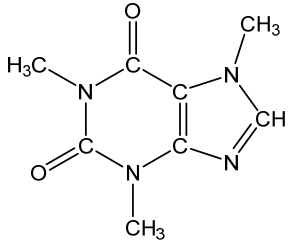


| | | |
|---|------------------|-------------|
| 2 | CAS 番号 : 58-08-2 | 物質名 : カフェイン |
| <p>化審法官報公示整理番号 : 9-419</p> <p>化管法管理番号 :</p> <p>分子式 : C₈H₁₀N₄O₂ 構造式 :</p> <p>分子量 : 194.19</p> <div style="text-align: center;">  </div> | | |

1. 物質に関する基本的事項

本物質の水溶解度は $2.17 \times 10^4 \text{ mg}/1,000\text{g}$ (25℃) で、分配係数 (1-オクタノール/水) (log Kow) は -0.07 (pH 不明)、蒸気圧は $4.7 \times 10^{-6} \text{ Pa}$ (25℃) である。生物分解性 (好氣的分解) は、易分解性との報告がある。また、加水分解性については、分解性スクリーニング試験の結果、5 日後の残存率は 108% (初期濃度 : 5.0 ng/mL、pH = 7) であった。

本物質の主な用途は、食品添加物 (コーヒー飲料、コーヒー含有飲料)、医薬とされている。また、化粧品成分 (香料、皮膚コンディショニング剤 (未分類)) に用いられるとされている。医薬品ではキサンチン系中枢興奮・強心・利尿剤に用いられ、効能・効果は眠気、倦怠感、血管拡張性及び脳圧亢進性頭痛 (片頭痛、高血圧性頭痛、カフェイン禁断性頭痛など) である。動物用医薬品では他剤との合剤として神経系用薬 (解熱鎮痛消炎剤) 及び代謝性用薬 (アレルギー用剤 (非特異性免疫原製剤を含む)) に用いられている。本物質はコーヒー豆、マテ茶を含む茶葉、カカオ豆、ガラナなどに天然に含まれている食品成分の一つである。コーヒーや茶葉から抽出されたカフェイン (抽出物) については、清涼飲料水などに苦味料等の用途で食品添加物として使用されている。カフェイン及びその塩としての 2022 年における輸出量は 2.1 t、輸入量は 432.7 t であった。

2. 曝露評価

本物質は化学物質排出把握管理促進法 (化管法) 第一種指定化学物質ではないため、排出量及び移動量は得られなかった。Mackay-Type Level III Fugacity Model により媒体別分配割合の予測を行った結果、大気、水域、土壤に等量排出された場合、土壤に分配される割合が多かった。

水生生物に対する曝露を示す予測環境中濃度 (PEC) は、公共用水域の淡水域は 2.4 µg/L 程度、海水域は概ね 0.13 µg/L となった。なお、限られた地域を調査対象とした公共用水域・海水において最大で概ね 0.23 µg/L の報告がある。

3. 生態リスクの初期評価

急性毒性値は、藻類等では緑藻類 *Desmodesmus subspicatus* の生長阻害における 72 時間 EC₅₀ 100,000 µg/L 超、甲殻類等ではオオミジンコ *Daphnia magna* の遊泳阻害における 24 時間 EC₅₀ 160,000 µg/L、魚類ではファットヘッドミノー *Pimephales promelas* の 96 時間 LC₅₀ 151,000 µg/L、その他の生物ではヒドラ属 *Hydra attenuata* の 96 時間 LC₅₀ 100,000 µg/L 超が信頼できる知見として得られたためアセスメント係数 100 を適用し、最小値となる可能性のある急性毒性値に基づく予測無影響濃度 (PNEC) は、1,000 µg/L 超とされた。

慢性毒性値は、藻類等では緑藻類 *D. subspicatus* の生長阻害における 72 時間 NOEC 6,250 µg/L、甲殻類等ではニセネコゼミジンコ *Ceriodaphnia dubia* の繁殖阻害における 8 日間 NOEC 35,000 µg/L、その他の生物ではヒドラ属 *H. attenuata* の増殖における 96 時間 NOEC 50,000 µg/L が信頼できる知見として得られたためアセスメント係数 100 を適用し、慢性毒性値に基づく PNEC₆₂ µg/L が得られた。

本物質の PNEC は、藻類等の慢性毒性値から得られた 62 µg/L を採用した。

PEC/PNEC 比は淡水域で 0.04、海水域では 0.002 であった。生態リスクの判定としては、現時点では作業の必要はないと考えられる。

限られた地域のデータではあるが、海水域において最大で概ね 0.23 µg/L の報告があり、この濃度と予測無影響濃度 (PNEC) の比は 0.004 となる。したがって、総合的な判定としても、現時点では作業の必要はないと考えられる。

| 有害性評価 (PNEC の根拠) | | | アセスメント係数 | 予測無影響濃度 PNEC (µg/L) | 曝露評価 | | PEC/PNEC 比 | 総合的な判定 |
|------------------|---------|--------------|----------|---------------------|------|--------------------|------------|--------|
| 生物種 | 急性・慢性の別 | エンドポイント | | | 水域 | 予測環境中濃度 PEC (µg/L) | | |
| 藻類等 緑藻類 | 慢性 | NOEC 生長阻害 | 100 | 62 | 淡水 | 2.4 | 0.04 | ○ |
| | | | | | 海水 | 0.13 | 0.002 | |

4. 結論

| | 結論 | 判定 |
|-------|-------------------|----|
| 生態リスク | 現時点では更なる作業の必要性は低い | ○ |

[リスクの判定] ○：現時点では更なる作業の必要性は低い、▲：更なる関連情報の収集に努める必要がある、
 ■：詳細な評価を行う候補、×：現時点ではリスクの判定はできない。