

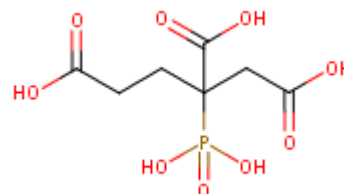
## 初期評価プロファイル (SIAP)

## 2-ホスホノ-1,2,4-ブタントリカルボン酸

物質名 : 1,2,4-Butanetricarboxylic acid,2-phosphono- (PBTC)

構造式 : C<sub>7</sub>H<sub>11</sub>O<sub>9</sub>P

CAS No. : 37971-36-1



## 総合評価

## SIDS 初期評価

現在のところ優先度が低い：今後の作業の必要はない

ドイツにおける 2-ホスホノ-1,2,4-ブタントリカルボン酸(PBTC)の生産量は 1000–10000t/年である。PBTC は冷却水と工業用洗浄剤の添加物として使用される。PBTC は「生分解されない」に分類されるが、水中で光化学的に分解される。PBTC に対して最も鋭敏な環境中の種は藻類の *Scenedesmus subspicatus* である (72 時間 NOEC=17.8mg/L)。本物質は低い急性毒性を持つ。2つのエイムス試験と 1 つの *in vitro* 染色体異常試験で陰性の結果を示した。反復投与毒性の NOAELは 375mg/kg 体重であり、胚毒性と催奇形性は 1000mg/kg までの用量では記録されなかった。EDLC は 3.75mg/kg と導出された。

冷却水の添加物としての使用による最も高い水圏地域 PEC\*は 10–100µg/L と推定された。消費者ばく露と職業ばく露は低レベルであると思われる。最も高く予測された最悪の場合の職業ばく露レベルは 0.5mg/kg/日であり、これは EDLCよりもかなり低い。結論すると、PBTC は環境とヒトに対してリスクを及ぼさない。

## ばく露

## 環境ばく露

## 環境内運命

PBTC は水と完全に混和する。ドイツで上市されている製品の蒸気圧は 50°C で 11400 Pa である。これは水の蒸気圧と PBTC の蒸気圧の合計を反映している。純粋な化合物の蒸気圧は非常に低いとされている。SAR (Screening Assessment Report:スクリーニング評価報告) 法によりヘンリー定数は  $1.19 \times 10^{-21} \text{ Pa} \cdot \text{m}^3 / \text{mol}$  と推定された。本物質は水と混和するので、log P<sub>ow</sub> を実験的に決定する必要はないと考えられ、また、標準的な推定法により推定することはできない。pH7 で陰イオンの PBTC<sup>4-</sup>が存在する (pK<sub>a4</sub> = 6.43)。しかしながら本物質の化学構造は、生物相での蓄積の傾向が大きいことを示している。PBTC はキレート化作用があるため、表面水中の浮遊物質と錯体を形成し、次いで底質に負荷する可能性がある。

上記の指摘に基づくと、PBTC の主な環境標的コンパートメントは水圏（およびおそらく底質）になると思われ、蒸発または生物相における蓄積の傾向は小さい。

PBTC は容易に生分解されない (OECD 301 D & E : 28 日後に 0%)。工業用処理施設の活性汚泥を用いた Zahn-Wellens 試験 (OECD 302 B) で、四ナトリウム塩の形の PBTC は 28 日後に最高 17%が分解されたにすぎない。SCAS 試験 (OECD 302 A) の変法では、126 日間に生分解は認められなかった。それゆえ、OECD の基準に基づくと、PBTC は「生分解されない」と見なすべきである。そうではあっても、地表水、底質、廃水汚泥から分離した細菌により、試験培地中に無機リン酸塩が十分に与えられない条件下で、一次分解が認められた。加水分解は起こらないと思われる。遊離酸としての PBTC は可視光線を吸収しないが、光化学的に誘導した増感剤の存在下で光酸化的分解が認められた (半減期は 4.3-6.4 時間、5 および 50mg/L NO<sub>3</sub>)。さらに、PBTC/Fe 錯体を使用した野外試験で、半減期は水深 40cm のところで 7 日と記録された。

それゆえ水圏に最も関係のある分解反応は光酸化的変換である。

#### キレート化作用

キレート化剤 PBTC は活性汚泥への吸着による重金属の除去を減少させる可能性がある。河川底質からの重金属の可動化が予想される。PBTC による重金属の可動化に関する唯一の実験結果が、実験室のフロキュレーションとろ過を組み合わせた装置で得られている。様々な濃度の PBTC は Fe イオンとオルトリン酸塩の除去にほとんど影響を及ぼさなかった。PBTC 自体は 60-100%の割合で除去された。これらの特性による影響の最終的評価は現時点では不可能である。

#### 廃水処理場での除去

上記のように、廃水処理場での PBTC の生分解は有意なレベルではないと思われる。SCAS 試験の結果を用いて、活性汚泥/水の分配係数を推定できる：PBTC (遊離酸) の濃度が 64mg/L、微生物の濃度が 3g (乾燥重量) /L で、約 60%の PBTC が吸着するならば、分配係数 K は約 500L/kg となる。使用する活性汚泥の有機炭素の含量を 40%と仮定するならば、K<sub>oc</sub> の値は 1250L/kg と推定できる。PBTC の四ナトリウム塩を用いて行った Zahn-Wellens 試験で、吸着は認められなかった。それゆえ遊離酸の形で排水中に放出された PBTC は、吸着による高い除去率が期待されると結論できる。しかしながら PBTC/金属錯体では吸着は期待できない。

さらに、化学的なリン酸塩除去段階を持つ処理場では (上記参照)、高い PBTC 除去率に到達できた。

以下のばく露評価では現実的な最悪事例を描く必要がある。全ての家庭廃水処理場がリン酸塩除去段階を含むとは思えず、PBTC は大部分が金属錯体として廃水に放出されるので、廃水汚泥への関連吸着は期待できない。仮に除去率を 10%と見積もる。

#### ばく露評価

##### 水系コンパートメント

##### a) 冷却水

2-ホスホノ-1,2,4-ブタントリカルボン酸の使用パターンを考えると、水系コンパートメントの最も高い地域ばく露は、冷却水中に本物質が存在する (最高濃度 10mg/L) ことが原因である。実際のところ冷却水は通常、廃水処理場で処理されずに、地表水に直接排出される (ドイツでは冷却水の 88%) :

- ー冷却水中の PBTC 濃度は 1–10mg/L である。
- ー地表水への排出時の希釈率を 100 とするならば、PEC\*は 10–100µg/L となる。

#### b) 工業用洗浄剤

PBTC を含有する洗浄剤は大部分が食品加工業で使用される。下記のようなばく露シナリオを確立できる：

- ードイツの食品加工業から生じる加工関連廃水の量は 161634000m<sup>3</sup>/年である。
- ー大雑把な推定を出すために、年間使用量が均等に分布すると仮定するならば（最大 500t/年）、廃水中の PBTC の濃度は約 3mg/L と計算できる。
- ーこの廃水の約 16%が直接、表面水に排出される。希釈率を 100 とするならば、排出による PECは 30µg/L と計算できる。
- ー残りの 84%はその場で処理されるか（38%）、または家庭廃水処理場に送られる（46%）。処理済み廃水の PECは上記よりも低いと思われる。家庭廃水処理場に送られる廃水は、流入時にさらに希釈されるだろう。希釈率を 10 とするならば、流入水中の濃度は 0.3mg/L と計算できる。

上記のシナリオは食品加工業から生じた廃水中に PBTC が均等に分布すると仮定している。局地的にはもっと高い濃度になる可能性がある。

#### 陸系コンパートメント

上記の水系コンパートメントに関するばく露シナリオでは廃水処理場での除去率が 10%と仮定した。

これは水系コンパートメント中の PBTC 濃度を予測するための最悪の場合の仮定を反映している。

一方、大量の PBTC が家庭廃水処理場で処理されていることを考えると、家庭廃水処理場汚泥の土地への散布によりある程度の陸系コンパートメントのばく露が起これと予想しなければならない。遊離酸の Koc の値は 1250L/kg と推定できる（上記を参照のこと）。放出された PBTC の 10%が錯体を形成しないと仮定するならば、下記のようなシナリオが確立できる：

- ー家庭廃水処理場の流入水中の濃度を 0.3mg/L とすれば、遊離酸の濃度は 30µg/L となる。
- ー廃水汚泥/水分係数を 500 とすれば、廃水汚泥中の濃度は 15.5mg/kg（乾燥重量）となる。
- ー土壌および草地の濃度は：

耕作地の PEC=8.7µ g/kg dwt

草地の PEC=10.3µ g/kg dwt

散布量：耕作地に 1.7t dwt/ha/年、草地に 1.0t dwt/ha/年

厚み：耕作地は 20cm、草地は 10cm かさ密度：1500kg/m<sup>3</sup>

#### 消費者ばく露

本物質の公衆的な用途はないので、消費者ばく露は予想できない。

## 職業ばく露

製品は PBTC の水溶液である。PBTC は固体として製造され、次いで水に溶解される。製造工程の反応は水中で行われる。工程のどの段階でも PBTC が溶液から分離されることはない。さらに、本物質は蒸気圧が非常に低く、蒸発は起こらないと思われる。

職業ばく露に関する測定値は入手できなかった。冷却水循環中に水垢防止剤として使用するとき、冷却塔の中に PBTC を含有する霧を発生させることがある。作業者は通常、時折しか冷却塔を操作しないので、作業者の吸入ばく露は限定される。PBTC を含有する洗浄剤は通常、アルカリ（たとえば水酸化ナトリウム）含有率の高い製品である。これらの製品は皮膚に対して腐食性なので、作業者が直接噴霧することはない。

そうではあっても、評価のために、可能性のあるばく露について下記のような最悪の場合のシナリオが示される：

- (i) 製造、積み替え、使用の際の飛び散りによる皮膚ばく露。配合業者に、または直接使用のために提供される物質は 50%水溶液である。
- (ii) 1-3%の PBTC を含有する工業用洗浄液への接触による皮膚ばく露（洗浄溶液の最終濃度は約 10-200mg/L）。

上記のように冷却塔からの散布による吸入ばく露も可能性があるが、冷却塔内の濃度は 1-10mg/L なので、このばく露は以下で算出する皮膚ばく露と較べて低レベルである。

上記の場合の両方について、DERMAL ばく露モデルを使用して可能性のある年間皮膚ばく露量を算出した。それぞれの場合でデフォルト皮膚ばく露面積を 795cm<sup>2</sup> と仮定した。入手できた製造業者からの情報と DERMAL 内のデフォルトを反映させて、製品の密度については僅かに異なる値を使用した。

下記の両方の場合で重要なのは、算出したばく露量は皮膚に接触した溶液中の量であり、吸収された量ではないことに注意することである。

### 50%溶液

events per year	use scenario	annual dermal dose mg/y	daily dermal dose mg/y	d.d.d. per 70 kg man mg/kg/day	d.d.d. over 365 days mg/y	d.d.d. 365 days 70 kg man mg/kg/day
10	rare	177	17.7	0.25	0.5	0.001
100	intermittent	1770	17.7	0.25	4.8	0.07
400	1-2 times/day	7080	29.5	0.42	19.4	0.28
480	2 times /day	8490	35.4	0.50	23.3	0.33

d.d.d. = daily dermal dose

### 3%溶液

events per year	use scenario	annual dermal dose mg/y	daily dermal dose mg/y	d.d.d. per 70 kg man mg/kg/day	d.d.d. over 365 days mg/y	d.d.d. 365 days 70 kg man mg/kg/day
400	1-2 times/day	340	1.4	0.02	0.93	0.01
480	2 times /day	408	1.7	0.02	1.12	0.01

適切な 1 日ばく露量は幾つかの方法により算出できるだろう：

一年間総労働日数（週末と祝祭日を考慮して約 240 日）で割る。これは接触事故が 240 回よりも多いときだけ適切である。従って (i) の場合、400 回の接触では 1 日ばく露量 =  $7080/240 = 29.5\text{mg/kg}$ 。しかしながら暦年全体で 400 回の接触では 1 日ばく露量は  $19.4\text{mg/kg}$  になるだろう。

一個々の日に受けたばく露が 10 回以上または 100 回の接触のとき、ばく露量の平均値を出すと、1 日ばく露量は  $17.7\text{mg/kg}$  と計算される。

上記の仮定は、発生率、推定ばく露回数、保護具（手袋）の使用の点で、控えめすぎると考えてよい十分な理由がある。しかしながら、この計算の目的は今後の研究の必要な分野を指摘するためであり、最終的な予測リスクを出すためではない。

## 環境有害性の評価

2-ホスホノ-1,2,4-ブタントリカルボン酸は水から空気に移動する傾向が小さい。大気への直接排出に関する情報は存在しない。大気については重要な有害性は無いと思われる。

陸系コンパートメントの直接ばく露は無いと思われる。廃水処理汚泥の陸上散布によってのみ陸系コンパートメントの間接ばく露の可能性がある。散布される汚泥中の濃度は低いと思われる（約  $8-10\mu\text{g/kg dwt}$ ）。水系コンパートメント中の推定濃度は陸系コンパートメント中の量よりもずっと高いので、水系コンパートメントについてのみ評価を行う。水圏の有害性評価は安全係数を用いて行うことができる。

欧州連合の初期評価のための Technical-Guidance-Document に基づくと、幾つかの栄養段階の種に関する NOEC が存在するので評価係数  $F=10$  を選ぶことができる。

安全係数 10 と最も低い水生生物影響濃度  $17.8\text{mg/L}$  (*Senedesmus subspicatus*) に基づいて、PNEC は  $17.8/10 = 1.78\text{mg/kg}$  と導出される。

次に PEC/PNEC の比は次のようになる：

$$\text{PEC/PNEC} = 100 \text{ (水系コンパートメントの最大 PEC)} / \text{-----} = 0.056$$

PEC/PNEC < 1 であるため、2-ホスホノ-1,2,4-ブタントリカルボン酸は現在のところ水系コンパートメントに大きなリスクを及ぼさない。

JETOC註：\*原文には'-----'と記載されているが、「1780」の記載ミスと思われる。

## ヒトへの毒性

入手できた毒性に関する情報は、 $375\text{mg/kg}$  体重までの用量で、有害性の証拠を示さなかった。胚毒性、催奇形性、遺伝毒性の証拠は存在しない。EDLCは  $3.75\text{mg/kg}$  体重と計算され、これは計算された最も高い最悪の場合の職業 1 日ばく露量  $0.5\text{mg/kg/日}$  よりもかなり大きい。ばく露シナリオは皮膚による 100%吸収を想定した。

EDLC\*がもっと低ければ（さらにばく露シナリオが妥当であるとすれば）、実際の吸着のもっと優れた評価が必要だろう。高い水溶解度から、本物質が吸収されないことが示唆される。

## 結論と勧告

入手できた毒性に関するデータと職業ばく露および一般住民のばく露に関するデータに基づくと、2ホスホノ-1,2,4-ブタントリカルボン酸の懸念は低い。環境中では、最も高レベルのばく露は水系コンパートメントに予想される。入手できた水生生物への作用のデータに基づくと、環境へのリスクは無いと結論できる。

### [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。