既存化学物質安全性(ハザード)評価シート(要約版)

整理番号		晉号	96 - 30	官報公示 整理番号		3 - 3		CAS 番号	95 - 47 - 6
名		称	別名:1,2	-キシレン 2-ジメチルベン メチルトルエン		構	造 式		CH ₃ CH ₃
分	子	式		C_8H_{10}		分	子 量		106.17

市場で流通している商品(代表例)1)

純 度 : 96 %以上

不純物 : m-キシレン、p-キシレン、エチルベンゼン、イソプロピルベンゼン、

n-プロピルベンゼン、トルエン

添加剤又は安定剤:無添加

特に断りのない限り o-キシレン単体を指す。単体についてのデータがない場合又は報告な しと記載されている場合には混合キシレンの項を参照のこと。

物理・化学的性状データ

外 観:無色液体2)

融 点:-25.2 3)

沸 点:144.4 ³⁾

引 火 点:27.0 3)

発火点:530²⁾、599³⁾

爆発限界: 1.0-7.0% 2,3)

比 重: $d_4^{20} 0.8802^{3)}$

蒸 気 密 度:3.66(空気 = 1)³⁾

蒸 気 圧: $0.80 \text{ kPa} (6 \text{ mmHg}) (20)^4$ 、 $1.47 \text{ kPa} (11 \text{ mmHg}) (30)^4$

分配係数: log Pow; 3.12(実測値)⁵⁾、3.09(計算値)⁵⁾

加水分解性:加水分解を受けやすい化学結合なし

解離定数:解離基なし

スペクトル:主要マススペクトルフラグメント

m/z 91(基準ピーク, 1.0)、106(0.40)、77(0.15)、51(0.17)⁶⁾

吸 脱 着 性:土壤吸着係数 $Koc = 166^{7}$

粒 度 分 布:該当せず

溶 解 性: o-キシレン / 水; $146 \,\mathrm{mg}/\ell$ (25) $^{7)}$

アルコール、 エーテル、 ベンゼンなどの溶媒と自由に混和。

換算係数:1 ppm = 4.41 mg/m³ (気体,20) 1 mg/m³ = 0.227 ppm

総合評価

1) 危険有害性の要約

o-キシレンの毒性は混合体や他の異性体による毒性と本質的な差異はないと考えられている。

動物実験における急性毒性は比較的弱いが、ヒトでは高濃度暴露による死亡例が報告されている。吸入及び経口による体内への吸収性は高く、主に中枢神経系の抑制作用を示し、大量あるいは長期暴露により肝臓及び腎臓の機能障害を生じる。また、眼、上気道、皮膚に対する刺激性を有し、反復及び長期接触により皮膚炎を生じる。

ヒト及び動物のいずれにおいても胎盤通過性を有し、実験動物では胎児毒性や催奇形性が認められるとの報告もある。ヒトにおいては妊娠中の暴露と新生児の先天奇形の関連性が疑われているものの、これらの症例の多くが種々の溶媒に暴露されていることから、キシレンの催奇形性については明らかではない。

キシレンに変異原性はなく、動物実験ではラット及びマウスにおける発がん性試験で陰性である。ヒトではキシレンの暴露により造血器系の悪性腫瘍の発生が増加するとの疫学報告があるが、暴露と発がんの関連性を示唆するデータは不十分であり、IARC では発がん性について分類できないとしている。

本物質は環境中に放出された場合、物理化学的性状から大気、水及び底質圏に広く分布するものと予想され、環境庁のモニタリングにおいても水中及び底質から検出されている。対流圏大気中での本物質の半減期は $0.6 \sim 1.2$ 日と計算され、主な反応機構は OH ラジカルとの反応である。また、対流圏大気中でのオゾンとの反応による半減期は 5,000 日と計算される。水中では微生物によって分解されるが、環境庁のモニタリングでは魚類中にも検出されており、キシレンが大量に環境中に放出された場合には残留することが示唆される。水圏環境生物に対する急性毒性は、魚類に対しては魚種により異なるが harmful に分類される。OECD の有害性分類基準(案)に従えば、藻類、甲殻類に対してはそれぞれ harmful、分類基準適用外に該当するが、m、p-キシレンの急性毒性を含めて総合的に判断すると、o-キシレンの甲殻類に対する毒性は harmful と考えられる。

2)指摘事項

- (1) 頭痛、悪心、めまい、記憶障害、錯乱、振戦、意識混濁などの神経症状を示し、主に中 枢神経系に対する抑制作用を有する。
- (2) 眼、上部気道及び皮膚に対して刺激性を有する。
- (3) ヒトにおいては明らかではないが、動物実験では母動物に対し毒性を生じる用量で胎児 毒性や催奇形性が認められている。

参考資料

- 1) (社)日本化学工業協会調査資料(1996).
- 2) 化学物質安全情報研究会編,化学物質安全性データブック,オーム社(1995).
- 3) 日本化学会編, 化学防災指針集成, 丸善(1996).
- 4) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd. Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(1996).
- 5) 分配係数計算用プログラム, " C Log P", アダムネット(株).
- 6) NIST Library of 54K Compounds.
- 7) Richardson, M.L. et.al., The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry (1992-1995).