

## 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	97 - 5	官報公示 整理番号	2 - 20	CAS 番号	78 - 79 - 5
名 称	イソプレン 別名：2-メチル-1,3-ブタジエン 2-メチルブタジエン -メチルブタジエン 2-メチルジビニル		構 造 式	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{H}_2\text{C}=\text{C}-\text{CH}=\text{CH}_2 \end{array}$	
分 子 式	$\text{C}_5\text{H}_8$		分 子 量	68.12	
<p>市場で流通している商品(代表例)<sup>1)</sup></p> <p>純 度 : 99 % 以上</p> <p>不純物 : シクロペンタジエン</p> <p>添加剤又は安定剤 : <i>tert</i>-ブチルカテコール</p>					
<p>物理・化学的性状データ</p> <p>外 観 : 無色液体 <sup>2)</sup></p> <p>融 点 : -145.95 <sup>2)</sup>、-146.7 <sup>3)</sup></p> <p>沸 点 : 34.067 <sup>2)</sup></p> <p>引 火 点 : -53.9 <sup>4)</sup>、-48 <sup>5)</sup></p> <p>発 火 点 : 220 <sup>4,5)</sup></p> <p>爆発限界 : 1.5-9.7 % <sup>4)</sup></p> <p>比 重 : <math>d_4^{20}</math> 0.681、<math>d_{20}^{20}</math> 0.6805 <sup>2)</sup></p> <p>蒸気密度 : 2.35(空気 = 1)<sup>3, 6)</sup></p> <p>蒸 気 圧 : 65.7 kPa(493 mmHg)(20 <sup>3)</sup>)<sup>3)</sup>、93.3 kPa(700 mmHg)(30 <sup>3)</sup>)<sup>3)</sup></p> <p>分配係数 : log Pow ; 2.30(実測値)<sup>7)</sup></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 <math>m/z</math> 67(基準ピーク, 1.0)、53(0.61)、40(0.27)<sup>8)</sup></p> <p>吸 脱 着 性 : 土壌吸着係数 <math>K_{oc} = 125</math> <sup>9)</sup></p> <p>粒 度 分 布 : 該当せず</p> <p>溶 解 性 : イソプレン / 水 ; 300 mg / ℓ (20 <sup>6)</sup>)<sup>6)</sup> アルコール、エーテル、ベンゼンなどの有機溶媒と自由に混和。</p> <p>換 算 係 数 : 1 ppm = 2.83 mg/m<sup>3</sup> (気体, 20 <sup>6)</sup>) 1 mg/m<sup>3</sup> = 0.35 ppm</p>					

そ の 他：極めて引火性が高い。酸化剤、無機酸、ハロゲン、アルキルオキシド、ニトリル、酸無水物などと激しく反応して爆発する恐れがある。重合反応を起こし易く、重合物は空気に触れると自然発火することがある<sup>4)</sup>。

## 総合評価

### 1) 危険有害性の要約

イソブレンはヒトにおいて眼及び上気道に対して軽度の刺激性を有するとされ、慢性影響ではカタル性炎症、上気道の萎縮性変化、嗅覚の低下が報告されている。実験動物では胸腺や精巣の萎縮、嗅上皮の変性、肝細胞の空胞変性、脊髄白質の変性ならびに大球性貧血などが認められている。ヒトでの発がん性に関する報告はないが、イソブレンはマウスを使った *in vivo* の変異原性試験で陽性を示し、また本物質のジエポキシ代謝物(1,2-, 3,4-ジエポキシ-2-メチルブタン)がネズミチフス菌に対して変異原性を示すこと、またマウスの発がん性試験においても肺、肝及び前胃の良性及び悪性腫瘍、並びにハーダー腺の腺腫の発生頻度の増加が認められていることから、ヒトに対する発がんの可能性があると考えられる。生殖・発生毒性に関しては実験動物で過剰肋骨及び骨化遅延がみられたが催奇形性はみられていない。

本物質は環境中に放出された場合、物理化学的性状から主とし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 OH ラジカルとの反応による半減期は 1.9 ~ 3.8 時間、オゾンとの反応による半減期は 19.2 時間と計算されている。オゾンとの反応によりホルムアルデヒド、メタクロレイン、メチルビニルケトンが生成するとの報告がある。水圏環境中では好氣的分解を受けにくい。水圏環境生物に対する急性毒性は、藻類及び甲殻類に対しては分類基準適用外、魚類に対しては harmful に分類される。

### 2) 指摘事項

- (1) 眼及び上気道に対する軽度の刺激性を有する。
- (2) *In vivo* で変異原性を示し、また実験動物でも発がん性が認められていることから、ヒトに対する発がんの可能性があると考えられる。

参考資料

- 1) (社)日本化学工業協会調査資料(1997).
- 2) The Merck Index, 12th. Ed., Merck & Co., Inc.(1996).
- 3) Richardson, M.L. et.al., The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Hemistry(1992-1995).
- 4) 日本化学会編, 化学防災指針集成, 丸善(1996).
- 5) 有機合成化学協会編, 有機化学物辞典, 講談社(1985).
- 6) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd. Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(1983).
- 7) IPCS, International Chemical Safety Cards(1989).
- 8) NIST Library of 54K Compounds.
- 9) Wilmer,A.M., et al., Science, **224**, 156(1984) .