

[4 5] 2,4,5-トリクロロフェノール

1. 物質に関する基本的事項

(1) 分子式・分子量・構造式

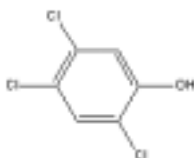
物質名：2,4,5-トリクロロフェノール

CAS 番号：95-95-4

分子式：C₆H₃Cl₃O

分子量：197.5

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色の針状晶である¹⁾。

融点	69 ²⁾
沸点	247 ²⁾
比重	1.678(25/4) ³⁾
蒸気圧	0.008mmHg(25) ⁴⁾
n-オクタノール/水分配係数 (log Pow)	3.72 ⁵⁾
解離定数	pKa=7.4 ⁶⁾
水溶性	1,200mg/L(25) ⁷⁾

(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⁸⁾</p> <p>非生物的：</p> <p>(OH ラジカルとの反応性)：大気中での反応速度を $2.1 \times 10^{-12} \text{cm}^3/\text{分子} \cdot \text{sec}$(25)、OH ラジカル濃度を $5 \times 10^5 \text{分子}/\text{cm}^3$ とした時の半減期は約 8 日である⁹⁾。</p> <p>(直接光分解)：表層水中での半減期は 1 時間¹⁰⁾、40 分¹¹⁾と推定される。</p> <p>BOD から算出した分解度：</p> <p>0%(試験期間：2 週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L)⁸⁾</p> <p>生物濃縮係数 (BCF)：121 ~ 484(試験期間：8 週間、試験濃度：10μg/L)、232 ~ 825(試験期間：8 週間、試験濃度：1μg/L)⁸⁾</p>

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の生産量・輸入量等は不明である。

用途

本物質の主な用途は、殺菌剤、防かび剤、防汚剤である¹²⁾。

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

2,4,5-トリクロ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 2,4,5-トリクロロフェノールの各媒体間の分布予測結果

		分布量(%)
大	気	0.04
水	質	0.5
土	壌	79.5
底	質	20.0

(2) 各媒体中の存在量の概要

2,4,5-トリクロ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 2,4,5-トリクロ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 μg/L	<0.2	<0.2			0.2	0/6	全国	1996	2
公共用水域・海水 μg/L	<0.2	<0.2			0.2	0/5	全国	1996	2
底質(公共用水域・淡水) μg/g	<6.3	<6.3			6.3	0/6	全国	1996	2
底質(公共用水域・海水) μg/g	<6.3	<6.3			6.3	0/5	全国	1996	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）

2,4,5-トリクロ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0.2μg/L未満程度、同海水域でも同様に0.2μg/L未満程度となった。

表2.3 水質中の2,4,5-トリクロロフェノールの濃度

媒体	平均	最大値等
	濃度	濃度
水質 公共用水域・淡水	0.2μg/L未満程度（1996）	0.2μg/L未満程度（1996）
公共用水域・海水	0.2μg/L未満程度（1996）	0.2μg/L未満程度（1996）

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			780	<i>Champia parvula</i>	LOEC REP	11~14				11452
甲殻類			>550	<i>Daphnia carinata</i>	REP	14				14118
			550	<i>Daphnia carinata</i>	EC ₅₀ LOC	1				14118
			640	<i>Palaemonetes pugio</i>	LC ₅₀ MOR	4				4894
			900	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	2				846
			1,120	<i>Palaemonetes pugio</i>	LC ₅₀ MOR	4				4894
			1,590	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	1				846
			2,400	<i>Tisbe battagliai</i>	LC ₅₀ MOR	1				4071
			2,700	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	2				5184
			3,600	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	7				2523
			3,800	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	1				5184
魚類		()*	361	<i>Pimephales promelas</i>	NOEC GRO	7				5313
			450	<i>Lepomis macrochirus</i>	LC ₅₀ MOR	4				5590
			725	<i>Pimephales promelas</i>	LOEC GRO	28				14078
			902	<i>Pimephales promelas</i>	LC ₅₀ MOR	4				5313
			990	<i>Poecilia reticulata</i>	LC ₅₀ MOR	4				11344

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	
			1,700	<i>Cyprinodon variegatus</i>	LC ₅₀ MOR	4				10366
			4,010	<i>Platichthys flesus</i>	LC ₅₀ MOR	4				4071
その他			410	<i>Lemna gibba</i>	EC ₅₀ REP	7				17665
			680	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	EC ₅₀ GRO	1				11258

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で、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。

*：試験期間が短く生態リスク初期評価ガイドラインの定義で慢性毒性には該当しないが、米国環境保護庁では慢性毒性として扱っているため()にして示した。

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、LC₅₀ (Median Lethal Concentration): 半数致死濃度、
 LOEC(Lowest Observed Effect Concentration): 最小影響濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration): 無影響濃度
 影響内容) GRO (Growth): 生長 (植物)、成長 (動物)、LOC (Distance Moved, Change in Direct Movement): 移動阻害、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、甲殻類では *Daphnia magna* に対する遊泳阻害の 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 900 μg/L、魚類では *Pimephales promelas* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 902 μg/L、その他の生物ではウキクサ類 *Lemna gibba* に対する繁殖阻害の 7 日間半数影響濃度 (EC₅₀) が 410 μg/L であった。急性毒性値について 2 生物群 (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 1,000 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 (甲殻類の 900 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 0.90 μg/L が得られた。なお、その他の生物を採用した場合の PNEC の参考値は 0.41 μg/L となる。

慢性毒性値については、藻類では *Champia parvula* に対する繁殖阻害の 11~14 日間最小影響濃度 (LOEC) が 780 μg/L、魚類では *Pimephales promelas* に対する成長阻害の 28 日間最小影響濃度 (LOEC) が 725 μg/L であった。慢性毒性値について 2 生物群 (藻類及び魚類) 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 725 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 7.3 μg/L が得られた。

本物質の PNEC としては、甲殻類の急性毒性値をアセスメント係数 1,000 で除した 0.90 μg/L を採用する。

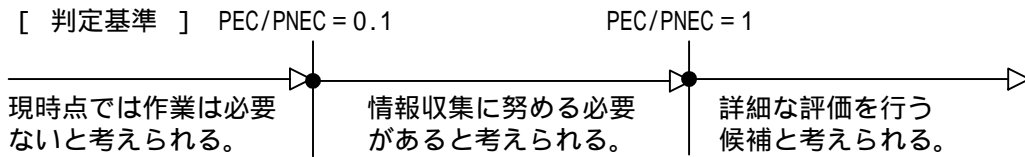
(3) 生態リスクの初期評価結果

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	0.2μg/L未満程度 (1996)	0.2μg/L未満程度 (1996)	0.90	<0.22
	公共用水域・海水域	0.2μg/L未満程度 (1996)	0.2μg/L未満程度 (1996)	(0.41) μg/L	<0.22

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。
 3) PNEC での () 内の数値はその他の生物を考慮した場合の値。



本物質の公共用水域における濃度は、平均濃度でみると淡水域・海水域共に 0.2 $\mu\text{g/L}$ 未満程度であり、検出下限値未満であった。安全側の評価値として設定された予測環境中濃度 (PEC) は、淡水域・海水域共に 0.2 $\mu\text{g/L}$ 未満程度であった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域・海水域共に 0.22 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。本物質は殺菌剤、防かび剤、防汚剤に用いられており、環境中濃度の分布予測をみると、放出された後、99%以上が土壌と底質に移行する。しかし、PNEC 値は 0.9 $\mu\text{g/L}$ と小さい値を示していることから、今後は、水質中への流出の可能性を検討し、環境中濃度の把握等情報収集の必要性を検討する。

4 . 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) Sax, N.I. Dangerous Properties of Industrial Materials. 6th ed. New York, NY: Van Nostrand Reinhold, 1984. 2627. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 2) Lide, D.R. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 76th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 1995-1996.,p. 3-259. [HSDB]
- 3) Lewis, R.J., Sr (Ed.). Hawley's Condensed Chemical Dictionary. 12th ed. New York, NY: Van Nostrand Rheinhold Co., 1993 1171. [HSDB]
- 4) Bidleman TF, Renberg L; Chemosphere 14: 1475-81 (1985). [HSDB]
- 5) Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995. 16. [HSDB]
- 6) Arcand Y et al; Water Res 29: 131-36 (1995). [HSDB]
- 7) Leunberger C et al; J Environ Sci Technol 19: 1053-58 (1985). [HSDB]
- 8) 独立行政法人製品評価技術基盤機構(2002)：既存化学物質安全性点検データ
- 9) Meylan WM, Howard PH; Chemosphere 26: 2293-99 (1993). [HSDB]
- 10) Hwang H et al; Environ Sci Tech 20: 1002-7 (1986). [HSDB]
- 11) Pelizzetti E et al; Chim Ind 67: 623-25 (1985). [HSDB]
- 12) 化学物質データベース WebKis-Plus

(2) 暴露評価

- 1: (財) 日本環境衛生センター 平成 13 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 9 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)

- 846 : Kuhn, R., M. Pattard, K. Pernak, and A. Winter (1989) : Results of the Harmful Effects of Selected Water Pollutants (Anilines, Phenols, Aliphatic Compounds) to *Daphnia magna*. *Water Res.* 23(4):495-499.
- 2523 : LeBlanc, G.A., B. Hilgenberg, and B.J. Cochrane (1988) : Relationships between the Structures of Chlorinated Phenols, Their Toxicity, and Their Ability to Induce Glutathione S-Transferase Activity in *Daphnia magna*. *Aquat.Toxicol.* 12(2):147-156.
- 4071 : Smith, S., V.J. Furay, P.J. Layiwola, and J.A. Menezes-Filho (1994) : Evaluation of the Toxicity and Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) of Chlorophenols to the Copepodid Stage of a Marine Copepod (*Tisbe*). *Chemosphere* 28(4):825-836.
- 4894 : Rao, K.R., F.R. Fox, P.J. Conklin, and A.C. Cantelmo (1981) : Comparative Toxicology and Pharmacology of Chlorophenols: Studies on the Grass Shrimp, *Palaemonetes pugio*. In: F.J.Vernberg, A.Calabrese, F.P.Thurberg, and W.B.Vernberg (Eds.), *Biological Monitoring of Marine Pollutants*, Academic Press, Inc., NY:37-72.
- 5184 : LeBlanc, G.A. (1980) : Acute Toxicity of Priority Pollutants to Water Flea (*Daphnia magna*). *Bull.EnvIRON.Contam.Toxicol.* 24(5):684-691.
- 5313 : Norberg-King, T.J. (1989) : An Evaluation of the Fathead Minnow Seven-Day Subchronic Test For Estimating Chronic Toxicity. *Environ.Toxicol.Chem.* 8(11):1075-1089.
- 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.
- 10366 : Heitmuller, P.T., T.A. Hollister, and P.R. Parrish (1981) : Acute Toxicity of 54 Industrial Chemicals to Sheepshead Minnows (*Cyprinodon variegatus*). *Bull.EnvIRON.Contam.Toxicol.* 27(5):596-604.
- 11258 : Yoshioka, Y., Y. Ose, and T. Sato (1985) : Testing for the Toxicity of Chemicals with *Tetrahymena pyriformis*. *Sci.Total Environ.* 43(1-2):149-157.
- 11344 : Saarikoski, J., and M. Viluksela (1981) : Influence of pH on the Toxicity of Substituted Phenols to Fish. *Arch.EnvIRON.Contam.Toxicol.* 10(6):747-753.
- 11452 : Thursby, G.B., R.L. Steele, and M.E. Kane (1985) : Effect of Organic Chemicals on Growth and Reproduction in the Marine Red Alga *Champia parvula*. *Environ.Toxicol.Chem.* 4(6):797-805.
- 14078 : Arthur, A.D., and D.G. Dixon (1994) : Effects of Rearing Density on the Growth Response of Juvenile Fathead Minnow (*Pimephales promelas*) Under Toxicant-Induced Stress. *Can.J.Fish.Aquat.Sci.* 51(2):365-371.
- 14118 : Hattori, M., K. Senoo, S. Harada, Y. Ishizu, and M. Goto (1984) : The *Daphnia* Reproduction Test of Some Environmental Chemicals. *Aquat.Ecol.Chem./Seitai Kagaku* 6(4):23-27.

17665 : Sharma, H.A., J.T. Barber, H.E. Ensley, and M.A. Polito (1997) : A Comparison of the Toxicity and Metabolism of Phenol and Chlorinated Phenols by *Lemna gibba*, with Special Reference to 2,4,5-Trichlorophenol. Environ.Toxicol.Chem. 16(2):346-350.