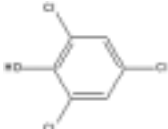


[4 6] 2,4,6-トリクロロフェノール

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：2,4,6-トリクロロフェノール (別の呼称：Omal) CAS 番号：88-06-2 分子式：C ₆ H ₃ Cl ₃ O 分子量：197.5 構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は淡褐色固体である¹⁾。

融点	69 ²⁾
沸点	246 ²⁾
比重	1.4901 ²⁾
蒸気圧	0.008mmHg(25 ³⁾) ³⁾
n-オクタノール/水分配係数 (log Pow)	3.69 ⁴⁾
解離定数	pKa=6.23(25 ⁵⁾) ⁵⁾
水溶性	800mg/L(25 ⁶⁾) ⁶⁾

(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。

分解性 好氣的：SS を含む河川水での半減期は 2.75 日(SS が 10g/L) ~ 70 日(SS が 1g/L) で平均 6.3 日との報告がある ⁷⁾ 。 嫌氣的：流動床バイリアクターでは 12 時間で 62%が減少したとの報告がある ⁸⁾ 。 非生物的： (OH ラジカルとの反応性)：大気中での反応速度を $6.1 \times 10^{-13} \text{cm}^3/\text{分子} \cdot \text{sec}$ (25 ⁹⁾)、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 26 日である ⁹⁾ 。 BOD から算出した分解度： 83% (試験期間：2 週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L) ¹⁰⁾ 生物濃縮係数(BCF)：250 ~ 310(Golden Orfe fish) ¹¹⁾ 、87 および 676(フラッグフィッシュ) ¹²⁾

(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、染料中間物、殺菌剤、防腐剤(木材防腐用)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

2,4,6-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 2,4,6-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	1.6
水	質	0.9
土	壌	75.7
底	質	21.8

(2) 各媒体中の存在量の概要

2,4,6-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 2,4,6-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	<0.15	<0.15			0.15	0/6	全国	1996	2
公共用水域・海水 μg/L	<0.15	<0.15			0.15	0/5	全国	1996	2
底質(公共用水域・淡水) μg/g	<9	<9			9	0/6	全国	1996	2
底質(公共用水域・海水) μg/g	<11	<11			9~11	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）

2,4,6-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0.15µg/L未満程度、同海水域でも同様に0.15µg/L未満程度となった。

表2.3 水質中の2,4,6-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	0.15µg/L 未満程度 (1996)	0.15µg/L 未満程度 (1996)
公共用水域・海水	0.15µg/L 未満程度 (1996)	0.15µg/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			3,500	<i>Selenastrum capricornutum</i>	EC ₅₀ GRO	4				13171
			10,000	<i>Chlorella vulgaris</i>	EC ₅₀ GRO	4				13171
甲殻類			650	<i>Daphnia magna</i>	NOEC REP	14				753
			690	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	2				12827
			1,210	<i>Palaemonetes pugio</i>	LC ₅₀ MOR	4				4894
			1,700	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	1				753
			3,340	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	2				12665
			3,900	<i>Daphnia pulex</i>	EC ₅₀ IMM	1				753
			3,950	<i>Palaemonetes pugio</i>	LC ₅₀ MOR	4				4894
			4,000	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	EC ₅₀ IMM	2				17097
			5,470	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	1				11946
			6,000	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	2				5184
			7,500	<i>Daphnia carinata</i>	EC ₅₀ IMM	1				753
			15,000	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	1				5184
魚類			320	<i>Lepomis macrochirus</i>	LC ₅₀ MOR	4				5590
			610	<i>Poecilia reticulata</i>	LC ₅₀ MOR	4				11344
			730	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	LC ₅₀ MOR	4				12665

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	
			750	<i>Jordanella floridae</i>	LOEC GRO	28				140
			1,400	<i>Platichthys flesus</i>	LC ₅₀ MOR	4				4071
			1,500	<i>Carassius auratus</i>	LC ₅₀ MOR	5 時間				13717
			2,207	<i>Jordanella floridae</i>	LC ₅₀ MOR	4				140
			2,300	<i>Fundulus heteroclitus</i>	LC ₅₀ MOR	2				3163
			4,000	<i>Carassius auratus</i>	LC ₅₀ MOR	5 時間				16365
			4,550	<i>Pimephales promelas</i>	LC ₅₀ MOR	4				15031
その他			850	<i>Dugesia japonica</i>	EC ₅₀ RGN	7				12513
			950	<i>Dugesia japonica</i>	LC ₅₀ MOR	7				12513
			1,200	<i>Xenopus laevis</i>	LC ₅₀ MOR	4				12665
			3,990	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	IC ₅₀ PGR	60 時間				10903
			5,500	<i>Aplexa hypnorum</i>	LC ₅₀ MOR	4				12665
			>13,500	<i>Tanytarsus dissimilis</i>	LC ₅₀ MOR	2				12665

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。

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、IC₅₀ (Median Inhibition Concentration) : 半数阻害濃度、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、NR (Not Reported) : 記載無し
 影響内容) GRO (Growth) : 生長(植物)、成長(動物)、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、PGR (Population Growth Rate) : 個体群増殖阻害、REP (Reproduction) : 繁殖、再生産、RGN (Regeneration) : 体の再生阻害

(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 *Selenastrum capricornutum* に対する生長阻害の 96 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 3,500 μg/L、甲殻類では *Ceriodaphnia dubia* に対する遊泳阻害の 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 4,000 μg/L、魚類では *Poecilia reticulata* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 610 μg/L、その他の生物ではアフリカツメガエル *Xenopus laevis* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 1,200 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小さい値 (魚類の 610 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 6.1 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 14 日間無影響濃度 (NOEC) が 650 μg/L、魚類では *Jordanella floridae* に対する 28 日間最小影響濃度 (LOEC) が 750 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もっとも小さい値 (甲殻類の 650 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 6.5 μg/L が得られた。

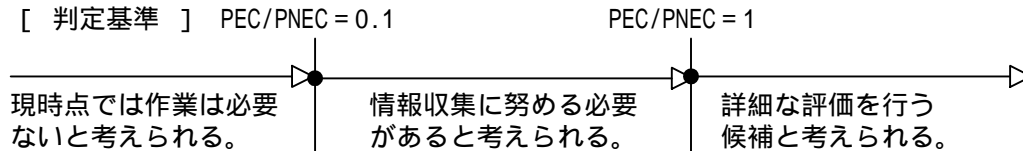
本物質の PNEC としては、魚類の急性毒性値をアセスメント係数 100 で除した 6.1 μg/L を採用する。

(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	0.15µg/L未満程度 (1996)	0.15µg/L未満程度 (1996)	6.1	<0.02
	公共用水域・海水域	0.15µg/L未満程度 (1996)	0.15µg/L未満程度 (1996)	µg/L	<0.02

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、平均濃度でみると淡水域・海水域共に 0.15 µg/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 0.15 µg/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 0.02 未満となり、現時点では作業は必要ないと考えられる。

4 . 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 化学工業日報社(2002) : 14102 の化学商品
- 2) Lide, D.R. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 76th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 1995-1996..p. 3-259. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 3) Bidleman TF, Renberg L; Chemosphere 14: 1475-1481 (1985). [HSDB]
- 4) Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995. 16. [HSDB]
- 5) Serjeant EP, Dempsey B; Ionisation constants of organic acids in aqueous solution. IUPAC Chem Data Ser No.23. NY,NY: Pergamon pp.989 (1979). [HSDB]
- 6) Budavari, S. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 1996. 1644. [HSDB]
- 7) Blades-Filmore LA et al; J Env Sci Health A17: 797-818 (1982). [HSDB]
- 8) Salkinoja-Salonen MS et al; pp.668-72 in Current Perspectives in Microbiology (1984). [HSDB]
- 9) Meylan WM, Howard PH; Chemosphere 26: 2293-99 (1993). [HSDB]
- 10) 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
- 11) Korte F et al; Chemosphere 1: 79-102 (1978).; Freitag D et al; Ecotox Environ Safety 6: 60-81 (1982). [HSDB]
- 12) Smith AD et al; Chemosphere 20: 379-86 (1990). [HSDB]

(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)
- 140: Smith, A.D., A. Bharath, C. Mallard, D. Orr, K. Smith, J.A. Sutton, J. Vukmanich, L.S. McCarty, and G.W. Ozburn (1991): The Acute and Chronic Toxicity of Ten Chlorinated Organic Compounds to the American Flagfish (*Jordanella floridae*). Arch. Environ. Contam. Toxicol. 20(1):94-102
- 753: Shigeoka, T., T. Yamagata, T. Minoda, and F. Yamauchi (1988): Acute Toxicity and Hatching Inhibition of Chlorophenols to Japanese Medaka, *Oryzias latipes* and Structure-Activity Relationships. J.Hyg.Chem./Eisei Kagaku 34(4):343-349.
- 3163: Burton, D.T., and D.J. Fisher (1990): Acute Toxicity of Cadmium, Copper, Zinc, Ammonia, 3,3'-Dichlorobenzidine, 2,6-Dichloro-4-nitroaniline, Methylene Chloride, and 2,4,6-Trichlorophenol. Bull.Environ.Contam.Toxicol. 44(5):776-783.
- 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 battagliai*) and Two Species of Benthic Flatfish, the Flounder (*Platichthys flesus*) and Sole (*Solea solea*). 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.
- 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.
- 10903: Schultz, T.W., and G.W. Riggan (1985): Predictive Correlations for the Toxicity of Alkyl- and Halogen-Substituted Phenols. Toxicol.Lett. 25:47-54.
- 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.
- 11946: Devillers, J., and P. Chambon (1986): Acute Toxicity and QSAR of Chlorophenols on *Daphnia magna*. Bull.Environ.Contam.Toxicol. 37(4):599-605.
- 12513: Yoshioka, Y., Y. Ose, and T. Sato (1986): Correlation of the Five Test Methods to Assess Chemical Toxicity and Relation to Physical Properties. Ecotoxicol.Environ.Saf. 12(1):15-21.

- 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.
- 12827 : Kukkonen, J., and A. Oikari (1987) : Effects of Aquatic Humus on Accumulation and Acute Toxicity of Some Organic Micropollutants. Sci.Total Environ. 62:399-402.
- 13171 : Shigeoka, T., Y. Sato, Y. Takeda, K. Yoshida, and F. Yamauchi (1988) : Acute Toxicity of Chlorophenols to Green Algae, *Selenastrum capricornutum* and *Chlorella vulgaris*, and Quantitative Structure-Activity Relationships. Environ.Toxicol.Chem. 7(10):847-854.
- 13717 : Kishino, T., and K. Kobayashi (1995) : Relation Between Toxicity and Accumulation of Chlorophenols at Various pH, and Their Absorption Mechanism in Fish. Water Res. 29(2):431-442.
- 15031 : Broderius, S.J., M.D. Kahl, and M.D. Hoglund (1995) : Use of Joint Toxic Response to Define the Primary Mode of Toxic Action for Diverse Industrial Organic Chemicals. Environ.Toxicol.Chem.14(9):1591-1605.
- 16365 : Kishino, T., and K. Kobayashi (1996) : Studies on the Mechanism of Toxicity of Chlorophenols Found in Fish Through Quantitative Structure-Activity Relationships. Water Res. 30(2):393-399.
- 17097 : Bitton, G., K. Rhodes, and B. Koopman (1996) : Ceriofast: An Acute Toxicity Test Based on *Ceriodaphnia dubia* Feeding Behavior. Environ.Toxicol.Chem. 15(2):123-125.