

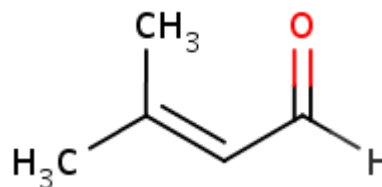
初期評価プロファイル (SIAP)

3-メチル-2-ブテナール

物質名 : 3-Methyl-2-butenal

化学式 : C₅H₈O

CAS No. : 107-86-8



SIAR 結論の要旨

ヒトの健康

本物質のトキシコキネティクス及び代謝に関する試験報告は入手できない。3-メチル-2-ブテナールは中程度の急性経口毒性、急性吸入毒性、並びに低い急性経皮毒性がある。

LD₅₀ ラット (経口) : 690mg/kg bw ; 努力性呼吸、めまい、振顫、無感動。

LC₅₀ ラット (吸入) : 3,700mg/m³/4 時間 (蒸気) ; 催涙、鼻水、閉瞼、努力性呼吸、呼吸困難、めまい、振顫、無感動。

LD₅₀ ウサギ (経皮) : 3,400mg/kg bw ; 呼吸困難、めまい、腹位、無感動、局部的皮膚刺激。

無希釈の 3-メチル-2-ブテナールは皮膚腐食性があり、眼に強い刺激性がある。本物質の蒸気は皮膚、眼、並びに気道を刺激する。十分に報告されたモルモットの Maximization 試験において、3-メチル-2-ブテナールは皮膚感作性を示した。

28 日のラット吸入試験 (OECD TG 412) において、全身毒性の NOAEC は試験された最高濃度の 300ppm(1,020mg/m³、約 252mg/kg bw/日)であった。刺激の症状は 100ppm で気道に見られ、鼻腔の呼吸上皮の扁平上皮への病巣異形成、咽頭軟骨の変化が生じた。更に 300ppm で臭覚上皮の萎縮がいくつかの症例で見られた。全部の雄及び数匹の雌で化膿性鼻炎が 300ppm で見られた。これは全身毒性よりもむしろ、両性の体重増加の減少 (対照と比較して雄で-59.8%、並びに雌で-39.7%)、並びに高用量群の雄における末期体重の減少 (-14.1%) の原因と見なされた。全身毒性を示す他の所見はなかった。局所刺激の NOAEL は 30ppm (100mg/m³、約 25mg/kg bw/日) と測定された。LOAEC は呼吸器官において観察された組織病理学的変化によると 100ppm (340mg/m³、約 84mg/kg bw/日) であった。

ラットにおける一世代試験 (OECD TG 415) の一部分として、3-メチル-2-ブテナールは 18 週の間、飲料水を通して 50-800ppm (約 6-77mg/kg bw/日) の濃度で投与された。最高濃度 (約 77mg/kg bw/日) は両性の F₀ の親動物において有害所見を導かなかった。最高濃度で既に認められている嗜好問題のために、より高用量レベルの飲料水試験は実施できなかった。

in vitro 遺伝毒性試験 (Ames 試験) は首尾一貫した結果を示していない。3-メチル-2-ブテナールは代謝

活性化の有無にかかわらず、TA100 株の液体懸濁液試験で陽性影響が報告されているが Ames 試験において変異原影響は明らかにされなかった。マウス小核試験(OECD TG 474)において、本物質は染色体異常誘発性もなく、有糸分裂中に染色体分布を損傷しなかった。OECD TG 486 に基づく、*in vivo*試験系で本物質またはその代謝物は、ラット肝細胞で不定期 DNA 修復を誘発しなかった。

飲料水中に 3-メチル-2-ブテナールを投与したラットの一世代試験 (OECD TG 415) において、生殖行動及び繁殖性の異常、全身毒性、並びに発生毒性は最高用量である 800ppm (約 77mg/kg/日) で検出されなかった。これは F₀ 親動物及び彼らの子孫に対する NOAEL を表している。

出生前毒性試験(OECD TG 414)において、3-メチル-2-ブテナールは妊娠パラメーターに影響を与えず、胚-胎仔毒性の兆候も誘発しなかったし、特に催奇形性の指標もなかった。母性毒性及び出生前発達毒性の NOAEL は 300mg/kg bw/日で検出された。より高用量 (450mg/kg bw/日) では重度の毒性を誘発し、母動物に致死性があったので評価できなかった。

環境

3-メチル-2-ブテナールは 20°Cで水溶解度が 110g/L であり、無色で僅かに黄色の液体である。蒸気圧は 20°Cで 7.5hPa である。融点は-20°Cより低く (計算値は-76.8°C) であり、沸点は 136°C、密度は 0.876g/cm³(20°C)、引火点は 37°C、可燃性がある。

水溶解度及び蒸気圧の測定データに基づいて算出されたヘンリー定数は 0.57Pa*m³/モルであり、そのほかに、EPIWIN 計算プログラムを用いて、2.85Pa*m³/モルが算出される。logK_{ow} は 0.53(25°C)と測定され、logK_{oc} が 0.9 (K_{oc}=7.9) と算出されたために、生物及び土壌濃縮は予想されない。Mackay レベル I を用いた分布モデルは水 (83%) 及び大気 (17%) が主な標的区分であることを指摘している。3-メチル-2-ブテナールは OECD 評価基準に従って、容易に生分解し、(CO₂-Headspace 試験 ; ISO 14593、28 日後に 80-90%) 10 日間の time window を満足した。加水分解は環境中の pH 条件では構造的に予想されない。大気中で本物質は OH ラジカル (予測半減期 t_{1/2}=8.2 時間) またはオゾン (予測半減期 t_{1/2}=23.2 時間) と反応し、間接的に光分解されるだろう。

急性水生毒性は魚 (*Leuciscus idus* 96 時間 LC₅₀ が 17.6mg/L)、無脊椎動物 (ミジンコ 48 時間 EC₅₀ が 13.5mg/L)、緑藻類 (*Scenedesmus subspicatus* 72 時間 ErC₅₀ が 22.4mg/L、72 時間 EbC₅₀ が 16.7mg/L) と測定された。中程度の揮発性のために、魚に対する LC₅₀ は補正され、そのために、有効な 96 時間 LC₅₀ は 12.7mg/L であった。長期または慢性試験は入手できない。最も感受性の高いデータ 96 時間 LC₅₀ の 12.7mg/L(補正值)に基づいて、EU 危険性評価方法の技術指針に従った、評価係数 1,000 を適用して PNEC(水生)の約 13µg/L が導かれる。

ばく露

3-メチル-2-ブテナールの世界生産量は 2001 年で 6,000-13,000 メートルトンであった。3-メチル-2-ブテナールは主に閉鎖系で化学物質合成中間体 (99%) として用いられ、1%だけがスイスに輸出されると同様にドイツ内で売られる。

本物質は中間体として用いられ、シトラール及びビタミン A に更に加工される。作業者の保護は適切に行われており、作業場所で本物質の取り扱い中には適切な技術用具の使用、大気中濃度のモニタリング、保護用具の使用などが実施されている。しかしながら、漏洩後、並びに事故ばく露中に 3-メチル-2-ブテナールへのばく露リスクの可能性はある。

10 トン/年より少ない推定量が精油及び他の天然生産物の加工に用いられる。

3-メチル-2-ブテナールの少量が最大 50ppm の濃度で食品中に含まれているので、消費者ばく露はわずかである。本物質は例えば、ブラックベリー(0.34%まで)並びに野生のしょうが(0.05%)のようにいくつかの植物中で自然に発生する。更に、本物質は生の肉(0.36%)及び火であぶった鶏肉(9µg/kg)で検出された。環境を通した一般的集団のばく露もわずかである。3-メチル-2-ブテナールはスイスの生産物登録(2002年)にリストされており、9720 生産物の中に“アロマ、香料”として見出されるが濃度に関する情報はない。実際にこれらの生産物のどれくらいが 3-メチル-2-ブテナールを含むかはわからない。本物質はデンマーク、スウェーデン、フィンランド、あるいはノルウェーの生産物登録には含まれていない。

環境中への放出は本物質の直接使用、並びにそれを含む生産物の加工及び使用と同様に中間体として3-メチル-2-ブテナールの生産及び加工中に発生するかもしれない。

提供国で生産及び加工中に下水処理工場の流出濃度は 20µg/L 以下であった。25kg/年より少ない量が大気中に放出された。

勧告

本物質は現在の所、今後の研究の優先度が低い。

勧告の理論的根拠、ならびに追加研究の特徴

環境

本化学物質は現在の所、今後の研究の優先度が低い。3-メチル-2-ブテナールは環境に対する有害特性を持っている。これらの有害性は極めて高濃度のばく露によりもたらされる急性毒性なのでこれ以上の作業を求めるものではないが、化学物質の安全に関する専門家及び使用者・取扱い者はやはり注意が必要である。

ヒトの健康

本化学物質はヒトの健康に危険な腐食性及び感作性特性を有する。閉鎖系における化学中間体としての主な使用、並びに提供国において消費者製品中の本物質は非常に低含量であることから考えるならば、本物質は今後の研究の優先度が低いと考えられる。各国は提供国から提出されなかったばく露シナリオがある時は、調査することが望まれる。

[著作権および免責事項について]

[著作権]

本資料の著作権は弊センターに帰属します。引用、転載、要約、複写(電子媒体への複写を含む)は著作権の侵害となりますので御注意下さい。

[免責事項]

本資料に掲載されている情報については、万全を期しておりますが、利用者が本情報を用いて行う一切の行為について、弊センターは何ら責任を負うものではありません。また、いかなる場合でも弊センターは、利用者が本情報を利用して被った被害、損失について、何ら責任を負いません。