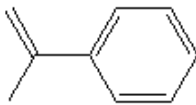


[3 1] α -メチルスチレン

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： α -メチルスチレン (別の呼称：1-メチルエテニルベンゼン、イソプロペニルベンゼン、2-フェニルプロペン)
CAS 番号：98-83-9
化審法官報告示整理番号：3-5
化管法政令番号：1-335
RTECS 番号：WL5075300
分子式： C_9H_{10}
分子量：118.18
換算係数：1ppm=4.83mg/m ³ (気体、25℃)
構造式： 

(2) 物理化学的性状

本物質は無色の液体である¹⁾。

融点	-23.2℃ ²⁾
沸点	165.4℃ ²⁾
密度	0.9106g/cm ³ (20℃) ²⁾
蒸気圧	0.29mmHg(=3.87×10 ¹ Pa)(32℃) ³⁾ 、1.9mmHg(20℃) ⁴⁾
分配係数(1-オクタノール/水)(logK _{ow})	3.48 ⁵⁾
解離定数(pKa)	
水溶性(水溶解度)	116mg/L(温度の記載なし) ³⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

α -メチルスチレンの分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性
<u>好氣的分解</u>
分解率：BOD 0%、GC 0% (試験期間：2週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L) ⁶⁾
化学分解性
<u>OH ラジカルとの反応性(大気中)</u>
反応速度定数：5.2×10 ⁻¹¹ cm ³ /(分子・sec) (測定値) ⁷⁾
半減期：1.2～12 時間 (OH ラジカル濃度を 3×10 ⁶ ～3×10 ⁵ 分子/cm ³ ⁸⁾ と仮定して計算)
<u>オゾンとの反応性(大気中)</u>
反応速度定数：1.37×10 ⁻¹⁶ cm ³ /(分子・sec) (25℃、AOPWIN ⁹⁾ により計算)
半減期：0.47～2.8 時間 (オゾン濃度を 3×10 ¹² ～5×10 ¹¹ 分子/cm ³ ⁸⁾ と仮定して計算)

生物濃縮性（濃縮性が無いまたは低いと判断される物質¹⁰⁾）

生物濃縮係数(BCF)： 15～140 (試験期間：8週間、試験濃度：0.3mg/L)⁶⁾

(12)～113 (試験期間：8週間、試験濃度：0.03mg/L)⁶⁾

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の平成13年における国内生産量は30,000t(推定)¹¹⁾での推移を表1.1に示す。また、OECDに報告している生産量は10,000t以上超である。

表 1.1 α-メチルスチレンの国内生産量(推定)(t)の推移

年	平成 8年	9年	10年	11年	12年	13年
生産量 (t)	33,000	33,000	33,000	33,000	32,000	30,000

② 用途

本物質の主な用途は、ABS樹脂の耐熱、耐衝撃性の強化、ポリエステル樹脂、アルキド樹脂の変性とされている¹¹⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

化学物質排出把握管理促進法第一種指定化学物質（政令番号：335）として指定されているほか、有害大気汚染物質に該当する可能性がある物質及び水質汚濁に係る要調査項目として選定されている。

2. 暴露評価

生態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高濃度側のデータによって暴露評価を行った。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。

(1) 環境中への排出量

α-メチルスチレンは化管法の第一種指定化学物質である。同法に基づき集計された平成13年度の届出排出量・移動量及び届出外排出量を表2.1に示す。

表 2.1 平成13年度 PRTR データによる排出量及び移動量

	届出						届出外（国による推計）				総排出量（kg/年）		
	排出量（kg/年）				移動量（kg/年）		排出量（kg/年）				届出 排出量	届出外 排出量	合計
	大気	公共用水域	土壌	埋立	下水道	事業所外	対象業種	非対象業種	家庭	移動体			
全排出・移動量	59688	61	0	0	422	199001	104				59749	104	59853

業種別届出量(割合)

化学工業	59513 (99.7%)	61 (100%)	0	0	422 (100%)	194528 (97.8%)
石油製品・石炭製品製造業	110 (0.2%)	0	0	0	0	2 (0.001%)
プラスチック製品製造業	61 (0.1%)	0	0	0	0	71 (0.04%)
熱供給業	4 (0.01%)	0	0	0	0	0
倉庫業	0	0	0	0	0	4400 (2.2%)

総排出量の構成比 (%)	
届出	届出外
99.8	0.2

本物質の平成13年度における環境中への総排出量は60tと報告されており、そのうち届出排出量は59.7tで全体の99.8%であった。届出排出量のうち59.69tが大気へ、0.06tが公共用水域へ排出されるとしており、大気への排出量が多い。その他に下水道への移動量が0.4t届け出られている。これらの主な排出源は、化学工業であった。

表2.1に示したようにPRTR公表データにおいて届出排出量は媒体別に報告され、その集計結果が公表されているが、届出外排出量の推定は媒体別には行われていない。別途行われている届出外排出量の媒体別配分の推定結果¹⁾と届出排出量を媒体別に合計したものを表2.2に示す。

表 2.2 環境中への推定排出量

	推定排出量(kg)
大 気	59,791
水 域	62
土 壌	0

(2) 媒体別分配割合の予測

本物質の環境中の媒体別分配割合を PRTR データ活用環境リスク評価支援システム（改良版）を用いて予測した²⁾。予測の対象地域は、平成 13 年度環境中への推定排出量が最大であった愛媛県（大気への排出量 22 t）とした。予測結果を表 2.3 に示す。

表 2.3 媒体別分配割合の予測結果

		分配割合 (%)
大	気	60.3
水	域	29.5
土	壌	9.7
底	質	0.5

(注) 環境中で各媒体別に最終的に分配される割合を質量比として示したもの。

(3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の水質及び底質中の濃度について情報の整理を行った。各媒体での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 2.4 に示す。

表 2.4 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
公共用水域・淡水	μg/L	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	全国	2002	3
		<0.3	<0.3	<0.3	<0.3	0.3	全国	1997	4
公共用水域・海水	μg/L	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	全国	2002	3
		<0.3	<0.3	<0.3	<0.3	0.3	全国	1997	4
底質(公共用水域・淡水)	μg/g	<0.0055	<0.0055	<0.0055	<0.0055	0.0055	全国	1997	4
底質(公共用水域・海水)	μg/g	<0.0055	<0.0055	<0.0055	<0.0055	0.0055	全国	1997	4

(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 0.01μg/L 未満、同海水域では概ね 0.01μg/L 未満となった。

表 2.5 公共用水域濃度

媒体	平均	最大値
水質		
公共用水域・淡水	0.01μg/L 未満 (2002)	0.01μg/L 未満 (2002)
公共用水域・海水	概ね 0.01μg/L 未満 (2002)	概ね 0.01μg/L 未満 (2002)

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	生物分類	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		○	172	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(AUG)	3		○		1)
		○	<u>300</u>	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)*	3		○		1)
	○		2,560	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(AUG)	3		○		1)
	○		5,100	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(RATE)*	3		○		1)
甲殻類		○	401	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21		○		1)
	○		2,620	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2		○		1)
魚類	○		7,280	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4		○		1)
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、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、NOEC (No Observed Effect Concentration) : 無影響濃度

影響内容) GRO (Growth) : 生長 (植物)、成長 (動物)、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、REP (Reproduction) : 繁殖、再生産

() 内) 試験結果の算出法: AUG (Area Under Growth Curve) 生長曲線下の面積により求めた結果、RATE 生長速度より求めた結果

*) : 文献1)をもとに、試験時の実測濃度 (幾何平均値) を用いて0-48時間の毒性値を再計算したもの²⁾

なお、文献 1)の試験では界面活性作用を有する分散剤が用いられていたため、信頼性は b とした。

(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 *Pseudokirchneriella subcapitata* に対する生長阻害の速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 5,100 μg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する遊泳阻害の 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 2,620 μg/L、魚類では *Oryzias latipes* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 7,280 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) 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最も低い値 (甲殻類の 2,620 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 26μg/L が得られた。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 東京化学同人 (1989) : 化学大辞典.
- 2) LIDE, D.R., ed. (2002-2003) *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 83rd ed., Boca Raton, London, New York, Washington DC, CRC Press, p. 3-55.
- 3) HOWARD, P.H. and MEYLAN, W.M., ed. (1997) *Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals*, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers, p.138.
- 4) American Conference of Governmental Industrial Hygienists. Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices. 5th ed. Cincinnati, OH:American Conference of Governmental Industrial Hygienists, 1986. 410. [Hazardous Substances Data Bank]
- 5) HANSCH, C., LEO, A., and HOEKMAN, D. (1995) *Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants*, Washington DC, ACS Professional Reference Book, p.56.
- 6) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ、0082
- 7) ATKINSON, R. (1989). [U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v1.91]
- 8) HOWARD, P.H., BOETHLING, R.S., JARVIS, W.F., MEYLAN, W.M., and MICHALENKO, E.M. ed. (1991) *Handbook of Environmental Degradation Rates*, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers, pp.xiv.
- 9) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v1.91
- 10) 通産省公報 (1979.12.25)
- 11) 化学工業日報社(2003) : 14303 の化学商品

(2) 暴露評価

- 1) 環境省環境リスク評価室、(社)環境情報科学センター(2003) : PRTR データ活用環境リスク評価支援システム 2.0
- 2) (独) 国立環境研究所 (2004) : 平成 15 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書
- 3) 環境省水環境部水環境管理課 (2003) : 平成 13 年度要調査項目測定結果
- 4) 環境庁環境保健部環境安全課(1998) : 平成 10 年版化学物質と環境

(3) 生態リスクの初期評価

- 1) 環境庁 (1997) : 平成 8 年度 生態影響試験実施事業報告
- 2) (独) 国立環境研究所 (2004) : 平成 15 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書