

[18] クロトンアルデヒド

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：クロトンアルデヒド (別の呼称：2-ブテナール) CAS 番号：4170-30-3 分子式：C ₄ H ₆ O 分子量：70.1 構造式：  |
|---|

(2) 物理化学的性状

本物質は無色透明な液体である¹⁾。

| | |
|-----------------------------|------------------------------|
| 融点 | -76.5 ²⁾ |
| 沸点 | 102 ³⁾ |
| 比重 | 0.853(20/20) ³⁾ |
| 蒸気圧 | 30mmHg(25) ⁴⁾ |
| n-オクタノール/水分配係数 (log Pow) | 0.60(計算値) ⁵⁾ |
| 水溶性 | 18.1g/100g(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 良好 ⁷⁾ 非生物的： (OH ラジカルとの反応性)：大気中での速度定数を $3.52 \times 10^{-11} \text{cm}^3/\text{分子} \cdot \text{sec}$ (25)、 OH ラジカル濃度 $5 \times 10^5 \text{分子}/\text{cm}^3$ とした時の半減期は 11 ~ 12 時間と計算される ⁸⁾ 。 TOC から算出した分解度： 82%(試験期間：4 週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L) ⁷⁾ HPLC から算出した分解度： 100%(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)：3.162(計算値) ⁹⁾ |
|---|

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の生産量等の情報は得られなかった。

用途

本物質の主な用途は、衛生材料・農薬(医薬、医薬中間体)、化学合成原料等(合成中間体)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

クロトンアルデヒド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 クロトンアルデヒドの各媒体間の分布予測結果

| | | 分布量(%) |
|---|---|--------|
| 大 | 気 | 4.4 |
| 水 | 質 | 54.9 |
| 土 | 壌 | 4.1 |
| 底 | 質 | 36.7 |

(2) 各媒体中の存在量の概要

クロトンアルデヒド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 クロトンアルデヒドの水質、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 | <2 | <2 | | | 2 | 0/6 | 全国 | 1995 | 2 |
| 公共用水域・海水 | μg/L | <2 | <2 | | | 2 | 0/5 | 全国 | 1995 | 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）

クロトンアルデヒド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2μg/L未満程度、同海水域でも同様に2μg/L未満程度となった。

表2.3 水質中のクロトンアルデヒドの濃度

| 媒体 | 平均 | 最大値等 |
|----------------|------------------|------------------|
| | 濃度 | 濃度 |
| 水質 公共用水域・淡水 | 2µg/L 未満程度(1995) | 2µg/L 未満程度(1995) |
| 公共用水域・海水 | 2µg/L 未満程度(1995) | 2µg/L 未満程度(1995) |

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 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | |
| 魚類 | | | 1,300 | <i>Menidia beryllina</i> | LC ₅₀ MOR | 4 | | | | 863 |
| | | | 3,500 | <i>Lepomis macrochirus</i> | LC ₅₀ MOR | 4 | | | | 863 |
| その他 | | | 800,000 | <i>Tetrahymena pyriformis</i> | EC ₅₀ PGR | 46 時間 | | | | 18285 |
| | | | 990,000 | <i>Tetrahymena thermophila</i> | EC ₅₀ PGR | 46 時間 | | | | 18285 |

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

影響内容) MOR (Mortality)：死亡、PGR (Population Growth)：個体群成長・増殖

(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、その他の生物ではテトラヒメナ類 *Tetrahymena pyriformis* に対する個体群成長・増殖の 46 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 800,000 µg/L であった。急性毒性について藻類、甲殻類及び魚類の信頼できる知見が得られなかったため、PNEC を求めることができなかった。なお、その他の生物を採用した場合、アセスメント係数として 1,000 を採用することとすると、PNEC の参考値は 800 µg/L となる。

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 は求めることができなかったが、参考値としては 800 µg/L となる。

10) 化学物質データベース WebKis-Plus.

(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: 環境庁保健調査室: 平成 8 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)

863: Dawson, G.W., A.L. Jennings, D. Drozdowski, and E. Rider (1977): The Acute Toxicity of 47
Industrial Chemicals to Fresh and Saltwater Fishes. J.Hazard.Mater. 1(4):303-318.

18285: Pauli, W., and S. Berger (1997): Toxicological Comparisons of *Tetrahymena* Species, End
Points and Growth Media: Supplementary Investigations to the Pilot Ring Test. Chemosphere
35(5):1043-1052.