

[2 2] ニトリロ三酢酸

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： ニトリロ三酢酸

(別の呼称：N,N-ビス(カルボキシメチル)グリシン、NTA、ニトリロトリス (メチレンカルボン酸)、アミノ三酢酸、トリグリシン、トリグリコールアミック酸)

CAS 番号：139-13-9

化審法官報告示整理番号：2-1276

化管法政令番号：1-233

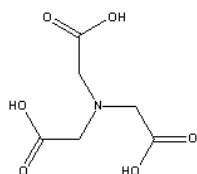
RTECS 番号：AJ0175000

分子式：C₆H₉NO₆

分子量：191.14

換算係数：1ppm=7.81mg/m³(気体、25℃)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色結晶である¹⁾。

融点	242°C ²⁾ , 241.5°C ³⁾
沸点	
比重	>1 ⁴⁾
蒸気圧	3.00×10 ⁻⁵ mmHg(=4.00×10 ⁻³ Pa) (25°C) ⁵⁾
分配係数(1-オクタノール/水) (logKow)	-3.81 ⁵⁾
解離定数 (pKa)	pK ₁ =3.03 ^{3), 5)} , pK ₂ =3.07 ³⁾ , pK ₃ =10.70(20°C) ³⁾
水溶性 (水溶解度)	59.1g/L(25°C) ⁵⁾ , 59.06g/L(25°C) ⁶⁾ , 64.90g/L(25.1°C) ⁶⁾

(3) 環境運命に関する基本的事項

ニトリロ三酢酸の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性
好氣的分解 (難分解性と判断される物質 ⁷⁾)
分解率：BOD 1%、TOC 0%、IP 0% (試験期間：4 週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L) ⁸⁾
化学分解性
<u>OH ラジカルとの反応性 (大気中)</u>
反応速度定数：7.90×10 ⁻¹¹ cm ³ /(分子・sec) (25°C、測定値) ⁵⁾
半減期：0.81～8.1 時間 (OH ラジカル濃度を 3×10 ⁶ ～3×10 ⁵ 分子/cm ³ ⁹⁾ と仮定して計算)
生物濃縮性 (高濃縮性ではないと判断される物質 ⁷⁾)
生物濃縮係数(BCF)：

<9~24 (試験期間：4週間、試験濃度：3mg/L、魚種：コイ)⁸⁾

<77~131 (試験期間：4週間、試験濃度：0.3mg/L、魚種：コイ)⁸⁾

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の化学物質排出把握管理促進法(化管法)における製造・輸入量区分は100tである。

② 用途

本物質の主な用途は、洗剤ビルダー、硬水軟化剤、界面活性剤の添加剤、放射能汚染除去剤¹⁰⁾、合成、キレート化剤、希土類元素の精製における溶離剤¹¹⁾とされている。

(5) 環境施策上の位置付け

化学物質排出把握管理促進法第一種指定化学物質(政令番号：233)として指定されているほか、水質汚濁に係る要調査項目として選定されている。

2. 暴露評価

生態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高濃度側のデータによって暴露評価を行った。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。

(1) 環境中への排出量

ニトリロ三酢酸は化管法の第一種指定化学物質である。同法に基づき集計された平成13年度の届出排出量・移動量及び届出外排出量を表2.1に示す。

表 2.1 平成13年度 PRTR データによる排出量及び移動量

	届出						届出外（国による推計）				総排出量（kg/年）		
	排出量（kg/年）				移動量（kg/年）		排出量（kg/年）				届出 排出量	届出外 排出量	合計
	大気	公共用水域	土壌	埋立	下水道	事業所外	対象業種	非対象業種	家庭	移動体			
全排出・移動量	0	0	0	0	0	6512	2302				0	2302	2302

業種別届出量(割合)

化学工業	0	0	0	0	0	6512 (100%)
------	---	---	---	---	---	----------------

総排出量の構成比 (%)	
届出	届出外
0	100

本物質の平成13年度における環境中への総排出量は2,302kgと報告されており、すべて届出外排出量であった。

表2.1に示したようにPRTR公表データにおいて届出排出量は媒体別に報告され、その集計結果が公表されているが、届出外排出量の推定は媒体別には行われていない。環境省では届出外排出量の媒体別配分を「PRTRデータ活用環境リスク評価支援システム」¹⁾で別途行っているが、本物質については媒体別の配分がされていない。本物質が界面活性剤として使用されていること、蒸気圧が低く、水溶解度が59g/Lと高いこと等を考慮して届出外排出量の大部分は公共用水域に排出されるとした。その結果と届出排出量を媒体別に合計したものを表2.2に示す。これによると水域への排出が多い。

表 2.2 環境中への推定排出量

		推定排出量(kg)
大	気	0
水	域	2,302
土	壌	0

(2) 媒体別分配割合の予測

本物質の環境中の媒体別分配割合を PRTR データ活用環境リスク評価支援システム（改良版）を用いて予測した²⁾。予測の対象地域は、平成 13 年度環境中への推定排出量が最大であった愛知県（水域への排出量 0.3 t）とした。予測結果を表 2.3 に示す。

表 2.3 媒体別分配割合の予測結果

		分配割合 (%)
大	気	0.0
水	域	99.3
土	壤	0.0
底	質	0.7

(注) 環境中で各媒体別に最終的に分配される割合を質量比として示したものの。

(3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の水質及び底質中の濃度について情報の整理を行った。各媒体での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 2.4 に示す。

表 2.4 水質及び底質中の存在状況

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 0.34 <5	3.78 <5	<0.07 <5	130 <5	0.07 5	37/47 0/7	全国 全国	2002 1994	3 ¹⁾ 4
公共用水域・海水	μg/L								
底質(公共用水域・淡水)	μg/g <0.2	<0.2	<0.2	<0.2	0.2	0/7	全国	1994	4
底質(公共用水域・海水)	μg/g								

注：1) この調査で採用された分析法では、海水試料の分析はできないされている。

(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では 130μg/L であったが、同海水域では実測データに基づく PEC は設定できなかった。なお、公共用水域の淡水域で 2 番目に高い検出値は 8.6μg/L であった。

表 2.5 公共用水域濃度

媒体	平均	最大値
水質		
公共用水域・淡水	0.34μg/L 程度 (2002)	130μg/L 程度 (2002)
公共用水域・海水	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

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	生物分類	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>300</u>	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)*	3	○			2)
		○	300	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(AUG)	3	○			2)
	○		1,626	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(AUG)	3	○			2)
		○	5,000	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	LOEC BMS	3	○			1)-56363
	○		<u>46,000</u>	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(RATE)*	3	○			2)
甲殻類		○	<u>30,000</u>	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	○			2)
	○		<u>106,815</u>	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	○			2)
魚類	○		<u>>100,000</u>	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4	○			2)
その他			39,300	<i>Rana pipiens</i>	アカガエル科	LC ₅₀ MOR	9 (胚からふ化 後 4 日まで)	○			1)-6187

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、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、LOEC (Lowest Observed Effect Concentration) : 最小影響濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration) : 無影響濃度
 影響内容) BMS (Biomass) : 生物量、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

() 内) 試験結果の算出法 : AUG (Area Under Growth Curve) 生長曲線下の面積により求めた結果、RATE 生長速度より求めた結果

*) : 最高濃度区以外の試験濃度区に対する試験時の設定濃度を用いて、0-72 時間の毒性値を再計算したもの³⁾

なお文献 2) の藻類生長阻害試験では、最高濃度区における細胞数が時間の経過とともに減少しており、生長速度への影響を捉えることができなかつたため、それ以外の試験濃度区のデータを用いて 0-72 時間の毒性値を再計算した。

(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 *Pseudokirchneriella subcapitata* に対する生長阻害の速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 46,000 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 106,815 µg/L、魚類では *Oryzias latipes* に対する 96 時

間半数致死濃度 (LC₅₀) が 100,000 µg/L 超であった。急性毒性値について 3 生物群 (藻類、甲殻類及び魚類) 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最も低い値 (藻類の 46,000 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 460 µg/L が得られた。

慢性毒性値については、藻類では *Pseudokirchneriella subcapitata* に対する生長阻害の速度法による 72 時間無影響濃度 (NOEC) が 300 µg/L、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 30,000 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、上記の毒性値のうち最も低い値 (藻類の 300 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 3 µg/L が得られた。

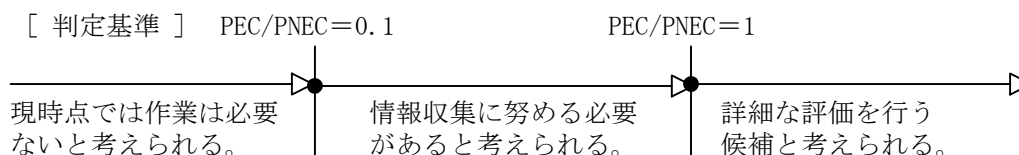
本物質の PNEC としては、以上により求められた PNEC のうち低い値である、藻類の慢性毒性値をアセスメント係数 100 で除した 3 µg/L を採用する。

(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	最大値濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
水質	公共用水域・淡水	0.34µg/L程度 (2002)	130µg/L程度 (2002)	3 µg/L	43
	公共用水域・海水	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		—

注：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、平均濃度で見ると淡水域で 0.34µg/L 程度、海水域ではデータは得られなかった。また、安全側の評価値として設定された予測環境中濃度 (PEC) は、淡水域で 130µg/L 程度であり、その設定の根拠とした平成 13 年度の水質調査では、3µg/L を超える検体が全 47 測定試料中 6 検体あった。また海水域では PEC は得られなかった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、海水域では求められなかったが淡水域では 43 となり、詳細な評価を行う候補と考えられる。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 化学大辞典編集委員会 (1963) : 化学大辞典 (縮刷版) 、6、共立出版、p.733.
- 2) LIDE, D.R., ed. (2002-2003) *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 83rd ed., Boca Raton, London, New York, Washington DC, CRC Press, p. 3-173.
- 3) BUDAVARI, S., ed. (1996) *The Merck Index*, 12th ed., Whitehouse Station, Merck and Co.
- 4) U.S. Coast Guard, Department of Transportation. CHRIS - Hazardous Chemical Data. Manual Two. Washington, DC: U.S. Government Printing Office, Oct., 1978. [Hazardous Substances Data Bank]
- 5) HOWARD, P.H. and MEYLAN, W.M., ed. (1997) *Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals*, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers, p.267.
- 6) YALKOWSKY, S. H. and HE, Y., (2003) *Handbook of Aqueous Solubility Data*, Boca Raton, London, New York, Washington DC., CRC Press, p.281.
- 7) 経済産業公報 (2003.1.17)
- 8) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ
- 9) HOWARD, P.H., BOETHLING, R.S., JARVIS, W.F., MEYLAN, W.M., and MICHALENKO, E.M. ed. (1991) *Handbook of Environmental Degradation Rates*, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers, pp.xiv.
- 10) 講談社サイエンティフィック (1985) : 有機化合物辞典.
- 11) 朝倉書店 (1986) : 実用化学辞典

(2) 暴露評価

- 1) 環境省環境リスク評価室、(社) 環境情報科学センター(2003) : PRTR データ活用環境リスク評価支援システム 2.0
- 2) (独) 国立環境研究所 (2004) : 平成 15 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書
- 3) 環境省環境保健部水環境管理課 (2003) : 平成 13 年度要調査項目測定結果
- 4) 環境庁環境保健部環境安全課(1995) : 平成 7 年版化学物質と環境

(3) 生態リスクの初期評価

- 1)- : U.S.EPA 「AQUIRE」
6187 : Birge, W.J., J.A. Black, and R.A. Kuehne (1980) : Effects of Organic Compounds on Amphibian Reproduction. Res.Rep.No.121, Water Resourc.Res.Inst., University of Kentucky, Lexington, KY:39 p.(U.S.NTIS PB80-147523).
56363 : Millington, L.A., K.H. Goulding, and N. Adams (1988) : The Influence of Growth Medium Composition on the Toxicity of Chemicals to Algae. Water Res. 22(12):1593-1597.
- 2) 環境庁 (1997) : 平成 8 年度 生態影響試験実施事業報告
- 3) (独) 国立環境研究所 (2004) : 平成 15 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書