

[3 3] 2,4-ジニトロフェノール

1. 物質に関する基本的事項

(1) 分子式・分子量・構造式

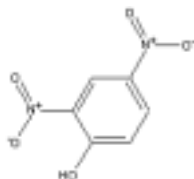
物質名： 2,4-ジニトロフェノール
(別の呼称：1-ヒドロキシ-2,4-ジニトロベンゼン)

CAS 番号：51-28-5

分子式：C₆H₄O₅N₂

分子量：184.1

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は黄色固体である¹⁾。

融点	112 ~ 114 ¹⁾
沸点	昇華する ²⁾
比重	1.683(24 ³⁾) ²⁾
蒸気圧	3 × 10 ⁻³ Pa(2 × 10 ⁻⁵ mmHg)(25 ³⁾) ³⁾
換算係数	1ppm=7.65mg/m ³ (気体、20 ⁴⁾) ⁴⁾
n-オクタノール/水分配係数 (log Pow)	1.67 ⁵⁾
加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合なし ⁶⁾
解離定数	4.09 ⁷⁾
水溶性	2,790mg/L(20 ⁸⁾) ⁸⁾ 、6,000mg/L(25 ⁹⁾) ⁹⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

<p>分解性</p> <p>好氣的：難分解¹⁰⁾</p> <p>嫌氣的：報告なし⁶⁾</p> <p>非生物的：</p> <p>(OH ラジカルとの反応性): 対流圏大気中では、速度定数 17 × 10⁻¹²cm³/分子・sec(25⁶⁾)⁶⁾で、OH ラジカル濃度を 5 × 10⁵ ~ 1 × 10⁶ 分子/cm³とした時の半減期は 11 ~ 23 時間と計算される⁶⁾。</p> <p>BOD から算出した分解度：</p> <p>0% (試験期間：4 週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L)¹⁰⁾</p> <p>生物濃縮係数(BCF): <0.4 ~ 0.7 (試験期間：6 週間、試験濃度：50mg/L)、<3.7(試験期間：6 週間、試験濃度：5mg/L)¹⁰⁾</p>
--

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の平成 12 年における国内生産量は 100t(推定)であり、輸出入量については記載がないことから¹⁾、推定される国内流通量は 100t である。また、OECD に報告している生産量は 1,000 ~ 10,000t である。

用途

本物質の主な用途は、黒色硫化染料中間体、防腐剤、pH 指示薬、試薬である¹⁾。

2. 暴露評価

環境リスクの初期評価のため、水生生物の生存・生育を確保する観点から、実測データをもとに基本的には特定の排出源の影響を受けていない一般環境等からの暴露を評価することとし、安全側に立った評価の観点からその大部分がカバーされる高濃度側のデータによって暴露量の評価を行った。原則として統計的検定の実施を含めデータの信頼性を確認した上で最大濃度を評価に用いている。なお、多数のデータが得られている場合は、95 パーセンタイル値を参考として併記している。

(1) 環境中分布の予測

2,4-ジニトロフェノールの環境中の分布について、各環境媒体間への移行量の比率を EUSES モデルを用いて算出した結果を表 2.1 に示す。なお、モデル計算においては、面積 2,400km²、人口約 800 万人のモデル地域を設定して予測を行った¹⁾。

表 2.1 2,4-ジニトロフェノールの各媒体間の分布予測結果

		分布量(%)
大	気	5.0
水	質	93.7
土	壤	0.06
底	質	1.3

(2) 各媒体中の存在量の概要

2,4-ジニトロフェノールの水質及び底質中の濃度について情報の整理を行った。各媒体ごとにデータの信頼性が確認された調査例のうち、より広範囲の地域で調査が実施されたものを抽出した結果を表 2.2 に示す。

表 2.2 2,4-ジニトロフェノールの水質、底質中の存在状況

媒体	幾何平均値	算術平均値	最小値	最大値	検出下限値	検出率	調査地域	測定年	文献
公共用水域・淡水 $\mu\text{g/L}$	<0.4	<0.4			0.4	0/7	全国	1994	2
公共用水域・海水 $\mu\text{g/L}$	<0.4	<0.4			0.4	0/5	全国	1994	2
底質(公共用水域・淡水) $\mu\text{g/g}$	<7.6	<7.6			7.6	0/7	全国	1994	2
底質(公共用水域・海水) $\mu\text{g/g}$	<7.6	<7.6			7.6	0/5	全国	1994	2

(3) 水生生物に対する暴露の推定(水質に係る予測環境中濃度: PEC)

2,4-ジニトロフェノールの水生生物に対する暴露の推定の観点から、水質中濃度を表 2.3 のように整理した。水質について安全側の評価値として予測環境中濃度(PEC)を設定すると、公共用水域の淡水域では $0.4\mu\text{g/L}$ 未満程度、同海水域でも同様に $0.4\mu\text{g/L}$ 未満程度となった。

表 2.3 水質中の 2,4-ジニトロフェノールの濃度

媒体	平均濃度	最大値等濃度
	水質	
公共用水域・淡水	$0.4\mu\text{g/L}$ 未満程度(1994)	$0.4\mu\text{g/L}$ 未満程度(1994)
公共用水域・海水	$0.4\mu\text{g/L}$ 未満程度(1994)	$0.4\mu\text{g/L}$ 未満程度(1994)

注) : 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。

3 . 生態リスクの初期評価

生態リスクの初期評価として、水生生物に対する化学物質の影響(内分泌攪乱作用に関するものを除く)についてのリスク評価を行った。

(1) 生態毒性の概要

本物質の水生生物に対する影響濃度に関する知見の収集を行い、その信頼性を確認したものについて生物群、毒性分類別に整理すると表 3.1 のとおりとなる。

表 3.1 生態毒性の概要

生物種	急性	慢性	毒性値 [μg/L]	生物名	エンドポイント /影響内容	暴露期間 [日]	信頼性			Ref. No.
							a	b	c	
藻類			40,000	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	EC ₅₀ BMS	2				2997
甲殻類			100	<i>Artemia salina</i>	LC ₅₀ MOR	68 時間				16436
			200	<i>Artemia salina</i>	LC ₅₀ MOR	2				16436
			600	<i>Gammarus pseudolimnaeus</i>	LC ₅₀ MOR	4				13274
			2,000	<i>Daphnia magna</i>	NOEC REP	21				847
			3,080	<i>Gammarus pseudolimnaeus</i>	LC ₅₀ MOR	4				13274
			3,400	<i>Artemia salina</i>	LC ₅₀ MOR	1				16436
			4,100	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	2				5184
			4,390	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	2				12665
			4,440	<i>Gammarus pseudolimnaeus</i>	LC ₅₀ MOR	4				13274
			4,500	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	1				5184
			7,000	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	1				847
			20,000	<i>Palaemonetes</i> spp.	LC ₅₀ MOR	2				13273
			24,000	<i>Artemia salina</i>	LC ₅₀ MOR	12 時間				16436
			25,600	<i>Gammarus pseudolimnaeus</i>	LC ₅₀ MOR	4				13274
	魚類			30*	<i>Cyprinus carpio</i>	MATC GRO	60			
			390	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	LC ₅₀ MOR	4				13274
			465	<i>Notopterus notopterus</i>	LC ₅₀ MOR	4				15491
			500	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	NOEC GRO	14 ~ 30				13272
			500	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	ET ₅₀	3.4				13272
			520	<i>Cyprinus carpio</i>	LC ₅₀ MOR	4				10385
			550	<i>Cirrhina mrigala</i>	LC ₅₀ MOR	4				10575
			620	<i>Lepomis macrochirus</i>	LC ₅₀ MOR	4				5590
			800	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	NOEC GRO					13272
			970	<i>Notopterus notopterus</i>	LC ₅₀ MOR	4				10913
			3,510	<i>Atherinops affinis</i>	LC ₅₀ MOR	4				13112
その他				6,490	<i>Aplexa hypnorum</i>	LC ₅₀ MOR	4			
			27,600	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	EC ₅₀ ABD	46 時間				18233

太字の毒性値は、PNEC 算出の際に参照した知見として本文で言及したものの、下線を付した毒性値は PNEC 算出の根拠として採用されたものを示す。

*：文献中では 27 ~ 34μg/L となっているが、平均の 30μg/L を採用した。

信頼性) a：毒性値は信頼できる値である、b：ある程度信頼できる値である、c：毒性値の信頼性は低いあるいは不明

エンドポイント) EC₅₀(Median Effective Concentration)：半数影響濃度、ET₅₀(Median Effective Time)：半数影響時間、LC₅₀(Median Lethal Concentration)：半数致死濃度、MATC (Maximum Acceptable Toxicant Concentration)：最高許容濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration)：無影響濃度

影響内容) BMS (Biomass)：生物現存量、ABD (Abundance)：細胞数、GRO (Growth)：生長(植物)、成長(動物)、IMM (Immobilization)：遊泳阻害、MOR (Mortality)：死亡、REP (Reproduction)：繁殖、再生産

(2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて、信頼できる知見のうち生物群ごとに値の最も低いものを整理し、そのうち最も低い値に対して情報量に応じたアセスメント係数を適

用することにより、予測無影響濃度（PNEC）を求めた。

急性毒性値については、藻類では *Scenedesmus subspicatus* に対する生長阻害の 48 時間半数影響濃度（EC₅₀）が 40,000 μg/L、甲殻類では *Daphnia magna* の 48 時間半数致死濃度（LC₅₀）が 4,100 μg/L、魚類では *Cyprinus carpio* に対する 96 時間半数致死濃度（LC₅₀）が 520 μg/L、その他の生物ではサカマキガイ科 *Aplexa hypnorum* に対する 96 時間半数致死濃度（LC₅₀）が 6,490 μg/L であった。急性毒性値について 3 生物群（藻類、甲殻類及び魚類）及びその他の生物の信頼できる知見が得られたため、アセスメント係数として 100 を用いることとし、上記の毒性値のうちその他の生物を除いた最も低い値（魚類の 520 μg/L）にこれを適用することにより、急性毒性値による PNEC として 5.2 μg/L が得られた。

慢性毒性値については、甲殻類では *Daphnia magna* に対する繁殖阻害の 21 日間無影響濃度（NOEC）が 2,000 μg/L、魚類では *Cyprinus carpio* に対する成長阻害の 60 日間最高許容濃度（MATC）が 30 μg/L であった。慢性毒性値について 2 生物群（甲殻類及び魚類）の信頼できる知見が得られたため、アセスメント係数として 100 を用いることとし、上記の毒性値のうち最も低い値（魚類の 30 μg/L）にこれを適用することにより、慢性毒性値による PNEC として 0.3 μg/L が得られた。

本物質の PNEC としては、以上により求められた PNEC のうち低い値である、魚類の慢性毒性値をアセスメント係数 100 で除した 0.3 μg/L を採用する。

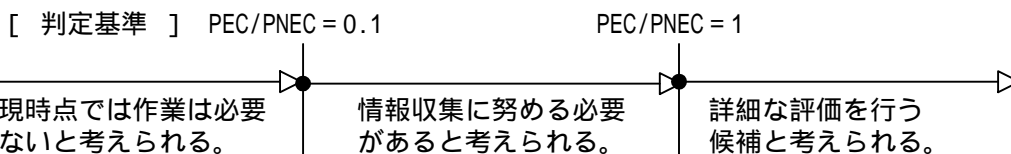
(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

媒体	平均濃度	最大値[95 パーセンタイル値]濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
水質	公共用水域・淡水域	0.4μg/L未満程度(1994)	0.3 μg/L	<1.3
	公共用水域・海水域	0.4μg/L 未満程度(1994)		<1.3

注) : 1) 環境中濃度での () 内の数値は測点年を示す。

2) 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。



本物質の公共用水域における濃度は、平均濃度で見ると淡水域・海水域共に 0.4 μg/L 未満程度であり、安全側の評価値として設定された予測環境中濃度（PEC）も同様で、淡水域・海水域共に 0.4 μg/L 未満程度で、いずれも未検出であった。

予測環境中濃度（PEC）と予測無影響濃度（PNEC）の比は、淡水域及び海水域のいずれについても 1.3 未満となるため、現時点では生態リスクの判定はできない。本物質の平成 12 年における国内生産量は 100t(推定)であり、水質中に約 94% 分配されると予測されている。PEC 値は 1994 年に測定された値であり、PNEC 値は 0.3μg/L と小さい値を示していることから、検出下限値を見直した上で、環境中濃度の測定を優先的に行う必要があると考えられる。

4 . 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) The Merck Index, 12th. Ed., Merck & Co., Inc.(1996). [財団法人化学物質評価研究機構(1999) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート]
- 2) 有機合成化学協会編, 有機化学物辞典, 講談社(1985).; 化学辞典, 東京化学同人(1994). [財団法人化学物質評価研究機構(1999) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート]
- 3) Richardson, M. L. et. al., The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry(1992). [財団法人化学物質評価研究機構(1999) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート]
- 4) 財団法人化学物質評価研究機構(1999) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート
- 5) Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995. 17. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 6) 財団法人化学物質評価研究機構(1999) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート
- 7) Pearce PJ, Simkins RJJ; Can J Chem 46:241-8 (1968). [HSDB]
- 8) Schwarzenbach RP et al; Environ Sci Technol 22:83-92 (1988). [HSDB]
- 9) Overcash MR et al; Behavior of Org Priority Pollut in the Terrestrial System, Di-n-butyl phthalate ester, Toluene, and 2,4-Dinitrophenol p.108 (1982). [HSDB]
- 10) 通産省化学品安全課監修, 化学品検査協会編, 化審法の既存化学物質安全性点検データ集, 日本化学物質安全・情報センター(1992).
- 11) 化学工業日報社(2002) : 14102 の化学商品

(2) 暴露評価

- 1: (財)日本環境衛生センター 平成12年度化学物質の暴露評価に関する調査報告書(環境庁請負業務)
- 2: 環境庁環境安全課 : 平成7年版化学物質と環境

(3) 生態リスクの初期評価

- 1) データベース : U.S.EPA 「AQUIRE」
 - 2) 引用文献 (Ref. No. : データベースでの引用文献番号)
- 847 : Kuhn, R., M. Pattard, K. Pernak, and A. Winter (1989) : Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to *Daphnia magna* in the 21 Day Reproduction Test. Water Res. 23(4):501-510.
- 2997 : Kuhn, R., and M. Pattard (1990) : Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to Green Algae (*Scenedesmus subspicatus*) in the Cell Multiplication Inhibition Test. Water Res. 24(1):31-38.
- 5184 : LeBlanc, G.A. (1980) : Acute Toxicity of Priority Pollutants to Water Flea (*Daphnia magna*). Bull.Environ.Contam.Toxicol. 24(5):684-691.

- 5590 : Buccafusco, R.J., S.J. Ells, and G.A. LeBlanc (1981) : Acute Toxicity of Priority Pollutants to Bluegill (*Lepomis macrochirus*). Bull.Environ.Contam.Toxicol. 26(4):446-452.
- 10385 : Verma, S.R., I.P. Tonk, and R.C. Dalela (1981) : Determination of the Maximum Acceptable Toxicant Concentration (MATC) and the Safe Concentration for Certain Aquatic Pollutants. Acta Hydrochim.Hydrobiol. 9(3):247-254.
- 10575 : Verma, S.R., I.P. Tonk, A.K. Gupta, and M. Saxena (1984) : Evaluation of an Application Factor for Determining the Safe Concentration of Agricultural and Industrial Chemicals. Water Res. 18(1):111-115.
- 10913 : Gupta, S., R.C. Dalela, and P.K. Saxena (1983) : Influence of Temperature on the Toxicity of Phenol and its Chloro-and Nitro-Derivatives to the Fish *Notopterus notopterus* (Pallas). Acta Hydrochim.Hydrobiol. 11(2):187-192.
- 12665 : Holcombe, G.W., G.L. Phipps, A.H. Sulaiman, and A.D. Hoffman (1987) : Simultaneous Multiple Species Testing: Acute Toxicity of 13 Chemicals to 12 Diverse Freshwater Amphibian, Fish, and Invertebrate Families. Arch.Environ.Contam.Toxicol. 16:697-710.
- 13112 : Hemmer, M.J., D.P. Middaugh, and V. Comparetta (1992) : Comparative Acute Sensitivity of Larval Topsmelt, Atherinops affinis, and Inland Silverside, *Menidia beryllina*, to 11 Chemicals. Environ.Toxicol.Chem. 11(3):401-408.
- 13272 : Howe, G.E., L.L. Marking, T.D. Bills, M.A. Boogaard, F.L. Mayer, and Jr. (1994) : Effects of Water Temperature on the Toxicity of 4-Nitrophenol and 2,4-Dinitrophenol to Developing Rainbow Trout (*Oncorhynchus mykiss*). Environ.Toxicol.Chem. 13(1):79-84.
- 13273 : Brecken-Folse, J.A., F.L. Mayer, L.E. Pedigo, and L.L. Marking (1994) : Acute Toxicity of 4-Nitrophenol, 2,4-Dinitrophenol, Terbufos and Trichlorfon to Grass Shrimp (*Palaemonetes* spp.) and Sheepshead Minnows (*Cyprinodon variegates*) as Affected by Salinity and Temperature. Environ.Toxicol.Chem. 13(1):67-77.
- 13274 : Howe, G.E., L.L. Marking, T.D. Bills, J.J. Rach, F.L. Mayer, and Jr. (1994) : Effects of Water Temperature and pH on Toxicity of Terbufos, Trichlorfon, 4-Nitrophenol and 2,4-Dinitrophenol to the Amphipod *Gammarus pseudolimnaeus*. Environ.Toxicol.Chem. 13(1):51-66.
- 15491 : Gupta, S., R.C. Dalela, and P.K. Saxena (1983) : Influence of Dissolved Oxygen Levels on Acute Toxicity of Phenolic Compounds to Fresh Water Teleost, *Notopterus notopterus* (Pallas). Water, Air, Soil Pollut. 19(3):223-228.
- 16436 : Barahona, M.V., and S. Sanchez-Fortun (1996) : Comparative Sensitivity of Three Age Classes of *Artemia salina* Larvae to Several Phenolic Compounds. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 56(2):271-278.
- 18233 : Larsen, J., T.W. Schultz, L. Rasmussen, R. Hooftman, and W. Pauli (1997) : Progress in an Ecotoxicological Standard Protocol with Protozoa: Results from a Pilot Ringtest with *Tetrahymena pyriformis*. Chemosphere 35(5):1023-1041.