

[10] クロロ酢酸

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：クロロ酢酸

(別の呼称：クロロエタン酸、モノクロロ酢酸、MCA)

CAS 番号：79-11-8

化審法官報告示整理番号：2-1145

化管法政令番号：1-80

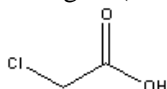
RTECS 番号：AF8575000

分子式：C₂H₃ClO₂

分子量：94.5

換算係数：1ppm=3.86mg/m³(気体、25℃)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は潮解性の結晶である¹⁾。水溶液は酢酸より強い酸である²⁾。

融点	63℃(α型) ³⁾ 、55～56℃(β型) ³⁾ 、50℃(γ型) ³⁾
沸点	189℃ ³⁾
密度	1.580g/cm ³ ³⁾
蒸気圧	20Pa (20℃) ⁴⁾
分配係数 (1-オクタノール/水) (logKow)	0.22 ⁵⁾
解離定数 (pKa)	2.87 ⁶⁾
水溶性 (水溶解度)	850g/L(20℃) ³⁾ 、6,140g/L(25℃) ⁷⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

クロロ酢酸の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性

好氣的分解 (分解性の良好な物質⁸⁾)

分解率：BOD 65%、TOC 99%、GC 100% (試験期間：3週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L)⁹⁾

嫌氣的分解

順化したメタン細菌により、5～280mg/Lのクロロ酢酸は2日間で86～100%分解されたとの報告がある¹⁰⁾。

化学分解性

OHラジカルとの反応性 (大気中)

反応速度定数：7.86×10⁻¹³cm³/(分子・sec) (25℃、AOPWIN¹¹⁾により計算)

半減期：3.4～34日 (OHラジカル濃度を3×10⁶～3×10⁵分子/cm³¹²⁾と仮定して計算)

加水分解性

半減期:960 日¹²⁾

生物濃縮性

生物濃縮係数(BCF) : 3.2 (BCFWIN¹³⁾ により計算)

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の国内生産量¹⁴⁾の推移を表 1.1 に示す。OECD に報告している生産量は 10,000t 以上、化学物質排出把握管理促進法（化管法）の製造・輸入量区分は 10,000t である。なお、塩素消毒の際、副生成物として非意図的に生成する。

表 1.1 クロロ酢酸の国内生産量 (t) の推移

年	平成 4 年	5 年	6 年	7 年	8 年	9 年	10 年	11 年	12 年	13 年
生産量 (t)	31,535	30,437	35,533	34,514	36,798	36,140	35,091	32,361	30,856	24,827

② 用途

本物質の用途は、カルボキシメチルセルロース原料、2,4-ジクロロフェノキシ酢酸原料、ブチルフタリルブチルグリコレート原料、キレート剤原料、界面活性剤原料、医薬品原料、香料原料及び農薬原料とされている¹⁵⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

化学物質排出把握管理促進法第一種指定化学物質（政令番号：80）として指定されているほか、有害大気汚染物質に該当する可能性がある物質及び水質汚濁に係る要調査項目として選定されている。

2. 暴露評価

生態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一般環境等からの暴露を評価することとし、データの信頼性を確認した上で安全側に立った評価の観点から原則として最大濃度により暴露評価を行った。

(1) 環境中への排出量

クロロ酢酸は化管法の第一種指定化学物質である。同法に基づき集計された平成13年度の届出排出量・移動量及び届出外排出量を表2.1に示す。

表 2.1 平成13年度PRTRデータによる排出量及び移動量

	届出						届出外（国による推計）				総排出量（kg/年）		
	排出量（kg/年）				移動量（kg/年）		排出量（kg/年）				届出 排出量	届出外 排出量	合計
	大気	公共用水域	土壌	埋立	下水道	事業所外	対象業種	非対象業種	家庭	移動体			
全排出・移動量	645	25409	0	0	3	15017	0				26054	0	26054

業種別届出量(割合)

化学工業	645 (100%)	6409 (25.2%)	0	0	3 (100%)	14807 (98.6%)
医薬品製造業	0	19000 (74.8%)	0	0	0	210 (1.4%)

総排出量の構成比 (%)	
届出	届出外
100	0

本物質の平成13年度における環境中への総排出量は26tと報告されており、すべてが届出排出量である。このうち0.6tが大気へ、25tが公共用水域へ排出されるとしており、大部分が公共用水域への排出である。その他に下水道への移動量が0.003t届け出られている。主な排出源は、大気への排出では化学工業（100%）であり、公共用水域への排出では医薬品製造業（74.8%）及び化学工業（25.2%）である。

(2) 媒体別分配割合の予測

本物質の環境中の媒体別分配割合をPRTRデータ活用環境リスク評価支援システム（改良版）を用いて予測した¹⁾。予測の対象地域は、平成13年度環境中への推定排出量が最大であった富山県（水域への排出量19t）とした。予測結果を表2.2に示す。

表 2.2 媒体別分配割合の予測結果

		分配割合 (%)
大	気	0.0
水	域	99.2
土	壌	0.0
底	質	0.8

(注) 環境中で各媒体別に最終的に分配される割合を質量比として示したもの。

(3) 各媒体中の存在量の概要

本物質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 2.3 に示す。

表 2.3 各媒体中の存在状況

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	<0.3	<0.3	<0.3	<0.3	0.3	0/65	全国 北海道、 長野県	2001	2
		<1	<1	<0.2	0.28	0.2~1	1/2		1984	3
公共用水域・海水	μg/L	<0.3	<0.3	<0.3	<0.3	0.3	0/11	全国 全国	2001	2
		<1	<1	<1	<1	1	0/5		1984	3
底質(公共用水域・淡水)	μg/g	<0.01	<0.01	<0.001	0.0026	0.001~ 0.01	1/2	北海道、 長野県	1984	3
底質(公共用水域・海水)	μg/g	<0.01	<0.01	<0.007	<0.01	0.007~ 0.01	0/5	全国	1984	3

(4) 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）

本物質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 2.4 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、海水域とも 0.3μg/L 未満となった。

表 2.4 公共用水域濃度

媒体	平均	最大値
水質		
公共用水域・淡水	0.3μg/L 未満(2001)	0.3μg/L 未満(2001) (過去には最大値として0.28μg/Lが検出されている(1984))
公共用水域・海水	0.3μg/L 未満(2001)	0.3μg/L 未満(2001)

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	生物分類	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	○		28	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₅₀ BMS	2	○			1)-2997
	○		<u>70</u>	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO	2	○			1)-2997
甲殻類		○	32,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	○			1)-847
	○		77,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	○			1)-846
	○		96,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	1			○	1)-847
魚類	○		>5,000	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	ニジマス	LC ₅₀ MOR	1			○	1)-638
	○		>5,000	<i>Lepomis macrochirus</i>	ブルーギル	LC ₅₀ MOR	1			○	1)-638
その他	○		16,000	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	IC ₅₀ POP	36 時間		○		1)-16142
	○		83,000	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	IC ₅₀ POP	9 時間		○		1)-16142
	○		106,000	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	IC ₅₀ POP	9 時間			○	1)-14980

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、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) : 半数影響 (阻害) 濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration) : 無影響濃度

影響内容) BMS (Biomass) : 生物量、GRO (Growth) : 生長 (植物)、成長 (動物)、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、POP (Population) : 増殖量、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速度法による 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 70 μg/L、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 77,000μg/L、その他の生物ではテトラヒメナ属 *Tetrahymena pyriformis* に対する増殖阻害の 36 時間半数影響濃度 (IC₅₀) が 16,000μg/L であった。急性毒性値について 2 生物群 (藻類及び甲殻類) 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 1000 を用いることとし、上記の毒性値のうち最も低い値 (藻類の 70μg/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 0.070 μg/L が得られた。

慢性毒性値については、甲殻類の *Daphnia magna* に対する繁殖の 21 日間無影響濃度 (NOEC)

が 32,000 $\mu\text{g/L}$ が得られた。慢性毒性値について 1 生物群（甲殻類）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、慢性毒性値による PNEC として 320 $\mu\text{g/L}$ 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、藻類の急性毒性値をアセスメント係数 1000 で除した 0.070 $\mu\text{g/L}$ を採用することとする。

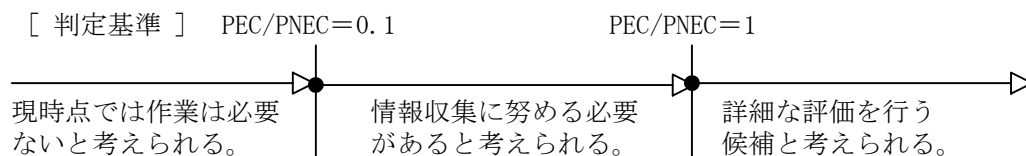
(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

媒体		平均濃度	最大値濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
水質	公共用水域・淡水	0.3 $\mu\text{g/L}$ 未満(2001)	0.3 $\mu\text{g/L}$ 未満(2001) (過去には最大値として0.28 $\mu\text{g/L}$ が検出されている(1984))	0.070 $\mu\text{g/L}$	<4.3
	公共用水域・海水	0.3 $\mu\text{g/L}$ 未満(2001)	0.3 $\mu\text{g/L}$ 未満(2001)		

注) : 1) 環境中濃度での () 内の数値は測定年を示す。

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、海水域ともに 0.3 $\mu\text{g/L}$ 未満であり、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、海水域ともに 0.3 $\mu\text{g/L}$ 未満であった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域、海水域ともに 4.3 未満となり、現時点では生態リスクの判定はできない。

本物質の国内生産量は約 25,000t であり、PRTR データに基づく届出排出量の大部分は公共用水域へ排出され、環境中では水域中に分配されると予測されている。PNEC 値は 0.070 $\mu\text{g/L}$ と低い値となったが、生態毒性に関する知見が限られる中で藻類の急性毒性値により設定されたものである。したがって、本物質については試験の実施等を通じて生態毒性に関する知見を充実させる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) 化学大辞典編集委員会 (1963) : 化学大辞典 (縮刷版)、3、共立出版、p.241.
- 2) 東京化学同人 (1989) : 化学大辞典.
- 3) BUDAVARI, S., ed. (1996) *The Merck Index*, 12th ed., Whitehouse Station, Merck & Co.
- 4) VERSCHUEREN, K., ed. (1996) *Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals*, 3rd ed., New York, Albany, Bonn, Boston, Detroit, London, Madrid, Melbourne, Mexico City, Paris, San Francisco, Singapore, Tokyo, Toronto, Van Nostrand Reinhold, pp.447-449.
- 5) HANSCH, C., LEO, A., and HOEKMAN, D. (1995) *Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants*, Washington DC, ACS Professional Reference Book, p.4
- 6) Serjeant, E.P., Dempsey B.; Ionisation Constants of Organic Acids in Aqueous Solution. International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). IUPAC Chemical Data Series No. 23, 1979. New York, New York: Pergamon Press, Inc. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 7) Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. 3rd ed., Volumes 1-26. New York, NY: John Wiley and Sons, 1978-1984.,p. V1 171-178. [HSDB]
- 8) 通産省公報 (1976.5.28)
- 9) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ、0072
- 10) IUCLID(International Uniform Chemical Information Data Base) Date Sheet, EU(1995). [既存化学物質安全性(ハザード)評価シート]
- 11) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v1.91
- 12) HOWARD, P.H., BOETHLING, R.S., JARVIS, W.F., MEYLAN, W.M., and MICHALENKO, E.M. ed. (1991) *Handbook of Environmental Degradation Rates*, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers, pp.xiv, 194-195.
- 13) U.S. Environmental Protection Agency, BCFWIN™ v2.15
- 14) 経済産業省 : 化学工業統計年報
- 15) (社)日本化学工業協会調査資料(1998). [既存化学物質安全性(ハザード)評価シート]

(2) 暴露評価

- 1) (独) 国立環境研究所 (2004) : 平成 15 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書
- 2) 環境省水環境部水環境管理課 (2002) : 平成 12 年度要調査項目測定結果
- 3) 環境庁環境保健部保健調査室 (1985) : 昭和 60 年版化学物質と環境

(3) 生態リスクの初期評価

- 1)- : U.S.EPA 「AQUIRE」
638 : Applegate, V.C., J.H. Howell, A.E. Hall Jr., and M.A. Smith (1957): Toxicity of 4,346 Chemicals to Larval Lampreys and Fishes. Spec.Sci.Rep.Fish.No.207, Fish Wildl.Serv., U.S.D.I., Washington, D.C. :157.

- 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.
- 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.
- 14980 : Sauvant, M.P., D. Pepin, C.A. Groliere, and J. Bohatier (1995): Effects of Organic and Inorganic Substances on the Cell Proliferation of L-929 Fibroblasts and *Tetrahymena pyriformis* GL Protozoa Used for Toxicological Bioassays. Bull.Environ.Contam.Toxicol. 55(2):171-178.
- 16142 : Sauvant, M.P., D. Pepin, J. Bohatier, and C.A. Groliere (1995): Microplate Technique for Screening and Assessing Cytotoxicity of Xenobiotics with *Tetrahymena pyriformis*. Ecotoxicol.Environ.Saf. 32(2):159-165.