

[2] アセトニトリル

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：アセトニトリル

(別の呼称：メチルシアナイド、シアン化メチル、エタンニトリル、エタン酸ニトリル、シアノメタン)

CAS 番号：75-05-8

分子式：C₂H₃N

分子量：41.1

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は芳香ある無色の液体である¹⁾。

融点	-45 ²⁾
沸点	81.6 (760mmHg) ²⁾
比重	0.78745(15/4) ²⁾
蒸気圧	88.8mmHg(25) ³⁾
換算係数	1ppm=1.71mg/m ³ (気体、20) ⁴⁾
n-オクタノール/水分配係数 (log Pow)	-0.34 ⁵⁾
加水分解性	加水分解によりアセトアミドを経て酢酸とアンモニアになる ⁶⁾
解離定数	解離基なし ⁴⁾
水溶性	1,000,000mg/L(25) ⁷⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

分解性

好氣的：良分解⁸⁾

嫌氣的：試験結果から排水から除去する事は効果的でない⁹⁾。

非生物的：

(OH ラジカルとの反応性)：大気中での反応速度 2.63×10^{-14} cm³/分子・sec(25)、OH ラジカル濃度を 5×10^5 分子/cm³ とした時の半減期は約 621 日である¹⁰⁾。

BOD から算出した分解度：

34.5%(NO₃)、73.6%(NH₄)(試験期間：3 週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L)⁸⁾

生物濃縮係数 (BCF)：3.14(計算値)¹¹⁾

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の平成 12 年における国内生産量は 5,000t であり、輸出入量の記載がない事から¹⁾、推定される国内流通量は 5,000t である。なお、OECD に報告している生産量は 10,000t 以上である。

用途

本物質の主な用途は、ビタミン B1、サルファ剤の製造原料、ブチレン - ブタンの抽出溶剤、合成繊維、その他溶剤、有機合成原料、香料、エキス、変性剤などに利用されている¹⁾。

2. 暴露評価

環境リスクの初期評価のため、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。なお、多数のデータが得られている場合は、95 パーセンタイル値を参考として併記している。

(1) 環境中分布の予測

アセトニトリル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⁾。

表 2.1 アセトニトリルの各媒体間の分布予測結果

		分布量 (%)
大	気	8.6
水	質	88.6
土	壌	0.9
底	質	1.8

(2) 各媒体中の存在量の概要

アセトニトリルの水質及び底質中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 アセトニトリルの水質、底質中の存在状況

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
公共用水域・淡水 μg/L	<3	<3			3	0/65	全国	2000	2
公共用水域・海水 μg/L	<3	<3			3	0/11	全国	2000	2
底質（公共用水域・淡水）μg/g	<30	<30	<30	1300	30	4/24	全国	1992	3
底質（公共用水域・海水）μg/g	<30	<30	<30	94	30	5/28	全国	1992	3

(3) 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）

アセトニトリル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 2.3 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では 3μg/L 未満、同海水域でも同様に 3μg/L 未満となった。

表 2.3 水質中のアセトニトリルの濃度

媒体	平均濃度	最大値等濃度
	水質	
公共用水域・淡水	3μg/L 未満 (2000)	3μg/L 未満 (2000)
公共用水域・海水	3μg/L 未満 (2000)	3μg/L 未満 (2000)

注)：公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。

3. 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について生物群、毒性分類別に整理すると表 3.1 のとおりとなる。

表 3.1 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			>1,000,000	<i>Selenastrum capricornutum</i>	NOEC BMS	3				環境庁
			>1,000,000	<i>Selenastrum capricornutum</i>	NOEC GRO	3				環境庁
			>1,000,000	<i>Selenastrum capricornutum</i>	EC ₅₀ BMS	3				環境庁
			>1,000,000	<i>Selenastrum capricornutum</i>	EC ₅₀ GRO	3				環境庁
甲殻類			>100,000	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	4				11951
			>100,000	<i>Gammarus fasciatus</i>	LC ₅₀ MOR	4				11951

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	
			155,000	<i>Daphnia pulex</i>	LC ₅₀ MOR	18 時間				2192
			160,000	<i>Daphnia magna</i>	NOEC REP	21				13070
			399,650	<i>Artemia salina</i>	LC ₅₀ MOR	1				13763
			654,000	<i>Palaemonetes kadiakensis</i>	LC ₅₀ MOR	18 時間				2192
			831,000	<i>Hyalella azteca</i>	LC ₅₀ MOR	18 時間				2192
			>960,000	<i>Daphnia magna</i>	NOEC REP	21				環境庁
			>1,000,000	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	2				環境庁
魚類			>100,000	<i>Oryzias latipes</i>	LC ₅₀ MOR	4				環境庁
			1,000,000	<i>Oryzias latipes</i>	TLm MOR	2				10132
			<u>1,000,000</u>	<i>Pimephales promelas</i>	TLm MOR	4				923
その他			>100,000	<i>Dugesia tigrina</i>	LC ₅₀ MOR	4				11951
			>100,000	<i>Helisoma trivolvis</i>	LC ₅₀ MOR	4				11951
			>100,000	<i>Lumbriculus variegatus</i>	LC ₅₀ MOR	4				11951
			<u>1,000,000</u>	<i>Lemna minor</i>	NOEC POP	4				19019
			1,800,000	<i>Lemna minor</i>	LOEC POP	4				19019
			1,810,000	<i>Entosiphon sulcatum</i>	TT	3				5303
			<u>3,200,000</u>	<i>Lemna minor</i>	EC ₅₀	4				19019
			3,685,000	<i>Lemna minor</i>	IC ₅₀ POP	4				19019

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) EC₅₀ (Median Effective Concentration) : 半数影響濃度、IC₅₀ (Median Inhibition Concentration) : 半数阻害濃度、
 LC₅₀ (Median Lethal Concentration) : 半数致死濃度、LOEC (Lowest Observed Effect Concentration) : 最小影響濃度、NR (Not Reported) : 記載無し、NOEC (No Observed Effect Concentration) : 無影響濃度、TLm (Median Tolerance Limit) : 半数生存限界濃度、TT (Toxicity Threshold) : 増殖阻害初期濃度
 影響内容) BMS (Biomass) : 生物現存量、GRO (Growth) : 生長 (植物) 成長 (動物)、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、
 MOR (Mortality) : 死亡、POP (Population) : 個体群の変化、REP (Reproduction) : 繁殖、再生産

(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、藻類では *Selenastrum capricornutum* に対する生長阻害の 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 1,000,000 μg/L 超、甲殻類では *Daphnia magna* に対する遊泳阻害の 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 1,000,000 μg/L 超、魚類では *Pimephales promelas* に対する 96 時間半数生存限界濃度 (TLm) が 1,000,000 μg/L、その他の生物ではウキクサ類 *Lemna minor* に対する 96 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 3,200,000 μg/L であった。急性毒性値について 3 生物群 (藻類、甲殻類及び魚類) 及びその他の生物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 100 を用いることとし、上記の毒性値のうちその他の生物を除いた最も低い値 (魚類の 1,000,000 μg/L) にこれを適用することにより、急性毒性値による PNEC として 10,000 μg/L が得られた。

慢性毒性値については、藻類では *Selenastrum capricornutum* に対する生長阻害の 72 時間無影響濃度 (NOEC) が 1,000,000 μg/L 超、甲殻類では *Daphnia magna* に対する繁殖阻害の 21 日間無影響濃度 (NOEC) が 960,000 μg/L 超、その他の生物ではウキクサ類 *Lemna minor* 対

する生長阻害の96時間無影響濃度（NOEC）が1,000,000 µg/Lであった。慢性毒性について2生物群（藻類及び甲殻類）及びその他の生物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100を用いることとし、上記の毒性値のうちその他の生物を除いた最も低い値（甲殻類の960,000 µg/L超）にこれを適用することにより、慢性毒性値によるPNECとして9,600 µg/L超が得られた。

本物質のPNECとしては、以上により求められたPNECのうち値が確定している魚類の急性毒性値をアセスメント係数100で除した10,000 µg/Lを採用する。

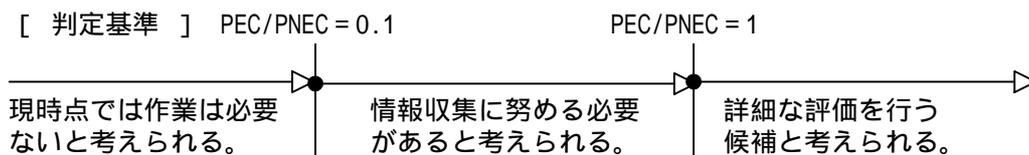
(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 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	公共用水域・淡水域	3µg/L未満 (2000)	3µg/L未満 (2000)	10,000	<0.0003
	公共用水域・海水域	3µg/L未満 (2000)	3µg/L未満 (2000)	µg/L	<0.0003

注) : 1) 環境中濃度での()内の数値は測点年を示す。

2) 公共用水域・淡水は、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3 µg/L未満であり、検出下限値未満であった。安全側の評価値として設定された予測環境中濃度（PEC）は、淡水域・海水域ともに3 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・海水域共に0.0003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。

4 . 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(2002) : 14102 の化学商品
- 2) Budavari, S. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 1996. 13. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 3) Boublik, T., Fried, V., and Hala, E., The Vapour Pressures of Pure Substances. Second Revised Edition. Amsterdam: Elsevier, 1984. [HSDB]
- 4) 財団法人化学物質評価研究機構(2002) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート
- 5) Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995. 4. [HSDB]

- 6) 化学辞典, 東京化学同人(1994). [財団法人化学物質評価研究機構(2002):化学物質安全性(ハザード)評価シート]
- 7) Riddick, JA et al.(1986). [WSKOWWIN v1.40]
- 8) 通産省化学品安全課監修, 化学品検査協会編, 化審法の既存化学物質安全性点検データ集, 日本化学物質安全・情報センター(1992).
- 9) Ludzack FJ et al; J Water Pollut Control Fed 33: 492-505 (1961). [HSDB]
- 10) Atkinson R; J Phys Chem Ref Data. Monograph 2 (1994). [HSDB]
- 11) BCFWIN v2.14

(2) 暴露評価

- 1: (財)日本環境衛生センター 平成13年度化学物質の暴露評価に関する調査報告書(環境庁請負業務)
- 2: (株)住化分析センター:平成12年度環境庁請負業務結果報告書「水環境に係る要調査項目存在状況調査」平成13年
- 3:環境庁保健調査室:平成5年版 化学物質と環境

(3) 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)
- 923: Henderson, C., Q.H. Pickering, and A.E. Lemke (1961): The Effect of Some Organic Cyanides (Nitriles) on Fish. Proc.15th Ind.Waste Conf., Eng.Bull.Purdue Univ., Ser.No.106, 65(2):120-130.
- 2192: Bowman, M.C., W.L. Oller, T. Cairns, A.B. Gosnell, and K.H. Oliver (1981): Stressed Bioassay Systems for Rapid Screening of Pesticide Residues. Part I: Evaluation of Bioassay Systems. Arch.Environ.Contam.Toxicol. 10:9-24.
- 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.
- 10132: Tonogai, Y., S. Ogawa, Y. Ito, and M. Iwaida (1982): Actual Survey on TLM (Median Tolerance Limit) Values of Environmental Pollutants, Especially on Amines, Nitriles, Aromatic Nitrogen Compounds. J.Toxicol.Sci. 7(3):193-203.
- 11951: Ewell, W.S., J.W. Gorsuch, R.O. Kringle, K.A. Robillard, and R.C. Spiegel (1986): Simultaneous Evaluation Of The Acute Effects Of Chemicals On Seven Aquatic Species. Environ Toxicol Chem 5(9):831-840.
- 13070: Tong, Z., Z. Huailan, and J. Hongjun (1996): Chronic Toxicity of Acrylonitrile and Acetonitrile to *Daphnia magna* in 14-d and 21-d Toxicity Tests. Bull.Environ.Contam.Toxicol. 57(4):655-659.
- 13763: Barahona-Gomariz, M.V., F. Sanz-Barrera, and S. Sanchez-Fortun (1994): Acute Toxicity of Organic Solvents on *Artemia salina*. Bull.Environ.Contam.Toxicol. 52(5):766-771.
- 19019: Tong, Z., and J. Hongjun (1997): Use of Duckweed (*Lemna minor* L.) Growth Inhibition Test to Evaluate the Toxicity of Acrolonitrile, Sulphocyanic Sodium and Acetonitrile in China. Environ.Pollut. 98(2):143-147.

3) 環境庁 (1996) : 平成 7 年度 生態影響試験実施事業報告