

既存化学物質安全性(ハザード)評価シート(要約版)

整理番号	96 - 21	官報公示 整理番号	2 - 17	CAS 番号	106 - 99 - 0
名 称	1,3-ブタジエン 別名：ブタジエン ビニルエチレン		構 造 式	CH ₂ =CH-CH=CH ₂	
分子式	C ₄ H ₆		分子 量	54.09	
<p>市場で流通している商品(代表例)¹⁾</p> <p>純 度 : 98 % 以上</p> <p>不純物 : ブテン類(0.6~0.7 %)、ブタジエン 2 量体、アセチレン類</p> <p>添加剤又は安定剤：TBC(<i>tert</i>-ブチルカテコール) 20 ~ 60 ppm</p>					
<p>物理・化学的性状データ</p> <p>外 観：無色気体²⁾</p> <p>融 点：-109^{3, 4, 5)}</p> <p>沸 点：-4.5^{2, 3)}</p> <p>引 火 点：-85⁶⁾</p> <p>発 火 点：420⁶⁾</p> <p>爆 発 限 界：2.0~12.0%⁶⁾</p> <p>比 重：d₄²⁰ 0.6211^{3, 7)}</p> <p>蒸 気 密 度：1.9(空気 = 1)³⁾</p> <p>蒸 気 圧：2,40.0 kPa(1,800 mmHg) (20)⁸⁾</p> <p>分 配 係 数：log Pow ; 1.99(実測値)⁸⁾、1.90(計算値)⁹⁾</p> <p>加水分解性：加水分解を受けやすい化学結合なし</p> <p>解 離 定 数：解離基なし</p> <p>スペクトル：主要マススペクトルフラグメント m/z 39 (基準ピーク, 1.0)、54(0.82)、53(0.59)、52(0.11)、27(0.68)¹⁰⁾</p> <p>吸 脱 着 性：土壌吸着係数 K_{oc} = 40.2⁸⁾</p> <p>粒 度 分 布：該当せず</p> <p>溶 解 性：1,3-ブタジエン / 水 ; 735 mg/ℓ (20)^{11, 12)}</p> <p>換 算 係 数：1 ppm = 2.25 mg/m³ (気体, 20) 1 mg/m³ = 0.445 ppm</p> <p>そ の 他：化学反応性に富み、熱または酸素により容易に重合する⁴⁾。 可燃性強く、空気中にさらすと爆発性過酸化物を生成するので危険。貯蔵 には重合防止剤及び酸化防止剤を添加する⁷⁾。</p>					

総合評価

1) 危険有害性の要約

1,3-ブタジエンは麻酔作用を持ち、吸入暴露で肺より速やかに吸収される。実験動物において急性または反復暴露した場合、高用量で呼吸器の障害を生じ、さらには免疫、神経、血液・造血器系への影響も示す。ヒトにおいては急性影響として高濃度量暴露により、呼吸器、眼、口への刺激が報告されている。

1,3-ブタジエンの変異原性・遺伝毒性は、*in vitro* の試験では代謝活性化系において、また多くの *in vivo* の試験において陽性反応を示している。ヒトでは明確な評価は得られていないが、実験動物で明らかに発がん性を示すことが証明されており、ヒトに発がん性を示す可能性が高いと考えられている。

本物質は環境中に放出された場合、物理化学的性状から考えて大気圏に分布するものと予想される。対流圏大気中での本物質の半減期は2.8~5.6時間と計算され、主な分解機構はOHラジカルとの反応である。また、オゾンとの反応による半減期は7.9~47.5時間と計算される。環境庁のモニタリングデータでは水質及び底質には検出例がなく、大気中のデータはない。水圏環境生物への影響は常温で気体であるため報告例が極めて少なく、OECD分類基準(案)では分類できない。しかし、水質及び底質に検出されず、また、大気中での分解速度が極めて速いことから影響は少ないと考えられる。

2) 指摘事項

- (1) 吸入暴露で肺より速やかに吸収される。
- (2) 高濃度暴露で呼吸器、眼、口への刺激作用を有する。
- (3) 変異原性・遺伝毒性があり、実験動物で腫瘍を誘発することが証明されているため、ヒトにおいても発がん性を示す可能性が高い。
- (4) 有害大気汚染物質の自主管理対象物質として、排出抑制対策を進める必要がある。

参考資料

- 1) (社)日本化学工業協会調査資料(1996).
- 2) The Merck Index, 11th Ed.,Merck&Co.Inc.(1989).
- 3) Richardson, M. L. et. al., The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry(1993).
- 4) 化学辞典, 東京化学同人(1994).
- 5) 日本化学会編, 実験化学ガイドブック, 丸善(1984).
- 6) 日本化学会編, 化学便覧(応用化学編) 第5版, 丸善(1985).
- 7) 有機合成化学協会編, 有機化合物辞典, 講談社(1985).
- 8) SIDS, Initial Assessment Report, 1, 3-Butadiene(1996).
- 9) 分配係数計算用プログラム“C Log P”, アダムネット(株).
- 10) NIST Library of 54K Compounds.
- 11) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(1983).
- 12) 環境庁環境保健部環境安全課監修, 化学物質と環境(1995).