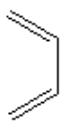


[5 5] ブタジエン

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：ブタジエン (別の呼称：1,3-ブタジエン、ビニルエチレン) CAS 番号：106-99-0 分子式：C ₄ H ₆ 分子量：54.1 構造式： 
--

(2) 物理化学的性状

本物質は常温で特臭のある気体である¹⁾。

融点	-108.966 ²⁾
沸点	-4.5 (760mmHg) ²⁾
比重	0.6149g/cm ³ (25) ³⁾
蒸気圧	2,110mmHg(25) ⁴⁾
換算係数	1ppm=2.25mg/m ³ (気体、20) ⁵⁾
n-オクタノール/水分配係数 (log Pow)	1.99 ⁶⁾
加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合なし ⁵⁾
解離定数	解離基なし ⁵⁾
水溶性	735mg/L(20) 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：揮発性が高いため標準試験法は適用できない ⁵⁾ 。半減期は7日と報告されている ⁸⁾ 。 嫌氣的：半減期は28日と報告されている ⁸⁾ 。 非生物的： (OHラジカルとの反応性)：大気中での速度定数を $6.66 \times 10^{-11} \text{cm}^3/\text{分子} \cdot \text{sec}$ (25)とした時の半減期は6時間と計算される ⁹⁾ 。 (オゾンとの反応性)：大気中での速度定数を $7.5 \times 10^{-18} \text{cm}^3/\text{分子} \cdot \text{sec}$ (25)とした時の半減期は37時間と計算される ¹⁰⁾ 。 (硝酸ラジカルとの反応性)：大気中での速度定数を $5.6 \times 10^{-14} \text{cm}^3/\text{分子} \cdot \text{sec}$ (25)とした時の半減期は14時間と計算される ¹¹⁾ 。 生物濃縮係数 (BCF)：ファットヘッドミノーに304日間暴露した時の生物濃縮係数は13との報告がある ¹²⁾ 。
--

(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 1,043,536t であり、輸出入量の記載がないことから¹⁾、推定される国内流通量は 1,043,536t 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、合成ゴムの原料(SBR, NBR 等)、ABS 樹脂、ナイロン 66 の原料である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

ブタジエン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 ブタジエンの各媒体間の分布予測結果

		分布量 (%)
大	気	80.3
水	質	7.5
土	壤	0.2
底	質	12.1

(2) 各媒体中の存在量の概要

ブタジエンの水質及び底質中の濃度について情報の整理を行い以下のデータが得られたが、現時点で暴露評価に利用できる調査例は得られなかった。

表 2.2 プタジエンの水質、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・海水 μg/L	<5	<5			0.1~5	0/2	全国	1977	2
底質(公共用水域・海水) μg/g	<5	<5			0.7~5	0/2	全国	1977	2

(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)

プタジエン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。公共用水域の淡水域においては我が国におけるデータが得られず、同海水域では評価に耐えるデータは得られなかった。

表 2.3 水質中のプタジエンの濃度

媒体	平均濃度	最大値等濃度
	水質	
公共用水域・淡水	我が国におけるデータは得られなかった	我が国におけるデータは得られなかった
公共用水域・海水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった

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

生態リスク初期評価に必要な情報は得られなかったため、生態リスクの判定はできない。本物質の国内生産量は 1,043,536t (平成 12 年) と多くなっているが、大気中に約 80% 分配されると予測されている。したがって、今後、類似物質の毒性等に関する情報を収集し、生態毒性に関する知見の充実を優先的に行う必要性について検討する必要があると考えられる。

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. 248. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 3) Lide, DR (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 81st Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2000, p. 3-88. [HSDB]
- 4) Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989. [HSDB]
- 5) 財団法人化学物質評価研究機構(1997) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート

- 6) Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995. 8. [HSDB]
- 7) McAuliffe C; J Phys Chem 70: 1267-75 (1966). [HSDB]
- 8) Capel PD, Larson SJ; Chemosphere 30: 1097-1107 (1995). [HSDB]
- 9) Atkinson R; J Phys Chem Ref Data Monograph 1 (1989). [HSDB]
- 10) Atkinson R; Atmos Environ 24A: 1-41 (1983). [HSDB]
- 11) Andersson Y, Ljungstroem E; Atmos Environ 23: 1153-55 (1989). [HSDB]
- 12) SIDS, Initial Assessment Report, 1, 3-Butadiene (1996). [HSDB]

(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: 環境庁保健調査室: 昭和53年版化学物質と環境