

[6 6] 3-メチルピリジン

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： 3-メチルピリジン

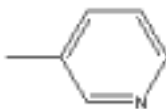
(別の呼称：ピコリン)

CAS 番号：108-99-6

分子式：C₆H₇N

分子量：93.1

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色の液体で、やや甘く不愉快な臭いがある¹⁾。

融点	-18.3 (凝固点) ²⁾
沸点	143 ~ 144 ¹⁾
比重	0.9613(15/4) ¹⁾
蒸気圧	6.05mmHg(25) ³⁾
n-オクタノール/水分配係数 (log Pow)	1.20 ⁴⁾
解離定数	pKa=5.68(20) ⁵⁾ 、pKa=5.63(25) ⁶⁾
水溶性	1,000,000mg/L(25) ⁷⁾

(3) 環境運命に関する基本的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

分解性 非生物的： (OH ラジカルとの反応性)：大気中での半減期は 9.707 日と計算される ⁸⁾ 。 BOD から算出した分解度： 3% (試験期間：4 週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L) ⁹⁾

(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(推定、ピコリン類として)であり、輸出入量の記載がないことから¹⁰⁾、推定される国内流通量は 5,000t である。PRTR 法の製造・輸入量区分は 1,000 である。

用途

本物質の主な用途は、医薬品(ニコチン酸、ニコチン酸アミド)、農薬、ゴム薬品、界面活性剤の合成原料、溶剤である¹⁰⁾。

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

3-メチルピリジ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 3-メチルピリジンの各媒体間の分布予測結果

		分布量 (%)
大	気	0.07
水	質	53.4
土	壤	2.4
底	質	44.1

(2) 各媒体中の存在量の概要

3-メチルピリジン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 3-メチルピリジンの水質、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・淡水 μg/L	<0.05	<0.05	<0.05	0.15	0.05	4/65	全国	2000	2
公共用水域・海水 μg/L	<0.05	<0.05			0.05	0/11	全国	2000	2
底質(公共用水域・淡水) μg/g	2.3	3.8	<0.2	13	0.2	15/22	全国	1994	3
底質(公共用水域・海水) μg/g	2.4	3.7	<0.2	16	0.2	21/25	全国	1994	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)

3-メチルピリジ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。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 0.15µg/L 程度、同海水域では 0.05µg/L 未満となった。

表 2.3 水質中の 3-メチルピリジンの濃度

媒体	平均	最大値等
	濃度	濃度
水質 公共用水域・淡水	0.05µg/L 未満 (2000)	0.15µg/L 程度 (2000)
公共用水域・海水	0.05µg/L 未満 (2000)	0.05µg/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			<u>1,000</u>	<i>Selenastrum capricornutum</i>	NOEC BMS	3				環境庁
			<u>1,000</u>	<i>Selenastrum capricornutum</i>	NOEC GRO	3				環境庁
			<u>5,700</u>	<i>Selenastrum capricornutum</i>	EC ₅₀ BMS	3				環境庁
			15,000	<i>Selenastrum capricornutum</i>	EC ₅₀ GRO	3				環境庁
甲殻類			<u>1,000</u>	<i>Daphnia magna</i>	NOEC REP	21				環境庁
			<u>34,000</u>	<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
			<u>144,000</u>	<i>Pimephales promelas</i>	LC ₅₀ MOR	4				3217
その他			<u>862,350</u>	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	EC ₅₀ GRO	60 時間				7790
			970,000	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	EC ₅₀ GRO	3				12687

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、LC₅₀ (Median Lethal Concentration): 半数致死濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration): 無影響濃度
 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、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 5,700 µg/L、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 34,000 µg/L、魚類では *Pimephales promelas* に対する 96 時間半数致死濃

度 (LC₅₀) が 144,000 µg/L、その他の生物ではテトラヒメナ類 *Tetrahymena pyriformis* に対する成長障害の 60 時間半数影響濃度 (EC50) が 862,350 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 (藻類の 5,700 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 57 µg/L が得られた。

慢性毒性値については、藻類では *Selenastrum capricornutum* に対する生長障害の 72 時間無影響濃度 (NOEC) が 1,000 µg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する繁殖障害の 21 日間無影響濃度 (NOEC) が 1,000 µg/L であった。慢性毒性値について 2 生物群 (藻類及び甲殻類) 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 100 を用いることとし、上記のうち最も低い値 (藻類又は甲殻類の 1,000 µg/L) 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 10 µg/L が得られた。

本物質の PNEC としては、藻類又は甲殻類の慢性毒性値をアセスメント係数 100 で除した 10 µg/L を採用する。

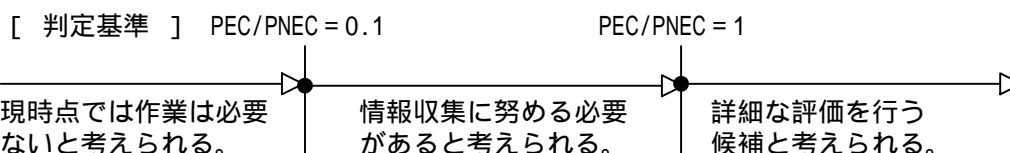
(3) 生態リスクの初期評価結果

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	0.05 µg/L未満 (2000)	0.15 µg/L程度 (2000)	10 µg/L	0.02
	公共用水域・海水域	0.05 µg/L未満 (2000)	0.05 µg/L未満 (2000)		<0.005

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 0.05 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) も、淡水域では 0.15 µg/L 程度、海水域は 0.05 µg/L 未満で検出下限値未満であった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域では 0.02、海水域では 0.005 未満となるため、現時点では新たな作業を行う必要はないと考えられる。

4 . 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) Budavari, S. (ed.). The Merck Index - Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals. Rahway, NJ: Merck and Co., Inc., 1989. 1175. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 2) Lewis, R.J., Sr (Ed.). Hawley's Condensed Chemical Dictionary. 12th ed. New York, NY: Van Nostrand Reinhold Co., 1993 915. [HSDB]

- 3) Chao J et al; J Phys Chem Ref Data 12: 1033-63 (1983). [HSDB]
- 4) Hansch, C. and A. Leo. The Log P Database. Claremont, CA: Pomona College, 1987. [HSDB]
- 5) Lide, D.R. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 75th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 1994-1995.,p. 8-50.[HSDB]
- 6) Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. 3rd ed., Volumes 1-26. New York, NY: John Wiley and Sons, 1978-1984.,p. V19 454. [HSDB]
- 7) Goe, GL (1978), [WSKOWWIN v1.40]
- 8) AOPWIN v1.90
- 9) 独立行政法人製品評価技術基盤機構(2002)：既存化学物質安全性点検データ
- 10) 化学工業日報社(2002)：14102 の化学商品

(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年度水環境に係る要調査項目存在状況調査報告書(環境庁請負業務)、平成13年
- 3: 環境庁環境安全課：平成7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)
 - 3217 : Geiger, D.L., L.T. Brooke, and D.J. Call (1990) : Acute Toxicities of Organic Chemicals to Fathead Minnows (*Pimephales promelas*), Vol. 5. Center for Lake Superior Environmental Studies, University of Wisconsin, Superior, WI:332.
 - 7790 : Schultz, T.W., M. Cajina-Quezada, and J.N. Dumont (1980) : Structure-Toxicity Relationships of Selected Nitrogenous Heterocyclic Compounds. Arch. Environ. Contam. Toxicol. 9(5):591-598.
 - 12687 : Schultz, T.W., F.M. Applehans, and G.W. Riggin (1987) : Structure-Activity Relationships of Selected Pyridines. III. Log Kow Analysis. Ecotoxicol. Environ. Saf. 13(1):76-83.
- 3) 環境庁(1997)：平成8年度生態影響試験実施事業報告