


## [ 6 ] アリルアルコール

### 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： アリルアルコール (別の呼称：2-プロペン-1-オール、プロペニルアルコール)
CAS 番号：107-18-6
分子式：C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O
分子量：58.1
構造式： 

#### (2) 物理化学的性状

本物質は無色の液体である<sup>1)</sup>。

融点	-129 <sup>2)</sup>
沸点	96 ~ 97 <sup>3)</sup>
比重	0.8540(20/4 <sup>4)</sup> )
蒸気圧	2.7kPa(20mmHg)(20 <sup>5)</sup> )、4.3kPa(32mmHg)(30 <sup>5)</sup> )
換算係数	1ppm=2.41mg/m <sup>3</sup> (気体、20 <sup>6)</sup> )
n-オクタノール/水分配係数 (log Pow)	0.17(実測値 <sup>7)</sup> )
加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合なし <sup>6)</sup>
解離定数	解離基なし <sup>6)</sup>
水溶性	水に混和 <sup>6)</sup> 、1,000,000mg/L(20 <sup>8)</sup> )

#### (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：良分解 <sup>9)</sup> 嫌氣的：報告なし <sup>6)</sup> 非生物的： (OHラジカルとの反応性):対流圏大気中でのOHラジカルとの反応による半減期は6時間との報告がある <sup>10)</sup> 。水中のOHラジカルとの速度定数 $1.2 \times 10^9$ L/分子・sec で、水中のOHラジカル濃度を $1 \times 10^{-17}$ M とした時の半減期は2年と計算される <sup>6)</sup> 。 BOD から算出した分解度： 86% (試験期間：2週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L) <sup>9)</sup>
---

#### (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約45,000t(推定)であり、輸出入量の記載がないこ

とから<sup>11)</sup>、推定される国内流通量は約 45,000t である。PRTR 法の製造・輸入量区分は 10,000 ~ 100,000t の範囲である。

### 用途

本物質の主な用途は、ジアリルフタレート樹脂、医薬品、アリルグリシジルエーテル、樹脂、エピクロロヒドリン、香料、難燃化剤などの原料である<sup>11)</sup>。

## 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 パーセントイル値を参考として併記している。

### (1) 環境中分布の予測

アリルアルコール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 2,400km<sup>2</sup>、人口約 800 万人のモデル地域を設定して予測を行った<sup>1)</sup>。

表 2.1 アリルアルコールの各媒体間の分布予測結果

		分布量 (%)
大	気	0.2
水	質	60.8
土	壌	0.5
底	質	38.4

### (2) 各媒体中の存在量の概要

アリルアルコール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 アリルアルコールの水質、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	0/65	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）

アリルアルコール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 0.3µg/L 未満、同海水域でも同様に 0.3µg/L 未満となった。

表 2.3 水質中のアリルアルコールの濃度

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)	0.3µg/L 未満 (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 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	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
甲殻類			250	<i>Daphnia magna</i>	LC <sub>50</sub> MOR	4				11951
			320	<i>Asellus intermedius</i>	LC <sub>50</sub> MOR	4				11951
			1,000 ~ 10,000	<i>Crangon crangon</i>	LC <sub>50</sub> MOR	2				906
			4,900	<i>Gammarus fasciatus</i>	LC <sub>50</sub> MOR	4				11951
魚類			<b>320</b>	<i>Pimephales promelas</i>	LC <sub>50</sub> MOR	4				3217
			320	<i>Pimephales promelas</i>	LC <sub>50</sub> MOR	4				11951
			1,000	<i>Carassius auratus</i>	LC <sub>50</sub> MOR	1				623
その他			100	<i>Lumbriculus variegatus</i>	LC <sub>50</sub> MOR	4				11951
			1000	<i>Dugesia tigrina</i>	LC <sub>50</sub> MOR	4				11951
			<b>4,800</b>	<i>Helisoma trivolvis</i>	LC <sub>50</sub> MOR	4				11951
			330 ~ 1,000	<i>Ophryotrocha diadema</i>	LC <sub>50</sub> MOR	48 時間				10890

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) LC<sub>50</sub> (Median Lethal Concentration)：半数致死濃度

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 *Pimephales promelas* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC<sub>50</sub>) が 320 µg/L、その他の生物ではヒラマキガイ類 *Helisoma trivolvis* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC<sub>50</sub>) が 4,800 µg/L であった。甲殻類の *Daphnia magna* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC<sub>50</sub>) が 250 µg/L、*Asellus intermedius* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC<sub>50</sub>) が 320 µg/L であり、信頼性が「b」とされているが、これらは試験期間中無給餌であり、適切な試験とは言えないため採用しないこととした。急性毒性値について 1 生物群 (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 1,000 を用いることとし、上記の毒性値のうち最も低い値 (魚類の 320 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 0.32 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 1,000 で除した 0.32 µg/L を採用する。

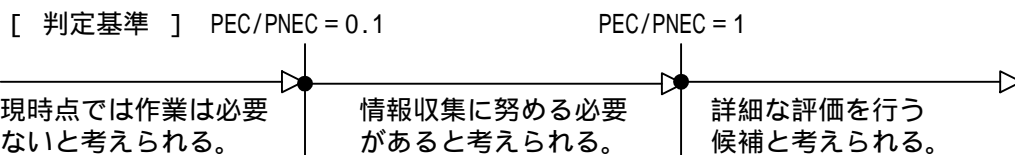
## (3) 生態リスクの初期評価結果

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)	0.3µg/L未満 (2000)	0.32 µg/L	<0.94
	公共用水域・海水域	0.3µg/L未満 (2000)	0.3µg/L未満 (2000)		<0.94

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・海水域ともに 0.3 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・海水域ともに 0.3 µg/L 未満であり、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・海水域ともに 0.94 未満となるため、現時点ではリスク評価の判定を行うことはできない。本物質の国内生産量 (平成 12 年) は約 45,000t (推定) と多く、水質中に約 60% 分布すると予測されており、また PNEC 値は 0.32 µg/L で小さい値を示している。したがって、今後は生態毒性に関する知見を充実させるとともに、検出下限値を見直した上で、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) The Merck Index, 12th. Ed., Merck & Co., Inc.(1996).; 化学辞典, 東京化学同人(1994). [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) 化学辞典, 東京化学同人(1994).; Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd. Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(1996).; 有機合成化学協会編, 有機化学物辞典, 講談社(1985). [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]
- 3) The Merck Index, 12th. Ed., Merck & Co., Inc.(1996). [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]
- 4) The Merck Index, 12th. Ed., Merck & Co., Inc.(1996).; 有機合成化学協会編, 有機化学物辞典, 講談社(1985). [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) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd. Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(1996). [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]
- 6) 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) 分配係数計算用プログラム“C Log P”, アダムネット(株). [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) Yalkowsky, SH & Dannenfelser, RM (1992). [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]
- 9) 通産省化学品安全課監修, 化学品検査協会編, 化審法の既存化学物質安全性点検データ集, 日本化学物質安全・情報センター(1992).
- 10) 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]
- 11) 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) 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)
  - 623: Bridie, A.L., C.J.M. Wolff, and M. Winter (1979): The Acute Toxicity of Some Petrochemicals to Goldfish. Water Res. 13(7):623-626.
  - 906: Portmann, J.E., and K.W. Wilson (1971): The Toxicity of 140 Substances to the Brown Shrimp and Other Marine Animals. Shellfish Information Leaflet No.22 (2nd Ed.), Ministry of

- Agric.Fish.Food, Fish.Lab.Burnham-on-Crouch, Essex, and Fish Exp.Station Conway, North Wales :12 p.
- 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.
- 10890 : Parker, J.G. (1984) : The Effects of Selected Chemicals and Water Quality on the Marine Polychaete *Ophryotrocha diadema*. Water Res. 18(7):865-868.
- 11951 : Ewell, W.S., J.W. Gorsuch, R.O. Kringle, K.A. Robillard, and R.C. Spiegel (1986) : Simultaneous Evaluation Of The Acute Effects Of Chemicals On Seven Aquatic Species. Environ Toxicol Chem 5(9):831-840.