

[5] イソプレン

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： イソプレン (別の呼称：2-メチル-1,3-ブタジエン、2-メチルブタジエン、 β -メチルブタジエン、2-メチルジビニル)
CAS 番号：78-79-5
分子式：C ₅ H ₈
分子量：68.1
構造式： $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{H}_2\text{C}=\text{C}-\text{CH}=\text{CH}_2 \end{array}$

(2) 物理化学的性状

本物質は、無色の揮発性透明液体で¹⁾、水よりも軽い。

融点	-145.95 °C ²⁾ 、-146.7 °C ³⁾
沸点	34.067 °C ²⁾
比重	0.681 (20 °C) ²⁾
蒸気圧	65.7 kPa (493 mmHg) (20 °C) ³⁾ 93.3 kPa (700 mmHg) (30 °C) ³⁾
換算係数	1ppm=2.79 mg/m ³ at 25°C, 気体 (計算値)
n-オクタノール/水分配係数	2.30 (実測値) ⁴⁾
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	300 mg/L (20 °C) ⁶⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

本物質の蓄積性は低く、BOD 分解率は低い。分解性及び濃縮性は次のとおりである。

分解性 好氣的：難分解 ⁷⁾ 嫌氣的：報告なし ⁵⁾ 非生物的： (OH ラジカルとの反応性)：対流圏大気中では、速度定数=1.01×10 ⁻¹⁰ cm ³ /分子・sec (25 °C)で ⁸⁾ 、OH ラジカル濃度=5.0×10 ⁵ ~1×10 ⁶ 分子/cm ³ とした時の半減期は1.9~3.8 時間と計算される ⁵⁾ 。 (オゾンとの反応性)：対流圏大気中では、速度定数=1.43×10 ⁻¹⁷ cm ³ /分子・sec で、オゾン濃度=7×10 ¹¹ 分子/cm ³ とした時の半減期は19.2 時間と計算される ⁸⁾ 。オゾンとの反応によりホルムアルデヒド(85%)、メタクロレイン、メチルビニルケトンが生成されるとの報告がある ⁹⁾ 。 (硝酸ラジカルとの反応性)：大気中の硝酸ラジカル濃度をそれぞれ100 ppt、10 pptとした時の半減期はそれぞれ216分、22分と計算されている ⁸⁾ 。
--

BOD から算出した分解度：

2%(試験期間：4週間、被験物質：2.0 mg/L、活性汚泥：2 mg/L)⁷⁾, 2%(試験期間：4週間、被験物質：10.0 mg/L、活性汚泥：2 mg/L)⁷⁾

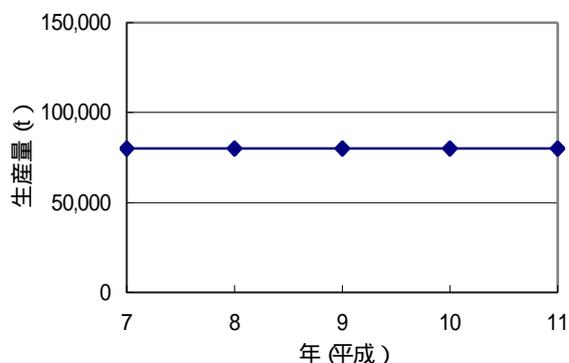
生物濃縮係数 (BCF)：5.0～14 (試験期間：6週間、試験濃度：50 µg/L), <5.6～20 (試験期間：6週間、試験濃度：5 µg/L)⁷⁾

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の平成 11 年の国内生産量は約 80,000 t であり、輸出入量については記載がないことから¹⁾、推定される国内流通量は約 80,000 t 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。国内流通量の目安として、生産量の推移¹⁰⁾を下図に示した。

イソプレン生産量の推移¹⁰⁾



用途

本物質の主な用途は、合成・天然ゴム、ポリイソプレンの 3 原料のほかブチルゴムの原料である¹⁾。

2. 暴露評価

環境リスクの初期評価のため、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	100
水	質	0.0005
土	壤	0.006
底	質	<10 ⁻⁴

(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 < 0.17	< 0.17	< 0.17	0.23	0.17	2/3	東京・埼玉・群馬	1995	3
食物	μg/g < 0.005	< 0.005			0.005	0/45	全国	1999	4
公共用水域・淡水	μg/L < 0.5		< 0.5	< 0.5	< 0.5	0/20	三重	2001	2
公共用水域・海水	μg/L < 1				1	0/3	岡山・三重	1978	5
底質(公共用水域・淡水)	μg/g				0.0016	0/1	三重	1978	5
底質(公共用水域・海水)	μg/g < 0.0039				0.001 -0.0039	0/3	岡山・三重	1978	5

(3) 人に対する暴露の推定（一日暴露量の予測最大量）

一般環境大気、公共用水域淡水及び食物の実測値を用いて、人に対する暴露の推定を行った。ここで公共用水域淡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。

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	概ね 0.17 µg/m ³ 未満の報告がある (1995)	概ね 0.051 µg/kg/day 未満の報告がある
	室内空気	データはない	データはない
	水質		
	飲料水	データはない	データはない
	地下水	データはない	データはない
	公共用水域・淡水	0.5 µg/L 未満程度(2001)	0.02 µg/kg/day 未満程度
	食物	0.005 µg/g 未満程度 (1999)	0.2 µg/kg/day 未満程度
	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	概ね 0.23 µg/m ³ の報告がある (1995)	概ね 0.069 µg/kg/day の報告がある
	室内空気	データはない	データはない
	水質		
	飲料水	データはない	データはない
	地下水	データはない	データはない
	公共用水域・淡水	0.5 µg/L 未満程度(2001)	0.02 µg/kg/day 未満程度
	食物	0.005 µg/g 未満程度 (1999)	0.2 µg/kg/day 未満程度
	土壌	データはない	データはない

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 0.069 µg/kg/day（濃度としては 0.23 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 0.22 µg/kg/day 未満であり、うち食物経由が 0.2 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 0.29 µg/kg/day 未満であった。

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	<u>0.051</u>	0.069
	室内空気		
水質	飲料水		
	地下水		
	公共用水域・淡水	<u>0.02</u>	<u>0.02</u>
食物		<u>0.2</u>	<u>0.2</u>
土壌			
経口暴露量合計		<u>0.22</u>	<u>0.22</u>
総暴露量		<u>0.271</u>	<u>0.289</u>

注：アンダーラインは不検出データによる暴露量を示す。また、総暴露量の項のアンダーラインは、不検出データによる暴露量が優位を示した総暴露量を示す。

(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では $0.5 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満程度、同海水域では $1 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満程度となった。

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	$0.5 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満程度(2001)	$0.5 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満程度(2001)
公共用水域・海水	限られた $1 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満しかない(1978)	限られた $1 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満しかない(1978)

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	吸入	LC ₅₀ : 180 g/m ³ (4 時間)
マウス	吸入	LC ₅₀ : 157 g/m ³ (2 時間)

注：()内の時間は暴露時間を示す。

ヒトでは 10 mg/m³ で臭いを感じ、160 mg/m³ に 1 分間暴露すると、眼、鼻、喉の粘膜が刺激される。中枢神経系に影響を与え、呼吸機能や意識が低下することがある。吸入により、灼熱感、咳、めまい、息苦しさ、吐き気、息切れ、咽頭痛を感じ、経口摂取では、腹痛、灼熱感の症状が現れる。また、皮膚及び眼の症状として、発赤、痛みがある。

中・長期毒性

B6C3F₁ マウス雌雄各 10 匹を 1 群とし、0、438、875、1,750、3,500、7,000 ppm を 2 週間（6 時間/日、5 日/週）吸入させた結果、438 ppm 以上の群で貧血、肝細胞の空胞変性、前胃の扁平上皮の過形成を認め、1,750 ppm 以上の群では嗅上皮の変性、7,000 ppm 群では体重増加の抑制と胸腺、睪丸の萎縮が認められた。しかし、F344 ラットを用いた同条件下の実験では、7,000 ppm 群でも異常を認めなかった²⁾。

B6C3F₁ マウス雄 40 匹を 1 群とし、70、220、700、2,200、7,000 ppm を 6 ヶ月（6 時間/日、5 日/週）吸入させた結果、220 ppm 以上の群で大球性貧血、嗅上皮の変性を認め、700 ppm 以上の群で前胃の扁平上皮の過形成、7,000 ppm 群で睪丸の萎縮と脊髄白質の変性を認めた。7,000 ppm 以上の群でみられた脊髄白質の変性は、その後の 6 ヶ月の回復期間後には 70 ppm 以上の群で有意に増加していた。また、雄の F344 ラットを用いた同条件下の実験では、7,000 ppm 群に睪丸の間細胞で過形成の発生率増加を認めた²⁾。

生殖・発生毒性

CD-1 Swiss マウス雌 10 匹を 1 群とし、0、280、1,400、7,000 ppm を妊娠 6 日～17 日目まで吸入させた結果、母マウスでは 7,000 ppm 群でも影響が認められなかったが、出生仔では用量に依存した有意な体重の減少（雄では 1,400 ppm 以上の群、雌では 280 ppm 以上の群）を認めた²⁾。

ヒトへの影響

本物質の職業暴露は、モノマーの製造や合成ゴムの製造時に起こり、眼及び上気道に対し軽度の刺激性があるとされ、長期暴露では、上気道の萎縮性変化や嗅覚低下等が報告されている。

一般環境中では植物から放出され、1988年の放出量は全世界で285,000,000トンであると推定されている。また、たばこやガソリン等の中にも見いだされており、ヒトの呼吸で吐き出される主要な内因性の炭化水素でもある（IARC, 1999）。

（2）発がん性

発がん性に関する知見の概要

B6C3F₁ マウス雄 40 匹を 1 群とし、0、70、220、700、2,200、7,000 ppm を 6 ヶ月間（6 時間/日、5 日/週）吸入させた後、さらに 6 ヶ月間飼育した結果、700 ppm 以上の群で肝細胞腺腫またはがん、ハーダー腺腫、2,200 ppm 以上の群で肺の細気管支 / 肺胞上皮腺腫またはがん、前胃の扁平上皮乳頭腫またはがんの発生率の有意な増加を認めた。一方、雄の F344 ラットを用いた同条件下の実験では、6 ヶ月間の回復期間終了時に 700 ppm 以上の群で睾丸の間細胞腺腫の発生率がわずかに増加していた²⁾。

変異原性は、ラット肝臓及びシリアンハムスター肝臓ホモジネートによる代謝活性化の有無にかかわらず、100～1,000 µg/plate までの濃度で、サルモネラ TA98、TA100、TA1535、TA1537 で認めなかった。また、染色体異常や姉妹染色分体交換（SEC）の誘導も認めなかった²⁾。

発がんリスク評価の必要性

実験動物では発がん性が認められるものの、ヒトでの発がん性に関する証拠がないため、IARC の評価では 2B（ヒトに対して発がん性が有るかもしれない）に分類されている。このため、発がん性に関する評価の実施について検討する必要がある。

（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	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
甲殻類	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
魚類			42,540	<i>Lepomis macrochirus</i>	TLm MOR	4			728	
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) TLm (Median Tolerance Limit): 半数生存限界濃度

影響内容) 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 (TLm) が 42,540 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 43 μg/L が得られた。

慢性毒性値については、信頼できるデータが得られなかった。

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 43 μg/L を採用する。

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) The Merck Index, 12th. Ed. (1996) Merck & Co., Inc.
- 3) Richardson, M.L. *et al.* (1992-1995) The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Hemistry
- 4) IPCS (1989) International Chemical Safety Cards
- 5) (財)化学品検査協会 (1997) 化学物質ハザード・データ集
- 6) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd. Ed. (1983) Van Nostrand Reinhold Co.
- 7) (財)化学品検査協会 (1992) 化審法の既存化学物質安全性点検データ集 (1992)
- 8) Wilmer, A.M., *et al.* (1984) Science, 224, 156
- 9) EU (1995) IUCLID (International Uniform Chemical Information Data Base) Data Sheet
- 10) 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, 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 11 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) (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 光化学オキシダントに係る非メタン有機ガス類等調査 平成 8 年 3 月
- 4) (財)日本食品分析センター 平成 11 年度食事からの化学物質暴露量に関する調査報告書
- 5) 環境庁保健調査室 昭和 54 年版化学物質と環境

(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) National Toxicology Program (1994) TOX 31.

参考資料

- ・ IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans, Volume 60 (1994) ;, Volume 71 (1999)

(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)
728:Pickering, Q.H. and C.Henderson (1966): Acute Toxicity of Some Important Petrochemicals to Fish. J. Water Pollut. Control Fed. 38(9): 1419-1429.