

令和7年度第5回薬事審議会化学物質安全対策部会化学  
物質調査会、令和7年度化学物質審議会第2回安全対策  
部会、第257回中央環境審議会環境保健部会化学物質審  
査小委員会

令和7年9月19日

資料2-1-1  
(審議会後確定版)

1

2

3

4

## 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

5

### 人健康影響に係る評価Ⅱ

6

### 物理化学的性状等の詳細資料

7

8

9

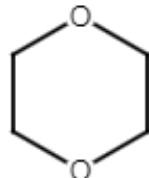
### 1, 4-ジオキサン

10

11

優先評価化学物質通し番号 80

12



13

14

15

16

17

令和7年9月

18

19

経済産業省

20

21

## 目 次

22

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

29    **1 評価対象物質の性状**

30    本章では、優先評価化学物質「1, 4-ジオキサン」のリスク評価に用いる物理化学的性  
31    状データ、環境中における分解性に係るデータを示す。

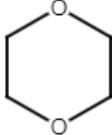
32

33    **1-1 評価対象物質の設定**

34    評価対象物質は、1, 4-ジオキサンとする。

35

36                   表 1-1 評価対象物質の同定情報

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

37

38    **1-2 物理化学的性状及び濃縮性**

39    下表に、化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス<sup>1</sup>（以下  
40 「技術ガイダンス」という。）に従い精査し、モデル推計に採用した物理化学的性状及び生  
41 物濃縮係数を示す。なお、表中の下線部は、評価IIにおいて精査した結果、評価I相当の参  
42 考値<sup>2</sup>から変更した値を示している。

43

44    **表1-2 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ**

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

45    ※ 令和5年度第2回化審法のリスク評価等に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会  
46    議（令和6年2月1日）で了承された値。

47

- 1) ECHA
- 2) HSDB
- 3) CRC
- 4) PhysProp
- 5) IUCLID (2000)

- 6) MITI (1975)
- 7) MHLW, METI, MOE (2014)
- 8) 評価Iにおいては考慮しない
- ()は参考値

48

49    上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

50    **① 融点**

51    評価I相当の参考値は、EURAR (2002) に記載された測定値 12 °C であり、IUCLID (2000)  
52    にある BASF (1995) のデータを採用しているが、測定条件等の詳細は記載がなく不明である。  
53    他には、Aldrich、ATSDR (1989)、CRC、HSDB 等、複数の情報源に標準気圧で 11 °C  
54    ~13 °C の記載がある。ECHA では、HSDB や REAXYS、GESTIS 等のデータベースに採用

<sup>1</sup> 「I. 4. 4. 2 物理化学的性状と生物蓄積性に係る追加的な情報収集」において、評価IIでの追加的な情報収集について記載されている。

<sup>2</sup> 「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について【改訂第1版】」に基づいて選定した値。

55 されたこれらの値は信頼できるとしつつも、CRC のデータを採用した HSDB の値 11.75 °C  
56 (101.3 kPa) をキーパラメータとしている。

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

59

## 60 ② 沸点

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

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

69

## 70 ③ 蒸気圧

71 評価 I相当の参考値は、EU RAR(2002) に記載された値 4,000 Pa (20 °C) である。これは  
72 IUCLID(2000) にある BASF(1995) のデータを採用しているが、測定値か推定値か含め測  
73 定条件等も不明である。HSDB、PhysProp には 25 °Cでの測定値 5,080 Pa、Mackay(2006) に  
74 は 25 °Cでの複数の測定値 5,333 Pa、5,065 Pa、4,932 Pa 等と記載されているほか、Aldrich  
75 や IUCLID(2000) 等にも複数の測定値が記載されていた。これらの多くは 20 °Cでの測定値  
76 に換算すると 3,000 Pa～4,000 Pa の範囲内に収まる値となる。また、ECHA では HSDB や  
77 REAXYS、GESTIS 等のデータベースに採用されたこれらの値については信頼できるとしつ  
78 つも、REAXYS における Journal of American Chemical Society に掲載された Crenshaw et al.  
79 (1938) と Gallagher and Hibbert(1937) の 20 °Cでの測定値 3,850 Pa をキーパラメータとして  
80 いる。

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

82

## 83 ④ 水に対する溶解度

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

87 溶解度の上限が不明であることから、評価 IIにおいては、参考値として  $1 \times 10^6$  mg/L を  
88 用いる。

89

90 ⑤ 1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)

91 評価 I 相当の参考値は、EURAR(2002) に記載された測定値 (-0.27) であるが詳細な測定  
92 条件等は不明である。HSDB、IUCLID (2000)、MOE (2004)、NITE (2005)、PhysProp 等には  
93 測定値や推計値が記載されており、多くが-0.42～-0.27 の値である。また、ECHA では HSDB  
94 や REAXYS、GESTIS に採用されたこれらの値については信頼できるとしつつも、REAXYS  
95 における Perminova et al. (1998) らの 20 °Cでの測定値 (-0.42) をキーパラメータとしている。

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

97

98 ⑥ ヘンリー係数

99 評価 I 相当の参考値は、Mackay (2006) に記載された 25 °Cと 40 °Cのときの測定値の算術  
100 平均値 (1.1 Pa・m<sup>3</sup>/mol) である。ECHA、IUCLID (2000)、Mackay (2006) にはさまざまな温  
101 度での値が記載されているが多くが推定値と考えられる。HSDB、PhysProp には 25 °Cでの  
102 測定値 (0.49 Pa・m<sup>3</sup>/mol) が記載されている。

103 評価 IIにおいては、HSDB、PhysProp に記載された 25 °Cでの測定値 (0.49 Pa・m<sup>3</sup>/mol) を  
104 用いる。

105

106 ⑦ 有機炭素補正土壤吸着係数 (Koc)

107 評価 I 相当の参考値は、ATSDR (1989) (測定値か推計値か不明) と HSDB (測定値である  
108 が出典が不明) に記載された値の算術平均値 (23 L/kg) である。HSDB と IUCLID (2000) に  
109 はカナダ、オンタリオ州の埋立地から採取した灰色粘土土壤 (粘土 45 %、シルト 43 %、砂  
110 10 %) で測定された Kd の測定値 (0.17 L/kg) が示され、この測定値から土壤中の有機炭素  
111 を 0.58 %として計算した Koc (29 L/kg) が記載されている。

112 評価 IIにおいては、測定条件が示されている HSDB と IUCLID (2000) に記載された Koc  
113 (29 L/kg) を用いる。

114

115 ⑧ 生物濃縮係数 (BCF)

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

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

121

122 ⑨ 生物蓄積係数 (BMF)

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

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

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

127

128 **⑩ 酸解離定数 (pKa)**

129 評価 Iにおいては解離を考慮しないため、参考値は設定されていない。また、1, 4 -

130 ジオキサンには加水分解に敏感な官能基は含まれておらず加水分解は予想されない。

131 このため、評価IIにおいても、本物質については解離性を考慮しないこととする。

## 132 1-3 分解性

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

135

136 表 1-3 分解に係るデータのまとめ

項目		半減期※ (日)	概要
大気	大気における総括分解半減期	NA	
	OH ラジカルとの反応	1.5	技術ガイダンス <sup>1)</sup> に従って、反応速度定数の測定値 <sup>2), 3)</sup> から算出した値の算術平均値
	オゾンとの反応	—	分解寄与基を有さない物質
	硝酸ラジカルとの反応	104	技術ガイダンス <sup>1)</sup> に従って、25 °Cでの反応速度定数の測定値 <sup>4)</sup> から算出
水中	水中における総括分解半減期	NA	
	生分解	10,000	技術ガイダンス <sup>1)</sup> に従って、分解度試験の結果 <sup>5), 6)</sup> から算出
	加水分解	NA	
	光分解	—	紫外線の吸収が非常に弱く、直接光分解は重要な環境運命プロセスではないとの記載あり <sup>4)</sup>
土壤	土壤における総括分解半減期	NA	
	機序別の中減期	生分解	10,000
	加水分解	NA	技術ガイダンス <sup>1)</sup> に従って、水中生分解半減期と同程度と仮定
底質	底質における総括分解半減期	NA	
	機序別の中減期	生分解	40,000
	加水分解	NA	技術ガイダンス <sup>1)</sup> に従って、水中生分解半減期の4倍と仮定

137 ※ 令和5年度第2回化審法のリスク評価等に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会  
138 議（令和6年2月1日）で了承された値

139

140 1) MHLW, METI, MOE (2014)

5) ECHA

2) EU RAR (2002)

6) MITI (1975)

3) NITE (2005)

NA: 情報が得られなかったことを示す

4) HSDB

—: 考慮する必要がないと考えされることを示す

141

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

145

## 146 ① 大気

147 大気中での総括分解半減期に関する情報は得られなかつたが、機序別の半減期について、  
148 OH ラジカル、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応に関する情報が得られた。

149 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

150 大気中における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値について、EU RAR (2002) や  
151 NITE (2005) から  $10.8 \pm 1.3 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/\text{molecule/sec}$  及び  $1.09 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{molecule/sec}$  という  
152 情報が得られた。技術ガイダンスに記載された OH ラジカルの濃度 ( $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$ )  
153 を用いた半減期を算術平均し、1.5 日とする。

154 ①-2 オゾンとの反応の半減期

155 大気中におけるオゾンとの反応速度定数の測定値について、IUCLID (2000) から  $6.81 \text{ cm}^3/$   
156 ( $\text{molecule} \times \text{sec}$ ) という情報が得られた。当該値と技術ガイダンスに記載されたオゾンの濃  
157 度 ( $7 \times 10^{11} \text{ molecule/cm}^3$ ) を用いて半減期を計算すると  $1.7 \times 10^{-18}$  日となる。

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

161 ①-3 硝酸ラジカルとの反応の半減期

162 大気中における硝酸ラジカルとの反応速度定数の 25 °Cでの測定値について、HSDB から  
163  $3.2 \times 10^{-16} \text{ cm}^3/\text{molecule/sec}$  という情報が得られ、技術ガイダンスに記載された硝酸ラジカル  
164 の濃度 ( $2.4 \times 10^8 \text{ molecule/cm}^3$ ) を用いると半減期は 104 日と算出される。したがって、硝  
165 酸ラジカルとの反応の半減期は 104 日とする。

166

167 ② 水中

168 水中の総括分解半減期に関する情報は得られなかつたが、機序別の半減期について、生  
169 分解と光分解に関する情報が得られた。

170 ②-1 生分解の半減期

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

177 上記のほかに、ECHA の OECD TG301F に基づく非 GLP 試験では被験物質濃度 100 mg/L  
178 で試験を行った結果、O<sub>2</sub> 消費量に基づく分解度は < 10 %であった。また、ECHA の本質的  
179 分解性を判断する OECD TG302B に基づく非 GLP 試験では被験物質濃度 400 mg-DOC/L で  
180 試験を行った結果、DOC の消失率が約 40 %という結果が記載されているが、減少が見られ  
181 たのは生分解ではなく、ばっ気に起因するとされており、本質的分解性の物質でもないと考  
182 えられる。

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

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

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

## 195 ②-2 光分解の半減期

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

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

205

## 206 ③ 土壤

207 土壌中の総括分解半減期に関する情報は得られなかつた。また、機序別の半減期に関する  
208 情報も得られなかつた。

## 209 ③-1 生分解の半減期

210 半減期に関するデータは得られなかつたため、土壤中の生分解による半減期は、技術ガ  
211 イダンスに従つて、水中の生分解半減期と同じ 10,000 日とする。

212

## 213 ④ 底質

214 底質中の総括分解半減期に関する情報は得られなかつた。また、機序別の半減期に関する  
215 情報も得られなかつた。

## 216 ④-1 生分解の半減期

217 半減期に関するデータは得られなかつたため、底質中の生分解半減期は、技術ガイダン  
218 スに従つて、水中の生分解半減期の 4 倍である 40,000 日とする。

219 2 出典

220

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

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

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

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

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

228 ECHA: Information on Chemicals - ECHA (europa.eu), (2023/12 調査).  
<https://echa.europa.eu/information-on-chemicals>

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

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

234 GESTIS: GESTIS Substance Database, GESTIS Substance Database (dguv.de). <https://gestis-database.dguv.de/>

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

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

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

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

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

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

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

- 247 MHLW, METI, MOE (2014): 化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガ  
248 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.
- 249 MITI (1975): 1 , 4-ジオキサン (試料 No.K-110)の分解度試験成績報告書. 既存化学物質  
250 安全性点検, 1975.
- 251 MOE (2004): 化学物質の環境リスク評価 第2巻, 1 , 4-ジオキサン. 2004.
- 252 NITE (2005): 化学物質の初期リスク評価書, 1 , 4-ジオキサン. Ver. 1.0, No. 13, 2005.
- 253 Perminova et al. (1998): Crenshaw, J.L.; Perminova Irina V., Frimmel Fritz H., Kovalevskii Dmitrii  
254 V., Abbt-Braun Gudrun, Kudryavtsev Alexey V., Hesse Sebastian, Water Res., EN, 32, 3, 1998, p 872|-  
255 881
- 256 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database.
- 257 REAXYS: Reaxys | An expert-curated chemical database | Elsevier.  
258 <https://www.elsevier.com/products/reaxys>
- 259