	項目		PCB126	アルドリ ン	デルトリ ン	トリクロ リン	四塩化炭 素	ベンゼン	ビフェニ ル
大気	機序別 半減期	OHシカ反応	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	機序別 半減期	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	半機序別 減期	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	半機序別 減期	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	－	－	－

情報源等：

※1 Hazardous Substances Data Bank (HSDB)

※2 SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009

※3 Handbooks of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, 2nd Edition, CRC-Press, 1997

※4 Handbook of Environmental FATE & EXPOSURE, Lewis Pub, 1989

※5 Handbook of Environmental Degradation Rates, Lewis Pub, 1991

※6 Estimation Program Interface (EPI) Suite 内の AOPWIN による推定値

※7 Estimation Program Interface (EPI) Suite 内の BIOWIN3 の格付けから換算

7-4 環境モニタリングデータとモデル推計結果の比較解析

(1) 地点別のモニタリング濃度と G-CIEMS のモデル推計濃度との比較

モニタリングデータと、その測定地点と対応付けられる G-CIEMS の評価対象地点の推計濃度の比較結果を下図に示す。

エコ調査(平成 21 年度)の水質モニタリングデータについては、比較可能な全地点において不検出であるため、G-CIEMS 推計水質濃度／水質モニタリング濃度の比を算出できないが、モニタリングデータが不検出であることと G-CIEMS の推計水質濃度の間に乖離は見られない。

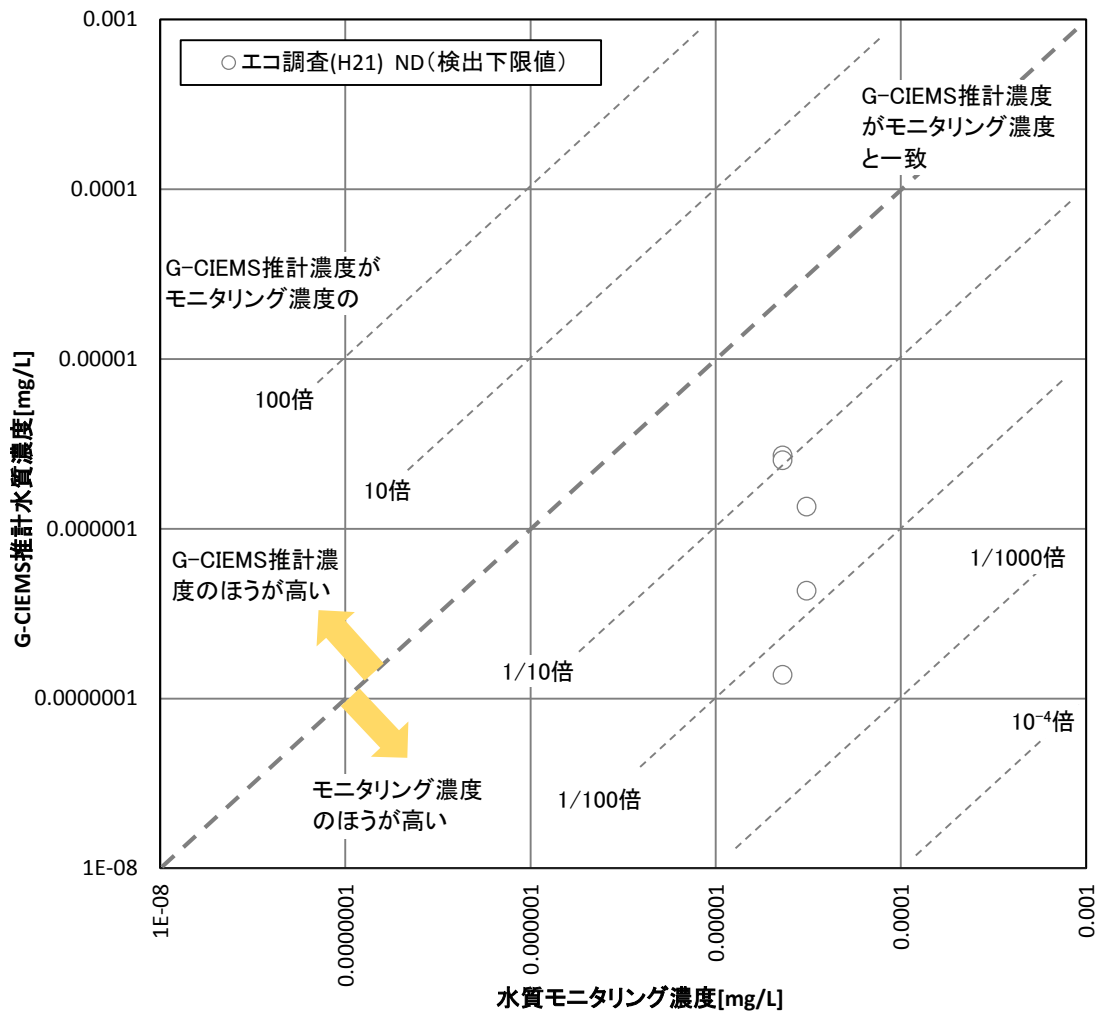


図 7-1 評価対象地点の G-CIEMS 推計水質濃度とモニタリング水質濃度の比較(エコ調査(平成 21 年度))

(2) 地点別のモニタリング濃度と PRAS-NITE のモデル推計濃度との比較

モニタリングデータと、その測定地点と対応付けられる PRAS-NITE の評価対象地点の推計濃度の比較結果を下図に示す。

ただし、PRAS-NITE は平成 24 年度の PRTR 排出量データを用いているのに対し、比較しているモニタリングデータは平成 21 年度のものであり、年度が異なるものを比較している点に注意が必要である。

また、この水質モニタリングデータは不検出であったため、PRAS-NITE 推計水質濃度／水質モニタリング濃度の比は算出できなかった。

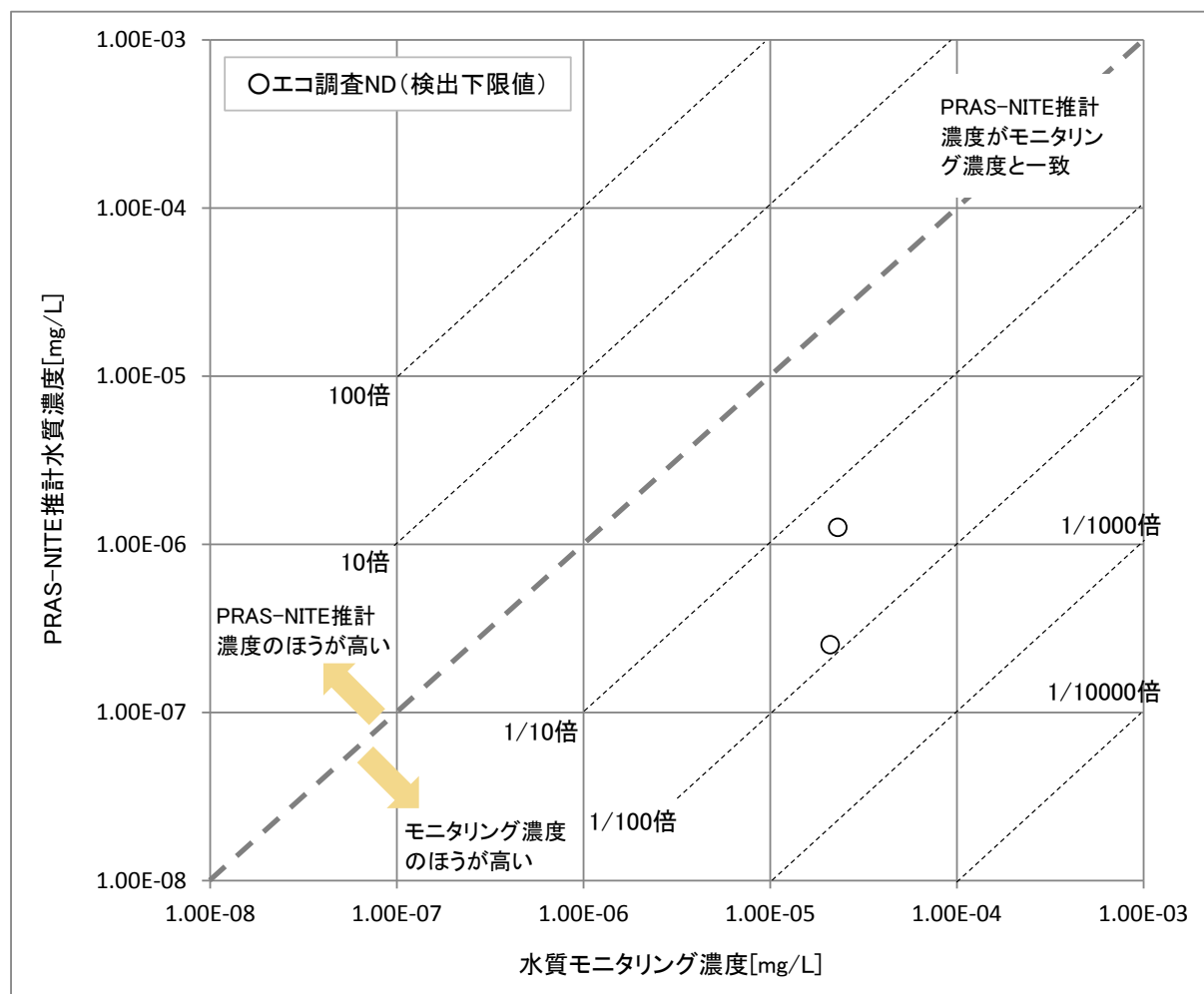


図 7-2 PRAS-NITE 推計水質濃度とモニタリング水質濃度の比較(エコ調査(平成 21 年度))

7-5 生態影響に関する有害性評価Ⅱ

7-5-1 各キースタディの概要

(1) 水生生物

<二次消費者（又は捕食者）（魚類）>

【キースタディ】

Pimephales promelas 死亡；96時間 LC₅₀ 7.72mg/L (7,720µg/L)

Geiger et al. (1986)^[1] は、ファットヘッドミノー *Pimephales promelas* の急性毒性試験を、Aldrich Chemical Co.製純度 99%の被験物質を用いて実施した。試験は流水式（6.6 回転/日）で実施され、（助剤）対照区、5 濃度区（設定濃度希釈率 0.50-0.65、設定濃度公比 1.67-2.0）で行われている。助剤としておそらく分散剤が用いられている。被験物質はガスクロマトグラフィーで実測され、実測濃度（corrected average）は 1.60、2.85、4.38、8.09、11.9 mg/L（公比 1.5-1.8）であった。実測濃度に基づき、半数致死濃度(LC₅₀)7.72mg/L が算出された。

出典)

【1】 Geiger, D.L., S.H. Poirier, L.T. Brooke, and D.J. Call (1986): Acute Toxicities of Organic Chemicals to Fathead Minnows (*Pimephales promelas*) Volume III. Ctr. for Lake Superior Environ. Stud., Univ. of Wisconsin-Superior, Superior, WI :328. (AQUIRE Ref.no. 12858)

7-5-2 平衡分配法による PNEC_{sed} の算出

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 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 PNEC_{sed} 0.044 mg/kg-dry（湿重量換算 0.0096mg/kg-wet）を得た。

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

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)	$= (K_{susp-water} / RHO_{susp} \times PNEC_{water} \times 1,000 = (14.3 / 1150) \times 0.00077 \times 1000$	0.0096
K _{susp-water} [m ³ /m ³]	浮遊物質／水分配係数	$= F_{water\ susp} + F_{solid\ susp} \times (K_p\ susp) / 1,000 \times RHO_{solid} = 0.9 + 0.1 (53.7 / 1000) \times 2500$	14.325
F _{water susp} [m _{water3} /m _{susp3}]	浮遊物質の液相率	デフォルト値	0.9
F _{solid susp} [m _{solid3} /m _{susp3}]	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	$= F_{oc\ susp} \times K_{oc} = 0.1 \times 537$	53.7
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	537

パラメータ名		内容	算出式	算出結果
	RHOsolid[kgsolid/msolid3]	固体密度	デフォルト値	2,500
	RHOsusp[kgwwt/m3]	浮遊物質のかさ密度	デフォルト値	1,150
	PNECwater[mg/L]	水質の予測無影響濃度	水生生物 PNECwater	0.0007
	PNECsed(乾重量)[mg/kgdwt]	底質の予測無影響濃度(乾重量ベース)	$PNECsed(湿重量) \times CONV_{susp} = 0.0096 \times 4.6$	0.0442
	CONVsusp[kgwwt/kgdwt]	浮遊物質中の対象物質濃度換算係数(湿重量→乾重量)	$= RHOsusp / (F_{solid\ susp} \times RHOsolid) = 1150 / (0.1 \times 2500)$	4.6
	RHOsusp[kgwwt/m3]	浮遊物質のかさ密度	デフォルト値	1,150
	Fsolid susp[msolid3/msusp3]	浮遊物質の固相率	デフォルト値	0.1
	RHOsolid[kgsolid/msolid3]	固体密度	デフォルト値	2,500

1

2 7-5-3 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

3 (1) 既存のリスク評価書における有害性評価の結果

4 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
5 された予測無影響濃度 (PNEC) 等を表 7-6 にそれぞれ示した。

6 表 7-5 1, 2, 4-トリメチ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7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]	○(Profile のみ)
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]	※OECD評価済み

7 凡例) ○: 情報有り、×情報無し []内数字: 出典番号

8

9 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】	0.012mg/L (PNEC)	甲殻類	<i>Artemia salina</i>	24 時間半数致死濃度(LC ₅₀) 12mg/L	1,000

10 []内数字: 出典番号

(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。1, 2, 4-トリメチルベンゼンは、諸外国において水生生物保全に係る水質基準等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
(1, 2, 4-トリメチルベンゼン)

対象国	担当機関	水質目標値名		水質目標値 ($\mu\text{g/L}$)
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
		UK Standard Surface Water	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]	カナダ環境省	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(2009): 化学物質の環境リスク評価 (第7巻)
(<https://www.env.go.jp/chemi/report/h21-01/pdf/chpt1/1-2-2-16.pdf>)

- 1 [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
2 ク評価書
- 3 [3] 独立行政法人産業技術総合研究所: 詳細リスク評価書シリーズ
- 4 [4] OECD: SIDS INITIAL ASSESSMENT PROFILE
5 (<http://webnet.oecd.org/hpv/ui/handler.axd?id=bd162768-5b30-44e0-bfc0-0f639b113191>)
- 6 [5] European Union: European Union Risk Assessment Report.
- 7 [6] International Programme on Chemical Safety: Environmental Health Criteria
- 8 [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
9 International Chemical Assessment Document)
- 10 [8] Government of Canada, Environmental Canada, Health Canada(1993): Canadian Environmental
11 Protection Act Priority Substances List Assessment Report (カナダ環境保護法優先物質評価書)
- 12 [9] Australia NICNAS: Priority Existing Chemical Assessment Reports
- 13 [10] BUA-Report
- 14 [11] Japan チャレンジプログラム
15 ([http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/challenge/taisyuu_challenge/li](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/challenge/taisyuu_challenge/list0708.pdf)
16 [st0708.pdf](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/challenge/taisyuu_challenge/list0708.pdf))
- 17 [12] United States Environmental Protection Agency Office of Water Office of Science and Technology
18 (2009): National Recommended Water Quality Criteria
19 (<http://www.epa.gov/waterscience/criteria/wqctable/index.html>)
- 20 [13] Environment Agency: Chemical Standards
21 (<http://evidence.environment-agency.gov.uk/chemicalstandards/>)
- 22 [14] Environment Canada: Canadian Environmental Protection Act, 1999 Federal Environmental
23 Quality Guidelines
- 24 [15] Federal Ministry for the Environment, Nature Conservation and Nuclear Safety(2010): Water
25 Resources Management in Germany Part 2- Water quality -
- 26 [16] Crommentuijn, T., D.F. Kalf, M.D. Polder, R. Posthumus, and E.J. van de Plassche. 1997. Maximum
27 Permissible Concentrations and Negligible Concentrations for Pesticides. Report No. 601501002.
28 National Institute of Public Health and Environmental Protection, Bilthoven, The Netherlands.
- 29 [17] National Institute of Public Health and the Environment(1999): Environmental Risk Limits in
30 Netherlands, Setting Integrated Environmental Quality Standards for Substances in the Netherlands,
31 Environmental quality standards for soil, water & air.

1 基本情報

優先評価化学物質通し番号	49
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS 番号	95-63-6

2

3 【生態毒性】

4 収集データ

番号	生物種				被験物質 純度 (%)	エンドポイント等		暴露期間 (日)	毒性値(μg/L)	信頼性 ランク	出典	備考)
	栄養段階	生物分類	生物種	種名		エンドポイント	影響内容					
1	一次消費者	甲殻類	アミ科	<i>Americamysis bahia</i>	100	LC ₅₀	MOR	4	約 2000	4	[1]	事業者データで、詳細は開示されていない。
2	一次消費者	甲殻類	オオミジンコ	<i>Daphnia magna</i>	>=97	EC ₅₀	IMM	2	3,610	4	[2]	スクリーニング評価でのキースタディ試験条件等不明
3	一次消費者	甲殻類	テナガエビ科	<i>Palaemonetes pugio</i>		LC ₅₀	MOR	4	5400	4	[3]	二次文献の可能性あり、試験条件等の詳細情報は記載されていない
4	一次消費者	甲殻類	オオミジンコ	<i>Daphnia magna</i>	100	EC ₅₀		2	約 6140	4	[4]	事業者データで、詳細は開示されていない。
5	二次消費者	魚類	ニジマス	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	100	LC ₅₀	MOR	4	9220	4	[5]	評価 I でのキースタディ事業者データで、詳細は開示されていない。
6	二次消費者	魚類	ニジマス	<i>Oncorhynchus mykiss</i>		LC ₅₀	MOR	1	5000	3	[6]	暴露期間、濃度区数等が試験法から逸脱
7	二次消費者	魚類	ファットヘッドミノ	<i>Pimephales promelas</i>	99	LC ₅₀	MOR	4	7720	2	[7]	
8	二次消費者	魚類	メダカ	<i>Oryzias latipes</i>		LC ₅₀	MOR	2	18000	3	[8]	暴露期間が不適。試験条件等の情報が不足

5 【エンドポイント】 EC50 (Median Effective Concentration) : 半数影響濃度、LC50 (Median Lethal Concentration) : 半数致死濃度、

6 【影響内容】 IMM (Immobilization) : 遊泳障害、MOR (Mortality) : 死亡、PGRT (Population Growth Rate) : 個体群の生長率

1 【信頼性】

2 信頼性ランク 1 : 信頼性あり (制限なし)、2 : 信頼性あり (制限あり)、3 : 信頼性なし、4 : 評価不能

3
4 出典)

- 5 [1] EUROPEAN COMMISSION (2000) : IUCLID Dataset. (Exxon Biomedical Sciences, Inc. (1986) : Static-Renewal Acute Mysid Shrimp Tox
6 Test.EBSI Report #86MRL 228.)
- 7 [2] Bobra,A.M., W.Y. Shiu, and D. Mackay (1983) : A Predictive Correlation for the Acute Toxicity of Hydrocarbons and Chlorinated Hydrocarbons to
8 the Water Flea (*Daphnia magna*). Chemosphere, 12(9-10): 1121-1129.
- 9 [3] Neff,J.M., J.W. Anderson, B.A. Cox, R.B.,Jr. Laughlin, S.S. Rossi, and H.E. Tatem (1976) : Effects of Petroleum on Survival, Respiration and
10 Growth of Marine Animals. Publ. - Am. Inst. Biol. Sci.: 516-539.
- 11 [4] EUROPEAN COMMISSION (2000) : IUCLID Dataset. (Exxon Biomedical Sciences, Inc. (1992) : Acute *Daphnia* Toxicity Test (Solvesso
12 100).EBSI Report #92MRL 122.)
- 13 [5] EUROPEAN COMMISSION(2000): IUCLID Dataset. (Exxon Biomedical Sciences, Inc. (1992) : Acute Fish ToxicityTest, EBSI Report
14 #92MRL123.)
- 15 [6] Applegate,V.C., J.H. Howell, A.E.,Jr. Hall, and M.A. Smith (1957) : Toxicity of 4,346 Chemicals to Larval Lampreys and
16 Fishes.Spec.Sci.Rep.Fish.No.207, Fish Wildl. Serv., U.S.D.I., Washington, DC:157 p.
- 17 [7] Geiger,D.L., S.H. Poirier, L.T. Brooke, and D.J. Call (1986) : Acute Toxicities of Organic Chemicals to Fathead Minnows (*Pimephales promelas*)
18 Volume III. Center for Lake Superior Environmental Studies, University of Wisconsin, Superior, WI:328 p.
- 19 [8] 経済産業省 (1976) : 1,2,4-トリメチルベンゼンの濃縮度試験成績報告書
20

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

優先通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

融点

収集データ

情報源名	項目	値	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	-44 °C							2B	×			p.2533
2 CCD	凝固点	-43.91 °C	-	-	-	-	-		2B	×			Pseudocumene
3 CRC	融点	-43.8 °C[- 43.8(0.1)]	-	-	-	-	-		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	融点	-43.77 °C	-	-	-	-	-		2B	×			Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
5 EPI Suite	融点	-22.46 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
6 HSDB	融点	-43.77 °C							2B	×		その他	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
7 IUCLID	融点	-43.8 °C							4A	×		その他	p.4
8 Mackay	融点	-43.77 °C	-	-	-	-	-		2B	×		Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th CRC Press, Boca Raton, FL.	p.481
9 Merck	融点	-43.78 °C	-	-	-	-	-		2B	×	mp -43.78° (Hirschler, Falconer)	Hirschler, Falconer, J. Am. Chem. Soc. 68, 210 (1946)	Monograph Number: 0007915
10 MOE初期評価	融点	-43.8 °C	-	-	-	-	-		2B	○		Lide, D.R. (ed.) (1994-1995): CRC Handbook of Chemistry and Physics. 75th ed. CRC Press Inc., Boca Raton, FL.	p.1
11	融点	-43.77 °C	-	-	-	-	-		2B	○		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).	p.1

基本情報

優先通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

融点

収集データ

	情報源名	項目	値	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
12		融点	-43.78 °C	-	-	-	-	-	-	2B	○	-	O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM).	p.1
13		融点	-43.8 °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: 125.	p.1
14		融点	-57 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×	-	Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).	p.1
15	PhysProp	融点	-43.8 °C	-	-	-	-	-	-	2B	○	-		p.1
16	REACH登録 情報	融点	-43.77 °C		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		その他	Exp Key Melting point/freezing point.001
17	既存点検事 業	融点	-43.8 °C	-	-	-	-	-		4A	×	-		K0113

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

沸点

収集データ

	情報源名	沸点	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 けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1	Aldrich	168 °C								4A	×			p.2533
2	CCD	168.89 °C	760 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×	-		Pseudocumene
3	CRC	169.4 ° C[169.4(0. 3)]	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		169.38 °C		-	-	-	-	-		4A	×	-		Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
5		169.38 °C		-	-	-	-	-		4A	×	-		Flammability of Chemical Substances (Section 16)
6	EPI Suite	169.97 °C		MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
7	HSDB	168.89 °C								4A	×		その他	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
8	IUCLID	168~172 ° C	1013.25 hPa	その他,ASTM D 1078				experimental result		4A	×			p.4
9	Mackay	169.38 °C		-	-	-	-	-		4A	×	-	Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th CRC Press, Boca Raton, FL.	p.481
10	Merck	169~171 ° C		-	-	-	-	-		4A	×	-		Monograph Number: 0007915
11	MOE初期評 価	168.89 °C		-	-	-	-	-		4A	×	-	Lewis, R.J., Sr (ed.) (1993): Hawley's Condensed Chemical Dictionary. 12th ed. Van Nostrand Rheinhold Co., New York, NY.	p.1
12		169.38 °C	760 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×	-	Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).	p.1

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

沸点

収集データ

	情報源名	沸点	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 けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
13		169～171 ° C		-	-	-	-	-		4A	×	-	O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM).	p.1
14		168.89 °C	760 mmHg	-	-	-	-	-		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: 125.	p.1
15		169 °C		-	-	-	-	-		4A	×	-	Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).	p.1
16	PhysProp	169.3 °C		-	-	-	-	-		4A	×	-		p.1
17	REACH登録 情報	169.38 °C	101.325 kPa		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	-	その他	Exp Key Boiling point.001
18	既存点検事 業	169.35 °C		-	-	-	-	-		4A	×	-		K0113
19		169～171 ° C		-	-	-	-	-		4A	×	-		K0113

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

沸点

収集データ

	情報源名	沸点	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 けるキースタ ディー ○	備考	文献	ページ番号等
20	NIST	169.2°C	-	-	-	-	-	-	-	4A	-	-	Aldrich Chemical Company Inc., 1990. Weast and Grasselli, 1989. Kurtyka and kurtyka, 1979. Anonymous, 1959. Anonymous, 1956. Field and Hastings, 1956. Pongratz and Zirm, 1952. Forziati and Rossini, 1949. Forziati and Rossini, 1948. Fenske, Braun, et al., 1947. Forziati and Rossini, 1947. Anonymous, 1946. Anonymous, 1946. Boord, Greenlee, et al., 1946. Boord, Greenlee, et al., 1946. Ebersole, 1946. Anonymous, 1945. Greensfelder. Voge, et al., 1945. Smith and Pennekamp, 1945. Boord and Perilstein, 1944. Greenlee, 1944. Anonymous, 1943. Anonymous, 1943. Lecat, 1943. Clement, 1940. Norris and Rubinstein, 1939. Mair and Schicktanz, 1933. Smith and Cass, 1932. Smith and Lund, 1930. Timmermans, 1921. Von Auwers, 1919. Richards and Barry, 1915. Perkin, 1896. Landolt and Jahn, 1892	

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

蒸気圧

収集データ

	情報源名	蒸気圧	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
1	Aldrich	4.5 mmHg	37.7 °C							4A	×			p.2533
2	EPI Suite	217 Pa[2B 以上の値を 用いて推定 (2C)]	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
3	HSDB	2.10 mmHg	25 °C							2B	○		その他	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE:
4	Mackay	133.3 Pa	13.6 °C	-	-	-	-	その 他, summar y of literature data	-	2B	×	270 (extrapolated-Antoine eq., Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 6.16282 – 1569.06/(208.089 + t/°C); temp range 84.8–170.4°C (Antoine eq. from reported exptl. data of Forziati et al. 1949, Boublik et al. 1984) log (P/mmHg) = 7.04383 – 1573.83/(208.56 + t	Shiu, W.Y., Ma, K.C. (2000) Temperature dependence of physical- chemical properties of selected chemicals of environmental interest. 1. Mono- and polynuclear aromatic hydrocarbons. J. Phys. Chem. Ref. Data. 29, 41–130.	p.481
5		6417 Pa	84.804 °C	-	-	-	-	-		2B	×	2666* (65.405°C, compiled data, temp range 65.405– 198.215°C, Bond & Thodos 1960) log (P/mmHg) = 23.2393 – 3301.19/(T/K) – 6.21412 · log (T/K) + 3.15835[P(mmHg)/(T/K)^2], temp range 65.4–198°C (Bond & Thodos 1960)	Bond, D.L., Thodos, G. (1960) Vapor pressures of alkyl aromatic hydrocarbons. J. Chem. Eng. Data 5, 289–292.	p.481

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

蒸気圧

収集データ

	情報源名	蒸気圧	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
6		280 Pa	25 °C	-	-	-	-	外挿（補 外）	extrapolated- Antoine eq	4C	○	271* (extrapolated-Antoine eq., Zvolinski & Wilhoit 1971; quoted, Mackay & Shiu 1981; Eastcott et al. 1988) log (P/mmHg) = 7.04383 – 1573.267/(208.564 + t/°C); temp range 51.75–198.2°C (Antoine eq., Zvolinski & Wilhoit 1971) log (P/mmHg) = [–0.2185 × 1071	Zvolinski, B.J., Wilhoit, R.C. (1971) Handbook of Vapor Pressures and Heats of Vaporization of Hydrocarbons and Related Compounds. API-44 TRC Publication No. 101, Texas A & M University, Evans Press, Fort Worth, TX.	p.481
7		2666 Pa	65.405 °C	-	-	-	-	その他, compile d data, temp range 65.405– 198.215°C	-	2B	×	-	Stull, D.R. (1947) Vapor pressure of pure substances. Organic compounds. Ind. Eng. Chem. 39, 517 –540.	p.481
8		271 Pa	25 °C	その他, ebulliometry , measured range 84.804– 170.377°C	-	-	-	外挿（補 外）	extrapolated- Antoine eq., Zvolinski & Wilhoit 1971; quoted, Mackay & Shiu 1981; Eastcott et al. 1988	4C	×	6417* (84.804°C, ebulliometry, measured range 84.804–170.377°C, Forziati et al. 1949) log (P/mmHg) = 7.04393 – 1573.267/(208.564 + t/°C); temp range 84.8–170.4°C (manometer, Antoine eq. from exptl. data, Forziati et al. 1949)	Forziati, A.F., Norris, W.R., Rossini, F.D. (1949) Vapor pressures and boiling points of sixty API-NBS hydrocarbons. J. Res. Natl. Bur. Std. 43, 555–563.	p.481
9		270 Pa	25 °C	-	-	-	-	外挿（補 外）	extrapolated- Antoine eq	4C	×	280 (extrapolated-Antoine eq., Dreisbach 1955) log (P/mmHg) = 7.04383 – 1573.267/(208.564 + t/°C); temp range 70–220°C (Antoine eq. for liquid state, Dreisbach 1955)	Dreisbach, R.R. (1955) Physical Properties of Chemical Compounds. Adv. Chem. Ser. 15, 134.	p.481

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

蒸気圧

収集データ

	情報源名	蒸気圧	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
10	MOE初期評 価	300 Pa[2.3 mmHg (=300 Pa) (25°C)]	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×	-	Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).	p.1
11		280 Pa[2.1 mmHg (=280 Pa) (25°C)]	25 °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: 125.	p.1
12		2.1 mmHg[2.1 mmHg (25°C、 実測値)]	25 °C	-	-	-	-	experiment al result	-	2B	×	-	Chao, J., C.T. Lin and T.H. Chung (1983): Vapor Pressure of Coal Chemicals. J. Phys. Chem. Ref. Data. 12: 1033-1063.	p.1
13	PhysProp	2.1 mmHg	25 °C	-	-	-	-	experiment al result	-	2B	×	-	CHAO,J ET AL. (1983)	p.1
14	REACH登録 情報	0.3 kPa	25 °C	その他,Not known	no data	2: reliable with restrictions	key study	外挿（補 外）		4C	×		その他 ,Lide, D. (Ed).(2008),CRC Handbook of Chemistry and Physics, 89th Edition., p 15-22,CRC Press Inc. Boca Raton. USA.	Exp Key Vapour pressure.001

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

水溶解度

収集データ

	情報源名	水溶解度	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]			-	-	-	-	-		3	×	-		Pseudocumene
2	CRC	[insoluble]			-	-	-	-	-		3	×	i H_2_O		Physical Constants of Organic Compounds (Section 3) etc
3		0.057 g/Kg	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C, J. Phys. Chem. Ref. Data, 29, 41, 2000	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
4		0.0057 mass %	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C, J. Phys. Chem. Ref. Data, 29, 41, 2000	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
5	EPI Suite	58.44 mg/L[2B以上 の値を用い て推定 (2C) 1	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
6	HSDB	57 mg/L	25 °C								2B	×		その他	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
7	IUCLID	0.1 mg/L	20 °C								4A	×		その他	p.4
8	IUPAC	0.0057 g(1)/100g sln	298 K		-	-	-	-	-		2B	×	Sol. Power : 3		Table 2. Recommended (R) and Tentative Value of the Solubility of 1, 2, 4- Trimethylbenzene (1) in Water (2)
9		0.0059 g(1)/100g sln	298 K		-	-	-	-	-		2B	×	Sol. Power : 3		Table 2. Recommended (R) and Tentative Value of the Solubility of 1, 2, 4- Trimethylbenzene (1) in Water (2)
10		0.00519 g(1)/100g sln	298 K		-	-	-	-	-		2B	×	Sol. Power : 3		Table 2. Recommended (R) and Tentative Value of the Solubility of 1, 2, 4- Trimethylbenzene (1) in Water (2)

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	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	0.00565 g(1)/100g sin	298 K		-	-	-	-	-		2B	×	Sol. Power : 3		Table 2. Recommended (R) and Tentative Value of the Solubility of 1, 2, 4- Trimethylbenzene (1) in Water (2)
12	Mackay 57 mg/L	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	○	-	McAuliffe, C. (1966) Solubility in water of paraffin, cycloparaffin, olefin, acetylene, cycloolefin and aromatic hydrocarbons. J. Phys. Chem. 76, 1267–1275.	p.481
13	59 mg/L	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	○	-	Sutton, C., Calder, J.A. (1975) Solubility of alkylbenzenes in distilled water and seawater at 25°C. J. Chem Eng. Data 20, 320–322.	p.481
14	51.9 mg/L	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	○	-	Price, L.C. (1976) Aqueous solubility of petroleum as applied to its origin and primary migration. Am. Assoc. Petrol. Geol. Bull. 60, 213–244.	p.481
15	51.9 mg/L	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	○	-	Krzyzanowska, T., Szeliga, J. (1978) A method for the solubility of individual hydrocarbons determining in water. Nafta (Katowice) 34(12), 413–417.	p.481
16	56.5 mg/L	25 °C		その他,vapor saturation-UV spec., measured range 15–45°C	-	-	-	-		2B	○	-	Sanemasa, I., Araki, M., Deguchi, T., Nagai, H. (1982) Solubility measurement of benzene and the alkylbenzenes in water by making the use of solute vapor. Bull. Chem. Soc. Jpn. 53, 1054–1062.	p.481

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

水溶解度

収集データ

	情報源名	水溶解度	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
17		56 mg/L	25 °C		-	-	-	-	その他,IUPAC recommend ed, temp range 15– 45°C	-	2B	×	56* (IUPAC recommended, temp range 15–45°C, Shaw 1989b) ln x = –8.760 – 868.70/(T/K); temp range 5–50°C (regression eq. of literature data, Shiu & Ma 2000)	Shaw, D.G., Ed. (1989b) IUPAC Solubility Data Series Vol. 38: Hydrocarbons (C8–C36) with Water and Seawater. Pergamon Press, Oxford, England.	p.481
18	Merck	[Practically insol in water]			-	-	-	-	-	-	3	×	-		Monograph Number: 0007915
19	MOE初期評 価	57 mg/L	25 °C		-	-	-	-	experimenta l result	-	2B	×	-	McAuliffe, C.J. (1966): Solubility in water of paraffin, cycloparaffin, olefin, acetylene, cycloolefin, and aromatic hydrocarbons. J. Phys. Chem., 70: 1267-1275.	p.1
20		57 mg/1000 g	25 °C		-	-	-	-	-	-	2B	×	-	Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD- ROM).	p.1
21		57 mg/L	25 °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: 125.	p.1
22		57 mg/L	20 °C		-	-	-	-	-	-	2B	×	-	Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).	p.1
23	PhysProp	57 mg/L	25 °C		-	-	-	-	experimenta l result	-	2B	×	-	CHAO,J ET AL. (1983)	p.1
24	REACH登録 情報	57±4 mg/L	25 °C		その他,flask method	no	2: reliable with restrictions	key study	experimenta l result	-	4A	×	-	その他 (1966)	Exp Key Water solubility.001

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

水溶解度

収集データ

	情報源名	水溶解度	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
25	既存点検事 業	[不溶]			-	-	-	-	-		3	×	-		K0113
26		10 ppm			-	-	-	-	-		4A	×	-		K0113

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

logPow

収集データ

情報源名	値	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 EPI Suite	3.63			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
2 HSDB	3.78									2B	○		その他	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT:
3 IUCLID	3.42[Octanol/Wasser Verteilungskoeffizient (log P) = 3.42 beim 1,3,5- TMB, für Pseudocumol keine Werte verfügbar.]									4A	×			p.4
4 Mackay	3.65			-	-	-	-	estimated by calculation	calculated- π substituent constant	4C	×	-	Hansch, C., Quinlan, J.E., Lawrence, G.L. (1968) The linear free-energy relationship between partition coefficients and the aqueous solubility of organic liquids. J. Org. Chem. 33, 347-350.	p.481
5	3.78			-	-	-	-	その他,quoted lit.	-	2B	○	3.83, 3.78 (quoted lit., 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.481
6	3.63			その他,shake flask- HPLC/UV both phases	-	-	-	-		2B	×	-	Wasik, S.P., Tewari, Y.B., Miller, M.M., Martire, D.E. (1981) Octanol/Water Partition Coefficients and Aqueous Solubilities of Organic Compounds. PB82-141797, U.S. EPA, Washington, D.C.	p.481

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

logPow

収集データ

情報源名	値	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
7	3.78			その他,HPLC- k' correlation	-	-	-	-		2B	×		Hammers, W.E., Meurs, G.J., De Ligny, C.L. (1982) Correlations between liquid chromatographic capacity ratio data on Lichrosorb RP-18 and partition coefficients in the octanol-water system. J. Chromatogr. 247, 1-13.	p.481
8	3.82			その他,RP- HPLC-k' correlations	-	-	-	-		2B	×	3.82, 4.00 (RP-HPLC-k' correlations, Sherblom & Eganhouse 1988)	Sherblom, P.M., Eganhouse, R.P. (1988) Correlations between octanol-water partition coefficients and reversed-phase highperformance liquid chromatography capacity factors. J. Chromatogr. 454, 37-50.	p.481
9	4			その他,RP- HPLC-k' correlations	-	-	-	-		2B	×	3.82, 4.00 (RP-HPLC-k' correlations, Sherblom & Eganhouse 1988)	Sherblom, P.M., Eganhouse, R.P. (1988) Correlations between octanol-water partition coefficients and reversed-phase highperformance liquid chromatography capacity factors. J. Chromatogr. 454, 37-50.	p.481
10	3.63			-	-	-	-	その他,recommend ed value		2B	×		Sangster, J. (1989) Octanol-water partition coefficients of simple organic compounds. J. Phys. Chem. Ref. Data 18, 1111-1230.	p.481
11	3.78			その他,normal phase HPLC- k' correlation	-	-	-	-		2B	×		Govers, H.A.J., Evers, E.H.G. (1992) Prediction of distribution properties by solubility parameters: description of the method and application to methylbenzenes. Chemosphere 24, 453-464.	p.481
12	3.7			-	-	-	-	その他,recommend ed		2B	×		Sangster, J. (1993) LOGKOW databank. Sangster Research Laboratory, Montreal, Q.C.	p.481
13	3.83			-	-	-	-	その他,quoted lit.		2B	×	3.83, 3.78 (quoted lit., 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.481

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

logPow

収集データ

情報源名	値	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
14 MOE初期評 価	3.78			-	-	-	-	-		2B	○	-	Hansch, C., A. Leo and D. Hoekman. (1995): Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. American Chemical Society. Washington, DC.	p.1
15	3.63			-	-	-	-	-		2B	×	-	Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).	p.1
16	3.78			-	-	-	-	-		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: 125.	p.1
17	3.8			-	-	-	-	-		2B	×	-	Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).	p.1
18 PhysProp	3.63			-	-	-	-	experimental result	-	2B	×	-	HANSCH,C ET AL. (1995)	p.1
19 REACH登録 情報	3.65	[Temperat ure and pH not reported.]	[Tempera ture and pH not reported.]		no data	2: reliable with restriction s	weight of evidence	experimental result		4A	×		その他	Exp WoE Partition coefficient.001
20	3.58	[Temperat ure and pH not reported.]	[Tempera ture and pH not reported.]		no data	2: reliable with restriction s	weight of evidence	experimental result		4A	×		その他	Exp WoE Partition coefficient.002
21	3.63	[Temperat ure and pH not reported]	[Tempera ture and pH not reported]		no data	2: reliable with restriction s	weight of evidence	experimental result		4A	×		その他	Exp WoE Partition coefficient.003

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

logPow

収集データ

	情報源名	値	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
22		3.91	[Temperat ure and pH not reported]	[Tempera ture and pH not reported]		no data		weight of evidence	experimental result		4A	×		その他	Exp WoE Partition coefficient.004
23		3.78	[Temperat ure and pH not reported.]	[Tempera ture and pH not reported.]		no data	2: reliable with restriction s	weight of evidence	experimental result		4A	×		その他	Exp WoE Partition coefficient.005
24		3.78	[Temperat ure and pH not reported.]	[Tempera ture and pH not reported.]		no data	2: reliable with restriction s	weight of evidence	experimental result		4A	×		その他	Exp WoE Partition coefficient.006
25		3.63	[Temperat ure and pH not reported.]	[Tempera ture and pH not reported.]		no data	2: reliable with restriction s	weight of evidence	experimental result		4A	×		その他	Exp WoE Partition coefficient.007
26		3.63	[Temperat ure and pH not reported.]	[Tempera ture and pH not reported.]		no data	2: reliable with restriction s	weight of evidence	experimental result		4A	×		その他	Exp WoE Partition coefficient.008
27		3.63	25 °C	[pH not reported.]		no data	2: reliable with restriction s	weight of evidence	experimental result		4A	×		その他	Exp WoE Partition coefficient.009

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

◀ Koc

収集データ

	情報源名	項目	値	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 の該当	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	Koc	1907 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定 (2C)]				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×			
2	HSDB	Koc	537			soil					experimental result		2B	○		その他	ENVIRONMENTAL FATE:
3	Mackay	logKoc	3.28			-	-	-	-	-	その他（推定 値）, computed- K_OW	-	4C	×	-	Kolig, H.P. (1995) Environmental Fate Constants for Additional 27 Organic Chemicals under Consideration for EPA's Hazardous Water Identification Projects. EPA/600/R-95/039. Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, U.S. EPA, Athens, GA.	p.481
4	MOE初期評価	Koc	720			-	その他,PCKOCWI N	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	×	-	U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWIN™ v.1.66.	p.2
5	REACH登録情 報	Koc	1097					no data	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×		その他	Calc Key Adsorption / desorption.001

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	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	467 Pa・m ³ /mol					(Q)SAR		2C	×			
2 HSDB	6.16E-3 atm・m ³ /mol							2B	○		その他	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
3 Mackay	529 Pa・m ³ /mol			-	-	その他,selected from literature experimentally measured data	-	2B	×	529 (20°C, selected from literature experimentally measured data, Staudinger & Roberts, 1996, 2001) log K _{AW} = 5.125 - 1697/(T/K) (van't Hoff eq. derived from lit. data, Staudinger & Roberts 2001)	Staudinger, J., Roberts, P.V. (1996) A critical review of Henry's law constant for environmental applications. Crit. Rev. Environ. Sci. Technol. 26, 205-297.	p.481
4	619 Pa・m ³ /mol			-	-	-	-	2B	×	-	Sanemasa, I., Araki, M., Deguchi, T., Nagai, H. (1982) Solubility measurement of benzene and the alkylbenzenes in water by making the use of solute vapor. Bull. Chem. Soc. Jpn. 53, 1054-1062.	p.481
5	475 Pa・m ³ /mol			-	-	-	-	2B	×	-	Yurteri, C. Ryan, D.F., Callow, J.J., Gurol, J.J. (1987) The effect of chemical composition of water on Henry's law constant. J. WPCF 59, 950-956.	p.481
6	571 Pa・m ³ /mol			-	-	estimated by calculation	calculated-vapor- liquid equilibrium (VLE) data, Yaws et al. 1991	4C	×	-	Yaws, C.L., Yang, J.C., Pan, X. (1991) Henry's law constants for 362 organic compounds in water. Chem. Eng. November, 179-185.	p.481
7	704 Pa・m ³ /mol			-	-	-	-	2B	×	704, 1135, 1591 (27, 35, 45°C, EPICS-GC, Hansen et al. 1993) ln [H/(kPa・m ³ /mol)] = -4298/(T/K) + 14.0; temp range 27-45°C (EPICS- GC, Hansen et al. 1993)	Hansen, K.C., Zhou, Z., Yaws, C.L., Aminabhavi, T.J. (1993) Determination of Henry's law constants of organics in dilute aqueous solutions. J. Chem. Eng. Data 38, 546-550.	p.481

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

ヘンリー係数

収集データ

	情報源名	ヘンリー係数	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
8		1135 Pa・m ³ /mol			-	-	-		2B	×	704, 1135, 1591 (27, 35, 45°C, EPICS-GC, Hansen et al. 1993) ln [H/(kPa・m ³ /mol)] = -4298/(T/K) + 14.0; temp range 27–45°C (EPICS-GC, Hansen et al. 1993)	Hansen, K.C., Zhou, Z., Yaws, C.L., Aminabhavi, T.J. (1993) Determination of Henry's law constants of organics in dilute aqueous solutions. J. Chem. Eng. Data 38, 546–550.	p.481
9		1591 Pa・m ³ /mol			-	-	-		2B	×	704, 1135, 1591 (27, 35, 45°C, EPICS-GC, Hansen et al. 1993) ln [H/(kPa・m ³ /mol)] = -4298/(T/K) + 14.0; temp range 27–45°C (EPICS-GC, Hansen et al. 1993)	Hansen, K.C., Zhou, Z., Yaws, C.L., Aminabhavi, T.J. (1993) Determination of Henry's law constants of organics in dilute aqueous solutions. J. Chem. Eng. Data 38, 546–550.	p.481
10	PhysProp	0.00616 atm・m ³ /mol			-	-	experimental result	-	2B	○	-	SANEMASA, I ET AL. (1982)	p.1

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	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
------	----	---	------------	----	-------	-----	-------------	--------------------------	------	---------	----	----	--------

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

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	値の詳細	備考	文献	ページ番号等
1	REACH登録情報	その他	0%	Test mat. analysis		OECD TG 301C	no data	4: not assignable	weight of evidence	experimental result			その他	Exp WoE Biodegradation in water: screening tests.004
2		その他	4~18 %[>= 4 <= 18]	O_2 consumption		OECD TG 301C	no data	4: not assignable	weight of evidence	experimental result			その他	Exp WoE Biodegradation in water: screening tests.004
3	SIDS	readily biodegradable	60%			OECD TG 301F				experimental result				p.5
4	既存点検事業		1%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		化学品検査協会		K0113
5			0%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result		化学品検査協会		K0113
6			18%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		化学品検査協会		K0113
7			4%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		化学品検査協会		K0113
8			4%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		化学品検査協会		K0113

基本情報

優先評価化学物質通し番号	49000
物質名称	1, 2, 4-トリメチルベンゼン
CAS番号	95-63-6

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	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該当	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		1			BCF		144.9 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C) 1	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	×			
2 既存点検事業	-	1	0.02 ppm	2 週	Rawデータ	-	144	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
3	-	1	0.02 ppm	2 週	Rawデータ	-	31[参考 データ]	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
4	-	1	0.02 ppm	4 週	Rawデータ	-	207	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	○	-		K0113
5	-	1	0.02 ppm	4 週	Rawデータ	-	48[参考 データ]	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
6	-	1	0.02 ppm	6 週	Rawデータ	-	42[参考 データ]	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
7	-	1	0.02 ppm	6 週	Rawデータ	-	53[参考 データ]	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
8	-	1	0.02 ppm	8 週	Rawデータ	-	74[参考 データ]	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
9	-	1	0.02 ppm	8 週	Rawデータ	-	135	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	○	-		K0113
10	-	2	0.2 ppm	2 週	Rawデータ	-	179	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
11	-	2	0.2 ppm	2 週	Rawデータ	-	142	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
12	-	2	0.2 ppm	4 週	Rawデータ	-	57	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
13	-	2	0.2 ppm	4 週	Rawデータ	-	33	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
14	-	2	0.2 ppm	6 週	Rawデータ	-	165	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
15	-	2	0.2 ppm	6 週	Rawデータ	-	186	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
16	-	2	0.2 ppm	8 週	Rawデータ	-	275	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113
17	-	2	0.2 ppm	8 週	Rawデータ	-	240	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1B	×	-		K0113