

[1 1] 酢酸ブチル

1. 物質に関する基本的事項

(1) 分子式・分子量・構造式

物質名：酢酸ブチル

(別の呼称：n-ブチルアセテート、酢酸ブチルエステル、酢酸 n-ブチル)

CAS 番号：123-86-4

分子式：C₆H₁₂O₂

分子量：116.2

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色透明の液体で、果実様の臭気がある¹⁾。

融点	-77.9 ²⁾
沸点	120.0 ~ 126.5 ²⁾
比重	0.882 ²⁾
蒸気圧	1.3 kPa (20) ²⁾
換算係数	1ppm=4.75 mg/m ³ at 25 ,気体 (計算値)
n-オクタノール/水分配係数	1.82 ²⁾
加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合なし ⁴⁾
解離定数	pKa = 9.89 (20) ⁵⁾
水溶性	0.83 g/ 100 mL (25) (溶けにくい) ³⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

本物質の蓄積性は低いと想定される。濃縮性は次のとおりである。

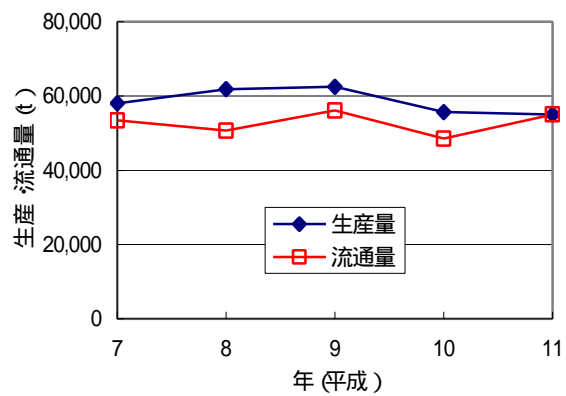
生物濃縮係数 (BCF): 10 (計算値)⁴⁾

注：計算値とは、化学構造式から推定される予測値

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の平成 11 年における国内生産量は 55,018 t、輸入量は 4,233.315 t、輸出量は 10,585.343 t であり¹⁾、推定される国内流通量は 48,665.97t である。また、OECD に報告している生産量は 10,000 t 以上である。生産・流通量の推移⁵⁾より作成は、次の図のとおりである。

酢酸ブチル(ルマル)生産 流通量の推移⁵⁾より作成

用途

本物質の主な用途は、溶剤、人造真珠用塗料、天然ゴム、果実エッセンス、医薬品等である¹⁾。

2. 暴露評価

環境リスクの初期評価のため、わが国の一般的な国民の健康や、水生生物の生存・生育を確保する観点から、実測データをもとに基本的には特定の排出源の影響を受けていない一般環境等からの暴露を評価することとし、安全側に立った評価の観点からその大部分がカバーされる高濃度側のデータによって暴露量の評価を行った。原則として統計的検定の実施を含めデータの信頼性を確認した上で最大濃度を評価に用いているが、多数のデータが得られ、その一部に排出源周辺等のデータも含まれると考えられる場合には、95パーセンタイル値による評価を行っている。

(1) 環境中分布の予測

本物質の環境中の分布について、各環境媒体間への移行量の比率を EUSES モデルを用いて算出した結果を表 2.1 に示す。なお、モデル計算においては、面積 2,400km²、人口約 800 万人のモデル地域を設定して予測を行った^{1),2)}。

表 2.1 本物質の各媒体間の分布予測結果

		分布量(%)
大	気	99.1
水	質	0.2
土	壤	0.7
底	質	0.008

(2) 各媒体中の存在量の概要

本物質の環境中等の濃度について情報の整理を行った。各媒体ごとにデータの信頼性が確認された調査例のうち、より広範囲の地域で調査が実施されたものを抽出した結果を表 2.2 に示す。

表 2.2 本物質の各媒体中の存在状況

媒	体	幾何 平均値	算術 平均値	最小値	最大値	検出 下限値	検出率	調査 地域	測定年	文献
一般環境大気	μg/m ³	0.27	0.69	0.024	1.7	0.002	6/6	全国	1995	3
室内空気	μg/m ³	12		< 0.01	341		189/207	全国	1998	4
地下水	μg/L	< 1	< 1			1	0/73	東京	1996-97	5
公共用水域・淡水	μg/L	< 0.2	< 0.2			0.2	0/6	全国	1995	3
公共用水域・海水	μg/L	< 0.2	< 0.2			0.2	0/5	全国	1995	3

注：徳島県の防湿ゼロハン製造工場周辺大気から算術平均で 3.9 μg/m³、最大値 10.4 μg/m³ の報告がある(1979-80)⁶⁾。

(3) 人に対する暴露の推定（一日暴露量の予測最大量）

空気（一般環境大気及び食事）及び地下水の実測値を用いて、人に対する暴露の推定を行った。ここで地下水のデータを用いたのは、飲料水の分析値が得られなかったためである（表 2.3）。化学物質の人による一日暴露量の算出に際しては、人の 1 日の呼吸量、飲水量及び食

事量をそれぞれ 15m³、2L 及び 2,000g と仮定し、体重を 50kg と仮定している。なお、食物の分析値が得られなかったが、食物中への当物質の移行量のモデルによる推測結果からは、食物経由の暴露量が小さく無視できると判断された¹⁾。

表 2.3 本物質の各媒体中濃度と一日暴露量

	媒体	濃度	一日暴露量
平均	大気		
	一般環境大気	0.27 µg/m ³ 程度 (1995)	0.081 µg/kg/day 程度
	室内空気	12 µg/m ³ 程度 (1998)	3.6 µg/kg/day 程度
	水質		
	飲料水	データはない	データはない
	地下水	概ね 1 µg/L 未満 (1996-97)	概ね 0.04 µg/kg/day 未満
	公共用水域・淡水域	概ね 0.2 µg/L 未満 (1995)	概ね 0.008 µg/kg/day 未満
	食物	モデル計算により、食物への移行はないと判断される	モデル計算により、食物への移行はないと判断される
	土壌	データはない	データはない
	最大値等	大気	
一般環境大気		1.7 µg/m ³ 程度 (1995)	0.51 µg/kg/day 程度
室内空気		341 µg/m ³ 程度 (1998) [48 µg/m ³ 程度]	102 µg/kg/day 程度 [14 µg/kg/day 程度]
水質			
飲料水		データはない	データはない
地下水		概ね 1 µg/L 未満 (1996-97)	概ね 0.04 µg/kg/day 未満
共用水域・淡水域		概ね 0.2 µg/L 未満 (1995)	概ね 0.008 µg/kg/day 未満
食物		モデル計算により、食物への移行はないと判断される	モデル計算により、食物への移行はないと判断される
土壌		データはない	データはない

注：[]内の数値は、実測値の95パーセンタイル値を示す。

人の一日暴露量の集計結果を表 2.4 に示す。吸入暴露による一日暴露量の予測最大量は 14 µg/kg/day (濃度としては 48 µg/m³) (95 パーセンタイル値) であったが、これは室内空気の濃度に終日暴露されるという前提の値であり、代わりに一般環境大気の色を用いると 0.51 µg/kg/day (濃度としては 1.7 µg/m³) であった。経口暴露による一日暴露量の予測最大量は、地下水経由の 0.04 µg/kg/day 未満であった。全暴露経路からの一日暴露量の予測最大量は、室内空気の濃度に終日暴露されるという前提で 14 µg/kg/day であり、一般環境大気の色を用いると 0.55 µg/kg/day であった。

表 2.4 人の一日暴露量

		平均	予測最大量
		暴露量($\mu\text{g}/\text{kg}/\text{day}$)	暴露量($\mu\text{g}/\text{kg}/\text{day}$)
大気	一般環境大気	0.081	0.51
	室内空気	3.6	[14]
水質	飲料水		
	地下水	0.04	0.04
	公共用水域・淡水	(0.008)	(0.008)
食物			
土壌			
経口暴露量合計		0.04	0.04
総暴露量(ケース1)		3.64	14.04
総暴露量(ケース2)		0.121	0.55

注：1) [] 内の数値は、実測値の 95 パーセンタイル値より算出した値。

2) () 内の数字は総暴露量の算出に用いていない。

3) 総暴露量(ケース1)は、大気暴露において一般環境大気及び室内空気のうち化学物質の濃度が高いもの(ここでは室内空気)に終日暴露されていると仮定して算出したもの。総暴露量(ケース2)は、一般環境大気に終日暴露されていると仮定して算出したもの。

4) アンダーラインは不検出データによる暴露量を示す。

(4) 水生生物に対する暴露の推定(水質に係る予測環境中濃度: PEC)

本物質の水生生物に対する暴露の推定の観点から、水質中濃度を表 2.5 のように整理した。水質について安全側の評価値として予測環境中濃度(PEC)を設定すると、公共用水域の淡水域及び海水域のいずれについても概ね $0.2 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満となった。

表 2.5 水質中の本物質の濃度

媒 体	平均	最大値等
	濃 度	濃 度
水 質		
公共用水域・淡水	概ね $0.2 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満 (1995)	概ね $0.2 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満 (1995)
公共用水域・海水	概ね $0.2 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満 (1995)	概ね $0.2 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満 (1995)

注：公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。

3. 健康リスクの初期評価

健康リスクの初期評価として、ヒトに対する化学物質の影響（内分泌かく乱作用に関するものを除く）についてのリスク評価を行った。

(1) 一般毒性及び生殖・発生毒性

急性毒性¹⁾

表 3.1 急性毒性

動物種	経路	致死量、中毒量等
ラット	経口	LD ₅₀ : 14,130 mg/kg
マウス	経口	LD ₅₀ : 7,056 mg/kg

本物質の蒸気は眼、鼻、喉を刺激し、角膜表面を侵すことがある。また、麻酔作用があり、高濃度では意識喪失する。

中・長期毒性

モルモットに 4,753 mg/m³ (1,000 ppm) を 28 日間 (4 時間/日、6 日/週) 吸入させた結果、血液検査 (血球数) ・尿検査・病理検査 (剖検) に影響を認めなかった²⁾。

生殖・発生毒性

Sprague-Dawley CD ラット雌 37~43 匹を 1 群とし、0、7,130 mg/m³ (1,500 ppm) を交配 3 週間前~妊娠 16 日目、妊娠 1~16 日目、妊娠 7~16 日目の 3 条件で吸入 (7 時間/日、5 日/週) させた結果、対照群と比較して、すべての条件で胎仔の体重と頭尾長、胎盤重量は有意に小さかった。この他にも、多発的な顔面欠損、横隔膜ヘルニア、眼の欠陥、脳異常形態を含む異常が認められたが、これらは対照群と比較して有意差を認めなかった³⁾。

ヒトへの影響

ボランティアに対する吸入暴露実験では、眼、鼻、喉への刺激症状 (眼球の充血等) が主なものであり、呼吸機能への大きな影響は認められていない。

慢性的に暴露されている労働者では、結膜の刺激症状、胸部圧迫感、咳等の症状を訴える者もあったが、これらはむしろ他の溶剤によるものであったと考えられている。他にも、傾眠、めまい等の神経症状や空胞性角膜炎等を認めたという症例報告や疫学調査はあるが、これらも混合していた他の溶剤の影響であることを否定できない。

皮膚に対する暴露では、皮脂脱落やひび割れが生じることもあるが、感作作用は認められない。

既存の試験結果等からみると毒性は非常に小さいと考えられる。ACGIH (1998) はボランティアを対象とした実験を踏まえ、眼や粘膜に対する刺激性の潜在的リスクを軽減するという観点から、713 mg/m³ (150 ppm) を暴露限界閾値 - 時間荷重平均 (TLV-TWA) として勧告している。

(2) 発がん性

発がん性に関する知見の概要

変異原性を調べた結果は陰性であるが、この結果を直接発がん性の判断の材料にはできない。また、発がん性を調べたデータもなく、現段階では評価できない。

発がんリスク評価の必要性

IARC において評価は行われておらず、現時点においては評価はできない。

(3) 無毒性量 (NOAEL) 等の設定

経口暴露及び吸入暴露について、信頼性のあるデータが得られなかった。

(4) 健康リスクの初期評価結果

無毒性量等を設定できなかったため、現時点ではリスクの判定はできない。

4. 生態リスクの初期評価

生態リスクの初期評価として、水生生物に対する化学物質の影響（内分泌攪乱作用に関するものを除く）についてのリスク評価を行った。

(1) 生態毒性の概要

本物質の水生生物に対する影響濃度に関する知見の収集を行い、その信頼性を確認したもののについて生物群、毒性分類別に整理すると表 4.1 のとおりとなる。

表 4.1 生態毒性の概要

生物種	急性	慢性	毒性値 [µg/L]	生物名	エンドポイント /影響内容	暴露期間 [日]	信頼性			Ref. No.
							a	b	c	
藻類			21,000	<i>Scenedesmus quadricauda</i>	Toxicity Threshold	7				5303
			321,000	<i>Entosiphon sulcatum</i>	Toxicity Threshold	3				5303
甲殻類			32,000	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	2				607
			44,000	<i>Daphnia magna</i>	NR IMM	2				607
魚類			<u>100,000</u>	<i>Lepomis macrochirus</i>	LC ₅₀ MOR	4				863
その他	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

太字の毒性値は、PNEC 算出の際に参照した知見として本文で言及したものの、下線を付した毒性値は PNEC 算出の根拠として採用されたものを示す。

信頼性) a : 毒性値は信頼できる値である、b : ある程度信頼できる値である、

c : 毒性値の信頼性は低いあるいは不明

エンドポイント) LC₅₀ (Median Lethal Concentration): 半数致死濃度、NR (Not Reported): 記載無し、Toxicity Threshold : 増殖阻害初期濃度

影響内容) IMM (Immobilization): 遊泳阻害、MOR (Mortality): 死亡

(2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて、信頼できる知見のうち生物群ごとに値の最も低いものを整理し、そのうち最も低い値に対して情報量に応じたアセスメント係数を適用することにより、予測無影響濃度 (PNEC) を求めた。

急性毒性値については、魚類では *Lepomis macrochirus* の 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 100,000 µg/L であった。急性毒性値について 1 生物群 (魚類) の信頼できる知見が得られたため、アセスメント係数として 1,000 を用いることとし、急性毒性値による PNEC として 100 µg/L が得られた。

慢性毒性値については、信頼できる毒性値は得られなかった。

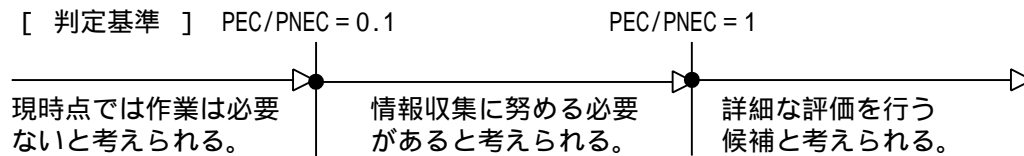
本物質の PNEC としては、魚類の急性毒性値をアセスメント係数 1,000 で除した 100 µg/L を採用する。

(3) 生態リスクの初期評価結果

表 4.2 生態リスクの初期評価結果

媒体		平均濃度	最大値[95パーセンタイル値]濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC比
水質	一般環境・淡水域	概ね 0.2 µg/L 未満 (1995)	概ね 0.2 µg/L 未満 (1995)	100 µg/L	<0.002
	一般環境・海水域	概ね 0.2 µg/L 未満 (1995)	概ね 0.2 µg/L 未満 (1995)		<0.002
	発生源周辺	データはない	データはない		
底質	一般環境	データはない	データはない		

注：一般環境・淡水域は、河川河口域を含む。



本物質の公共用水域における濃度は、平均濃度でみると淡水域・海水域共に概ね 0.2 µg/L 未満であった。安全側の評価値として設定された予測環境中濃度 (PEC) についても同様に、淡水域・海水域共に概ね 0.2 µg/L 未満であった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域及び海水域のいずれにおいても 0.002 未満となるため、現時点では作業は必要ないと考えられる。

5 . 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 化学工業日報社 (2001) 13901 の化学商品
- 2) 化学物質安全性データブック(改訂増補版) (1999) オーム社
- 3) IPCS (1998) International Chemical Safety Cards
- 4) Hazardous Substances Data Bank HSDB (1998) US National Library of Medicine
- 5) 化学工業日報社 (1997;1998;1999;2000;2001) 13197 の化学商品, 13398 の化学商品, 13599 の化学商品, 13700 の化学商品(2000), 13901 の化学商品

(2) 暴露評価

- 1) (財)日本環境衛生センター 平成 10 年度化学物質の人に対する暴露評価に関する調査検討報告書 (環境庁請負業務)
- 2) (財)日本環境衛生センター 平成 12 年度化学物質の暴露評価に関する調査報告書 (環境省請負業務)
- 3) 環境庁環境安全課 平成 8 年版化学物質と環境
- 4) 厚生省 居住環境中の揮発性有機化合物の全国実態調査について 平成 11 年 12 月 14 日
- 5) 東京都環境科学研究所年報 p254-61(1998)
- 6) 徳島県公害センター No.6, p33-38, 1980

(3) 健康リスクの初期評価

- 1) 後藤 稔 編 (1994) 産業中毒便覧 (増補版), 医歯薬出版
- 2) Smyth, H. F. (1928) J. Ind. hyg., 10 (8) : 261-171.
- 3) Hackett, P. L. *et al.* (1983) PB Report, NTIS Pub. No. PB-83-258-038.

参考資料

- ・ Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices, Sixth Edition, Supplement, n-Butyl Acetate, ACGIH (1998) .

(4) 生態リスクの初期評価

- 1) データベース : U.S.EPA 「AQUIRE」
 - 2) 引用文献 (Ref. No. : データベースでの引用文献番号)
- 607:Bringmann,G. and R.Kuhn (1959): The Toxic Effects of Waste Water on Aquatic Bacteria, Algae, and Small Crustaceans TR-TS-0002, (ENG TRANSL); Gesund. Ing. 80:115-120 (GER); Chem. Abstr. 53:17390G.
- 863:Dawson,G.W., A.L.Jennings, D.Drozdowski, and E.Rider (1977): The Acute Toxicity of 47 Industrial Chemicals to Fresh and Saltwater Fishes. J. Hazard. Mater. 1(4): 303-318.
- 5303:Bringmann,G. and R.Kuhn (1980): Comparison of the Toxicity Thresholds of Water Pollutants to Bacteria, Algae, and Protozoa in the Cell Multiplication Inhibition Test. Water Res. 14(3): 231-241.