［５９］　ベンズアルデヒド

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： ベンズアルデヒド
（別の呼称：ベンゾイックアルデヒド）
CAS 番号：100-52-7
分子式：C_7H_6O
分子量：106.1
構造式：

（2）物理化学的性状

本物質は無色で揮発性の油状液体で、苦扁桃油の臭いがある[1)]。

融点	-56.5℃[2)]、-26℃[3)]
沸点	179℃[4)]
比重	1.050(15/4℃)[2)]
蒸気圧	133Pa(1mmHg)(26℃)[5)]
換算係数	1ppm=4.41mg/m^3(気体、25℃)[6)]
n-オクタノール/水分配係数 (log Pow)	1.47(実測値)[7)]
加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合なし[6)]
解離定数	解離基なし[6)]
水溶性	3,000mg/L(25℃)[8)]

（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
　好気的：良分解[9)]
　嫌気的：報告なし[6)]
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 1.29×10^{-11}cm^3/分子・sec(室温)で、OH ラジカル濃度を 5×10^5～1×10^6 分子/cm^3 とした時の半減期は 15～30 時間と計算される[6)]。水中の OH ラジカルとの速度定数 4.4×10^9L/分子・sec で、OH ラジカル濃度を 1×10^{-17}M とした時の半減期は 182 日と計算される[6)]。
　（硝酸ラジカルとの反応性）：大気中の硝酸ラジカルとの速度定数 2.0×10^{-15}m^3/分子・sec(25℃)で、硝酸ラジカル濃度を 2×10^8 分子/cm^3 とした時の半減期は 17 日と計算される[6)]。

BOD から算出した分解度：
66%（試験期間：2 週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L）[9)]

(4) 製造輸入量及び用途

① 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 1,000t(推定)、輸出量は 239.503t、輸入量は 645.020t であることから [1)]、推定される国内流通量は 1,405.517t である。OECD に報告している生産量は 1,000～10,000t、PRTR 法の製造・輸入量区分は 1,000～10,000t の範囲である。

② 用　途

本物質の主な用途は、合成繊維助剤、染料、香料(食品香料、花香調香料)、医薬品、有機合成、調味料、安息香酸である [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

ベンズ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 2,400km^2、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　ベンズアルデヒドの各媒体間の分布予測結果

	分布量(%)
大　　気	37.4
水　　質	10.3
土　　壌	42.2
底　　質	10.1

(2) 各媒体中の存在量の概要

ベンズ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い以下のデータが得られたが、現時点で暴露評価に利用できる調査例は得られなかった。

表 2.2　ベンズアルデヒドの水質、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	<1	<1			0.5～1	0/2	東京、埼玉	1984	2
公共用水域・海水　μg/L	<4	<4			1～4	0/7	全国	1984	2
底質（公共用水域・淡水）μg/g	57	66	32	100	10～15	2/2	東京、埼玉	1984	2
底質（公共用水域・海水）μg/g	<100	<100	<30	170	30～100	1/7	全国	1984	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）

ベンズ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。評価に耐えるデータは得られなかった。

表 2.3　水質中のベンズアルデヒドの濃度

媒　体	平　均 濃　度	最　大　値　等 濃　度
水　質		
公共用水域・淡水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった
公共用水域・海水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐え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（内分泌撹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 a	b	c	Ref. No.
藻類	○		17,000	*Chlorella vulgaris*	EC_{50}　GRO	80 時間			○	17321
			34,000	*Scenedesmus quadricauda*	TT　POP	7			○	5303
甲殻類	○		**>15,800**	*Orconectes immunis*	LC_{50}　MOR	4	○			10775
魚類		(○)*	220	*Pimephales promelas*	NOEC　MOR	7	○			16510
	○		**1,070**	*Lepomis macrochirus*	LC_{50}　MOR	4	○			10775
	○		5,390	*Ictalurus punctatus*	LC_{50}　MOR	4	○			10775
	○		13,800	*Carassius auratus*	LC_{50}　MOR	4	○			10775
その他			290	*Entosiphon sulcatum*	TT　POP	3			○	5303
	○		>15,800	*Aplexa hypnorum*	LC_{50}　MOR	4	○			10775
	○		**113,000**	*Tetrahymena thermophila*	EC_{50}　POP	2	○			4344
	○		159,000	*Tetrahymena pyriformis*	EC_{50}　POP	2	○			4980

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。

*：試験期間が短く生態リスク初期評価ガイドラインの定義で慢性毒性には該当しないが、米国環境保護庁では慢性毒性として扱っているため(　)にして示した。

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

ｴﾝﾄﾞﾎﾟｲﾝﾄ）EC_{50}（Median Effective Concentration): 半数影響濃度、LC_{50}（Median Lethal Concentration): 半数致死濃度、NOEC（No Observed Effect Concentration）: 無影響濃度、TT(Toxicity Threshold)：増殖阻害初期濃度

影響内容）GRO(Growth):生長（植物）、成長（動物）、MOR（Mortality）: 死亡、POP(Population Changes):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、甲殻類では *Orconectes immunis* に対する 96 時間半数致死濃度（LC_{50}）が 15,800 μg/L 超、魚類では *Lepomis macrochirus* に対する 96 時間半数致死濃度（LC_{50}）が 1,070 μg/L、その他の生物ではテトラヒメナ類 *Tetrahymena thermophila* に対する増殖阻害の 48 時間半数影響濃度（EC_{50}）が 113,000 μg/L であった。急性毒性値について 2 生物群（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 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 1,070 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 1.1 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。

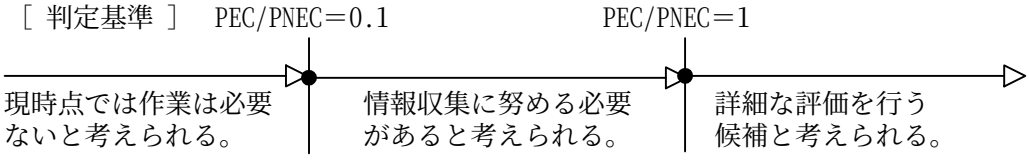
本物質の PNEC としては、魚類の急性毒性値をアセスメント係数 1,000 で除した 1.1 μg/L を採用する。

(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 ﾊﾟｰｾﾝﾀｲﾙ値]濃度（PEC）	PNEC	PEC/PNEC 比
水質	公共用水域･淡水域	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった	1.1 μg/L	―
	公共用水域･海水域	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった		―

注：公共用水域･淡水域は、河川河口域を含む。



現時点では、淡水域・海水域共に環境中濃度に関するデータが不足しているため、生態リスクの判定はできない。本物質は国内での推定流通量が約 1,400t であり、環境中では約 10%が水質中に分配されると予測されている。しかし、PNEC 値は 1.1μg/L と小さい値を示していることから、今後は、水環境中への放出の可能性等の情報を収集し、環境中濃度の測定等知見の充実を優先的に行う必要性について検討する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) The Merck Index, 12th. Ed., Merck & Co., Inc.(1996).; Richardson, M.L. et.al., The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry(1992-1995). [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]
3) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd. Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(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]
4) 有機合成化学協会編, 有機化学物辞典, 講談社(1985).; The Merck Index, 12th. Ed., Merck & Co., Inc.(1996).; Richardson, M.L. et.al., The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry(1992-1995). [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]
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) Sherman PD; Aldehydes; In: Kirk-Othmer Encycl Chem Tech 3rd Ed 1: 790-8 (1978). [HSDB]
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).

（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：昭和 60 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）
4344 : Pauli, W., S. Berger, L. Jaskulka, and S. Schmitz (1993) : A Case for the Inclusion of a Protozoan Test in Aquatic Toxicity Assessment Using *Tetrahymena*. Sci.Total Environ. (Suppl .):779-786.
4980 : Schultz, T.W., M. Cajina-Quezada, M. Chang, D.T. Lin, and R. Jain (1989) : Structure-Toxicity Relationships of Para-Position Alkyl- and Halogen-Substituted Monoaromatic Compounds. In: G.W.Suter II and M.A.Lewis (Eds.), Aquatic Toxicology and Environmental Fate, 11th Volume, ASTM STP 1007, Philadelphia, PA:410-423.

5303 : Bringmann, G., and R. Kuhn (1980) : Comparison of the Toxicity Thresholds of Water Pollutants to Bacteria, Algae, and Protozoa in the Cell Multiplication Inhibition Test. Water Res. 14(3):231-241.

10775 : Phipps, G.L., and G.W. Holcombe (1985) : A Method for Aquatic Multiple Species Toxicant Testing: Acute Toxicity of 10 Chemicals to 5 Vertebrates and 2 Invertebrates. Environ.Pollut.Ser.A Ecol.Biol.38(2):141-157.

16510 : Pickering, Q.H., J.M. Lazorchak, and K.L. Winks (1996) : Subchronic Sensitivity of One-, Four-, and Seven-Day-Old Fathead Minnow (*Pimephales promelas*) Larvae to Five Toxicants. Environ.Toxicol.Chem. 15(3):353-359.

17321 : Dedonder, A., and C.F. Van Sumere (1971) : The Effect of Phenolics and Related Compounds on the Growth and the Respiration of Chlorella vulgaris. Z.Pflanzenphysiol. 65:70-80.