


[1] アクロレイン

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：アクロレイン (別の呼称：アクリルアルデヒド、プロペナル、プロペンアルデヒド) CAS 番号：107-02-8 分子式：C ₃ H ₄ O 分子量：56.1 構造式： 

(2) 物理化学的性状

本物質は無色の可燃性液体で、刺すような刺激臭がある¹⁾。

融点	-88 ²⁾
沸点	52.5 ²⁾
比重	0.8389(20 ²⁾)
蒸気圧	274mmHg(25 ³⁾)
換算係数	1ppm=2.33mg/m ³ (気体、20 ⁴⁾)
n- オクタノール/水分配係数 (log Pow)	-0.01 ⁵⁾
加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合なし ⁴⁾
解離定数	解離基なし ⁴⁾
水溶性	210,000mg/L(20 ⁶⁾)

(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：難分解 ⁷⁾ 。 嫌氣的：アクロレイン 50mg/L (炭素として)は 10%嫌気汚泥中、8 週間で分解しなかったとの報告がある 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 1.99×10^{-11} cm ³ /分子・sec(25 ⁹⁾)とした時の半減期は 20 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 7.4×10^{-19} cm ³ /分子・sec(室温)とした時の半減期は 15 日と計算される ¹⁰⁾ 。 (硝酸イオンとの反応性)：大気中での速度定数を 1.20×10^{-15} cm ³ /分子・sec(室温)とした時の半減期は 28 日と計算される ¹¹⁾ 。 TOC から算出した分解度： 0%(試験期間：4 週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L) ⁷⁾ GC から算出した分解度：
--

96% (試験期間：4 週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L)⁷⁾
 生物濃縮係数 (BCF)：344(ブルーギル)¹²⁾との報告があるが、アクロレインの代謝物も含んでいる可能性があるため、過大評価している可能性がある¹³⁾。log Pow(-0.01)から求めた計算値は 3.162 である¹⁴⁾。

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の平成 8 年における製造量等は 10,892t であり、その内訳は製造量が 10,892t、輸入量が 0t である¹⁵⁾。

用途

本物質の主な用途は、医薬品(メチオニンなど)、繊維処理剤、アリルアルコール、グリセリンの原料グルタルアルデヒド、1,2,6-ヘキサントルオールおよび架橋結合剤などの原料になる¹⁾。コロイド状オスミウム、ロジウム、ルテニウムの製造、溶剤、抽出に用いる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

アクロレイ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 アクロレインの各媒体間の分布予測結果

		分布量 (%)
大	気	85.2
水	質	5.6
土	壤	5.6
底	質	3.5

(2) 各媒体中の存在量の概要

アクロレイ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 アクロレインの水質、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	<0.3	<0.3	< 0.3	0.6	0.3	2/65	全国	2000	2
公共用水域・海水	μg/L	<0.3	<0.3			0.3	0/11	全国	2000	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）

アクロレイ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 0.6μg/L 程度、同海水域では 0.3μg/L 未満となった。

表 2.3 水質中のアクロレインの濃度

媒体	平均	最大値等
	濃度	濃度
水質 公共用水域・淡水	0.3μg/L 未満 (2000)	0.6μg/L 程度 (2000)
公共用水域・海水	0.3μg/L 未満 (2000)	0.3μg/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 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			30	<i>Skeletonema costatum</i>	EC ₅₀	5				344
			40	<i>Anabaena flosaquae</i>	EC ₅₀	5				344
			50	<i>Navicula pelliculosa</i>	EC ₅₀	5				344
			50	<i>Selenastrum capricornutum</i>	EC ₅₀	5				344
			680	<i>Cladophora glomerata</i>	PI ₅₀ PHY	1				14248
			690	<i>Anabaena</i>	PI ₅₀ PHY	1				14248
			1,800	<i>Enteromorpha intestinalis</i>	PI ₅₀ PHY	1				14248
甲殻類			16.9	<i>Daphnia magna</i>	NOEC MOR	22				632

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	
			30	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ MOR	2				14413
			51	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	2				12665
			<u>57</u>	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	2				632
			83	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	2				5184
				<i>Daphnia magna</i>		22				632
魚類			<u>14</u>	<i>Pimephales promelas</i>	LC ₅₀ MOR	4				12665
			16	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	LC ₅₀ MOR	4				12665
			29	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	LC ₅₀ MOR	4				12182
			33	<i>Lepomis macrochirus</i>	LC ₅₀ MOR	4				12665
その他			<u>7</u>	<i>Xenopus laevis</i>	LC ₅₀ MOR	4				12665
			24	<i>Anodonta cygnea</i>	EC ₅₀ POP	5				14396
			60	<i>Crassostrea virginica</i>	EC ₅₀	4				344
			70	<i>Corbicula fluminea</i>	EC ₅₀ MOR	1				14413
			>151	<i>Aplexa hypnorum</i>	LC ₅₀ MOR	4				12665
			>151	<i>Tanytarsus dissimilis</i>	LC ₅₀ MOR	2				12665
			200	<i>Austrolorbis glabratus</i>	LC ₅₀ MOR	1				14399
			368	<i>Physa heterostropha</i>	LC ₅₀ MOR	4				14396
			510	<i>Chironomus thummi</i>	LC ₅₀ MOR	2				14396
			1,000	<i>Austrolorbis glabratus</i>	LC ₅₀ MOR	24 時間*				14399

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。

* : 24 時間暴露後に洗浄、24 時間後に水交換。試験終了 48 時間後に効果判定。

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、PI₅₀ (Median Photosynthesis Inhibition) : 半数光合成阻害
 影響内容) IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、PHY (Physiological) : 生理機能障害、POP (Population) :
 個体群の変化

(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 *Cladophora glomerata* に対する 24 時間半数光合成阻害 (PI₅₀) が 680 μg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する 48 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 57 μg/L、魚類では *Pimephales promelas* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 14 μg/L、その他の生物ではツメガエル類 *Xenopus laevis* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 7 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 14 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 0.14 μg/L が得られた。なお、その他の生物を採用した場合、PNEC の参考値は 0.07 μg/L となる。

慢性毒性値については、信頼できるデータを得ることができなかった。

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 100 で除した 0.14 μg/L を

採用する。

(3) 生態リスクの初期評価結果

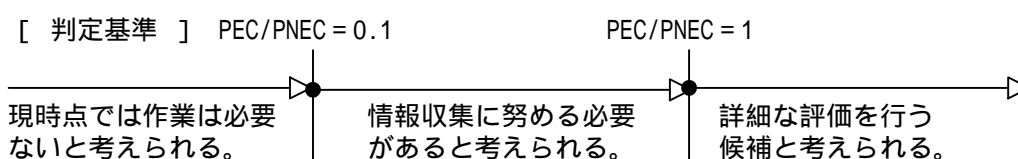
表 3.2 生態リスクの初期評価結果

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	0.3μg/L未満 (2000)	0.6μg/L程度 (2000)	0.14	4.3
	公共用水域・海水域	0.3μg/L未満 (2000)	0.3μg/L未満 (2000)	(0.07) μg/L	<2.1

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。

3) PNEC での () 内の数値はその他の生物を考慮した場合の値。



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 0.3 μg/L 未満であり、安全側の評価値として設定された予測環境中濃度 (PEC) は、淡水域では 0.6μg/L 程度、海水域では 0.3μg/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、淡水域では 4.3 となるため、詳細な評価を行う候補と考えられる。一方、海水域ではこの比は 2.1 未満となるため、現時点では生態リスクの判定はできない。本物質の大部分は大気中に分配されると予測されており、水質中の分配率は約 6 % と推定されている。しかし、製造量等は 10,892t (平成 8 年度) と多く、PNEC 値も 0.14μg/L と小さい値を示すため、今後は検出下限値を見直した上で、海水域での環境中濃度の測定を優先的に行う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. 23. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 3) Howard PH, Meylan WM; Handbook of Physical Properties of Organic Compounds. NY, NY: Lewis Publ p. 177 (1997). [HSDB]
- 4) 財団法人化学物質評価研究機構(2000) : 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. 5. [HSDB]
- 6) IUCLID(International Uniform Chemical Information Data Base) Data Sheet, EU(1995). [財団法人化学物質評価研究機構(2000) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート]

- 7) 化学品検査協会, 化審法の既存化学物質安全性点検データ. [財団法人化学物質評価研究機構(2000): 化学物質安全性(ハザード)評価シート]
- 8) Shelton DR, Tiedje JM; Development of Tests for Determining Anaerobic Biodegradation Potential. USEPA 560/5-81-013 NTIS PB84-166495 (1981). [HSDB]
- 9) Atkinson R; J Phys Chem Ref Data. Monograph No. 1 (1989). [HSDB]
- 10) Atkinson R, Carter WP; Chem Rev 84: 437-70 (1984). [HSDB]
- 11) Harley RA, Cass GR; Environ Sci Technol 28: 88- 98 (1994). [HSDB]
- 12) Barrows ME et al; in Dynamics, Exposure Hazard Assess Toxic Chem. Ann Arbor, IM: Ann Arbor Science pp. 279-92 (1980). [HSDB]
- 13) HSDB
- 14) BCFWIN v2.14
- 15) 平成 8 年度既存化学物質の製造・輸入量に関する実態調査, 通商産業省. [財団法人化学物質評価研究機構(2000): 化学物質安全性(ハザード)評価シート]

(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 1 2 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 1 3 年

(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)
- 344: Office of Pesticide Programs (1995): Environmental Effects Database (EEDB). Environmental Fate and Effects Division, U.S.EPA, Washington, D.C..
- 632: Macek, K.J., M.A. Lindberg, S. Sauter, K.S. Buxton, and P.A. Costa (1976): Toxicity of Four Pesticides to Water Fleas and Fathead Minnows. EPA-600/3-76-099, Environ.Res.Lab., U.S.Enviro.n.Prot.Agency, Duluth, M N:68.
- 5184: LeBlanc, G.A. (1980): Acute Toxicity of Priority Pollutants to Water Flea (*Daphnia magna*). Bull.Enviro.n.Contam.Toxicol. 24(5):684-691.
- 12182: McKim, J.M., P.K. Schmieder, G.J. Niemi, R.W. Carlson, and T.R. Henry (1987): Use of Respiratory-Cardiovascular Responses of Rainbow Trout (*Salmo gairdneri*) in Identifying Acute Toxicity Syndromes in Fish. Part 2. Malathion. Environ.Toxicol.Chem. 6:313-328.
- 12665: Holcombe, G.W., G.L. Phipps, A.H. Sulaiman, and A.D. Hoffman (1987): Simultaneous Multiple Species Testing: Acute Toxicity of 13 Chemicals to 12 Diverse Freshwater Amphibian, Fish, and Invertebrate Families. Arch.Enviro.n.Contam.Toxicol. 16:697-710.
- 14248: Fritz-Sheridan, R.P. (1982): Impact of the Herbicide Magnacide-H (2-Propenal) on Algae. Bull.Enviro.n.Contam.Toxicol. 28(2):245-249.
- 14396: Horne, J.D., and B.R. Oblad (1983): Aquatic Toxicity Studies of Six Priority Pollutants. Rep.No.4380, NUS Corp., Houston Environ.Center, Houston, TX:99 p.; Appendix A, J.D.Horne,

M.A.Swirsky, T.A.Hollister, B.R.Oblad, and J.H.Kennedy (Eds.), Acute Toxicity Studies of Five Priority Pollutants, NUS Corp.Rep.No.4398, Houston, TX:47 p.

14399 : Hopf, H.S., and R.L. Muller (1962) : Laboratory Breeding and Testing of *Australorbis glabratus* for Molluscicidal Screening. Bull.W.H.O. 27:783-789.

14413 : Foster, R.B. (1981) : Use of Asiatic Clam Larvae in Aquatic Hazard Evaluations. In: J.M.Bates and C.I.Weber (Eds.), Ecological Assessments of Effluent Impacts on Communities of Indigenous Aquatic Organisms, ASTM STP 730, Philadelphia, PA:281-288.