

[5] ピクリン酸

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：ピクリン酸

(別の呼称：2,4,6-トリニトロフェノール)

CAS 番号：88-89-1

化審法官報告示整理番号：3-823

化管法政令番号：1-244

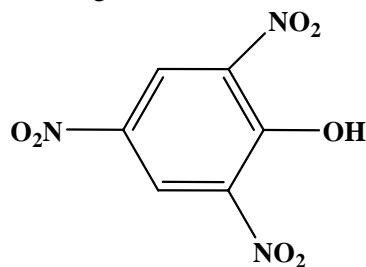
RTECS 番号：TJ7875000

分子式：C₆H₃N₃O₇

分子量：229.10

換算係数：1 ppm = 9.37 mg/m³(気体、25°C)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は輝黄色の平たい針状晶であり、水溶液は酸性を示す¹⁾。

融点	122.5°C ²⁾
沸点	300°C(760mmHg、爆発) ²⁾
密度	1.763g/cm ³ (20°C) ³⁾
蒸気圧	7.50×10 ⁻⁷ mmHg(=1.00×10 ⁻⁴ Pa) (25°C) ⁴⁾
分配係数(1-オクタノール/水)(log Kow)	1.33 ⁵⁾
解離定数(pKa)	0.38(25°C) ⁵⁾
水溶性	1.27×10 ⁴ mg/L(25°C) ⁵⁾

(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。

生物分解性

好氣的分解 (難分解性であると判断される物質⁶⁾)

分解率：BOD 23%、TOC0%、HPLC0%(試験期間：4週間、被験物質濃度：100 mg/L、活性汚泥濃度：30 mg/L)⁷⁾

化学分解性

OH ラジカルとの反応性 (大気中)

反応速度定数：0.14×10⁻¹²cm³/(分子・sec)(AOPWIN⁸⁾により計算)

半減期：38～380日 (OH ラジカル濃度を3×10⁶～3×10⁵分子/cm³⁹⁾と仮定し、1日は12時間として計算)

加水分解性

加水分解性の基をもたない¹⁰⁾。

生物濃縮性（高濃縮性ではないと判断される物質）⁶⁾

生物濃縮係数（BCF）：

<0.24(試験生物：コイ、試験期間：6週間、被験物質濃度：500 μ g/L)⁷⁾

<2.2(試験生物：コイ、試験期間：6週間、被験物質濃度：50 μ g/L)⁷⁾

土壌吸着性

土壌吸着定数（Koc）：1800（PCKOCWIN¹¹⁾により計算）

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の平成13年における製造(出荷)及び輸入量は100～1,000t未満である¹²⁾。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1,000tである。

② 用途

本物質の主な用途、排出源は合成原料（農薬（クロロピクリン）、染料）、花火とされている¹³⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

本物質は化学物質審査規制法第二種監視化学物質（通し番号：803）及び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：244）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として指定されている。

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水生生物の生息が可能な環境を保持すべき公共用水域における化学物質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評価を行っている。

(1) 環境中への排出量

ピクリン酸は化管法の第一種指定化学物質である。同法に基づき公表された、平成15年度の届出排出量¹⁾、届出外排出量対象業種²⁾、届出外排出量非対象業種・家庭・移動体³⁾から集計した排出量等を表2.1に示す。なお、届出外排出量非対象業種・家庭・移動体の推計はなされていなかった。

表 2.1 化管法に基づく排出量及び移動量（PRTR データ）の集計結果（平成 15 年度）

	届出				移動量 (kg/年)		届出外 (国による推計)				総排出量 (kg/年)		
	排出量 (kg/年)				下水道	廃棄物移動	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			対象業種	非対象業種	家庭	移動体			
全排出・移動量	0	6	0	0	0	11,110	0	—	—	—	6	0	6

業種別届出量 (割合)							総排出量の構成比(%)	
化学工業	0	6	0	0	0	11,110	届出	届出外
		(100%)				(100%)	100%	0%

本物質の平成15年度における環境中への総排出量は0.006tとなり、これは全て公共用水域への届出排出量であった。この他に廃棄物への移動量が11tであった。届出排出量の主な排出源は、化学工業（100%）であった。

(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表2.1に示した環境中への排出量と下水道への移動量を基に、USES3.0をベースに日本固有のパラメータを組み込んだMackay-Type Level III多媒体モデル⁴⁾を用いて予測した。予測の対象地域は、平成15年度環境中への推定排出量が最大であった岡山県（公共用水域の排出量0.0057t）とした。予測結果を表2.2に示す。

本物質の環境中への排出は水域のみであり、環境中の媒体別分配割合も水域が99.9%と予測された。

表 2.2 媒体別分配割合の予測結果

媒 体	分配割合 (%)
大 気	0.0
水 域	99.9
土 壌	0.0
底 質	0.1

(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。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 $\mu\text{g/L}$	<1	<1	<1	<1	1	0/2	神奈川、 長野	1980	5
公共用水域・海水 $\mu\text{g/L}$	<1	<1	<1	<1	1	0/1	神奈川	1980	5
底質(公共用水域・淡水) $\mu\text{g/g}$	<0.23	<0.23	<0.1	<0.23	0.1~0.23	0/2	神奈川、 長野	1980	5
底質(公共用水域・海水) $\mu\text{g/g}$	<0.21	<0.21	<0.21	<0.21	0.16~0.21	0/1	神奈川	1980	5

(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。評価に耐えるデータは得られなかった。

表 2.4 公共用水域濃度

水 域	平 均	最 大 値
淡 水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった
海 水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった

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

水生生物の生態リスクに関する初期評価を行った。

(1) 水生生物に対する毒性値の概要

本物質の水生生物に対する毒性値に関する知見を収集し、その信頼性を確認したものを生物群（藻類、甲殻類、魚類及びその他）ごとに整理すると表3.1のとおりとなった。

表 3.1 水生生物に対する毒性値の概要

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			文献 No.
								a	b	c	
藻類			28,000	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₁₀ GRO(AUG)	3	○			1)-2997
			240,000	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₁₀ GRO	3	○			1)-2997
	○		>500,000	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO	3	○			1)-2997
甲殻類		○	5,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	○			1)-847
	○		85,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	LC ₅₀ MOR	2	○			1)-5184
	○		90,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2		○		1)-846
	○		123,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	1		○		1)-846
魚類	○		109,600	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	ニジマス	LC ₅₀ MOR	4		○		1)-11079
	○		117,400	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	ニジマス	LC ₅₀ MOR	3		○		1)-11079
	○		130,000	<i>Cyprinodon variegatus</i>	シープスヘッドミノー	LC ₅₀ MOR	4			○	1)-10366
	○		130,000	<i>Cyprinodon variegatus</i>	シープスヘッドミノー	LC ₅₀ MOR	3			○	1)-10366
	○		130,000	<i>Cyprinodon variegatus</i>	シープスヘッドミノー	LC ₅₀ MOR	2			○	1)-10366
	○		130,000	<i>Cyprinodon variegatus</i>	シープスヘッドミノー	LC ₅₀ MOR	1			○	1)-10366
	○		134,300	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	ニジマス	LC ₅₀ MOR	2		○		1)-11079
	○		170,000	<i>Lepomis macrochirus</i>	ブルーギル	LC ₅₀ MOR	4			○	1)-5590
	○		193,000	<i>Lepomis macrochirus</i>	ブルーギル	LC ₅₀ MOR	1			○	1)-5590
	その他	○		27,900	<i>Crassostrea virginica</i>	バージニアガキ	EC ₅₀ shell deposition	6		○	
○			140,400	<i>Crassostrea virginica</i>	バージニアガキ	EC ₅₀ GRO	6		○		1)-11079
○			254,900	<i>Crassostrea virginica</i>	バージニアガキ	LC ₅₀ MOR	6		○		1)-11079

毒性値（太字）：PNEC算出の際に参照した知見として本文で言及したもの

毒性値（太字下線）：PNEC算出の根拠として採用されたもの

信頼性：本初期評価における信頼性ランク（a, bまでを採用）

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

エンドポイント

EC₁₀(10% Effective Concentration)：10%影響濃度、EC₅₀(Median Effective Concentration)：半数影響濃度、

LC₅₀(Median Lethal Concentration)：半数致死濃度、NOEC(No Observed Effect Concentration)：無影響濃度

影響内容

GRO (Growth)：生長（植物）、成長（動物）、IMM (Immobilization)：遊泳阻害、MOR (Mortality)：死亡、

REP (Reproduction)：繁殖、再生産、shell deposition：殻の成長

()内：試験結果の算出法

AUG (Area Under Growth Curve) : 生長曲線下の面積により求める方法 (面積法)、

RATE : 生長速度より求める方法 (速度法)

*1 毒性値の算出には 0-72 時間の結果を用いた

信頼性が認められた知見のうち、生物群ごとに急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて最も小さい値を予測無影響濃度(PNEC)導出のために採用した。その知見の概要は以下のとおりである。

1) 藻類

Kühn ら¹⁾⁻²⁹⁹⁷は、ドイツ工業規格 (DIN 38 412, Part9, 1988) に準拠し、緑藻類*Pseudokirchneriella subcapitata* (旧*Selenastrum capricornutum*) を用いて、藻類の生長阻害試験を止水式で実施した。試験濃度は 4.0~500 mg/Lの間に設定された。速度法により96時間半数影響濃度 (EC₅₀) は500,000 µg/L超とされた。

2) 甲殻類

LeBlanc¹⁾⁻⁵¹⁸⁴は米国EPA の試験方法 (EPA, 660/3-75-009, 1975)に準拠し、オオミジンコ*Daphnia magna*の急性毒性試験を止水式で実施した。設定濃度に基づく48時間半数致死濃度 (LC₅₀) を求めた結果、85,000 µg/Lであった。

Kühnら¹⁾⁻⁸⁴⁷は、ドイツ連邦環境庁(Federal Environmental Agency)が推奨する試験法 (1984) に準拠して、オオミジンコ*Daphnia magna*の繁殖阻害試験を半止水式(週3回換水)で実施した。設定試験濃度は 630~80,000 µg/L (公比2)であり、試験溶液の調製には人工飼育水 (ドイツ工業規格, 1982)が用いられた。設定濃度に基づく21日間無影響濃度(NOEC)は5,000µg/Lであった。

3) 魚類

Goodfellowら¹⁾⁻¹¹⁰⁷⁹はAPHA の標準法 (1981)に準拠して、ニジマス*Oncorhynchus mykiss*の急性毒性試験を半止水式 (24時間毎換水) で実施した。設定試験濃度は0、75、85、95、105、115、125mg/Lに設定された。実測濃度は設定濃度の2%以内の減少率であり、設定濃度に基づく96時間半数致死濃度 (LC₅₀) は109,600 µg/L であった。

4) その他

Goodfellowら¹⁾⁻¹¹⁰⁷⁹はAPHAの標準法 (1981)に準拠して、バージニアガキ*Crassostrea virginica*の急性毒性試験を半止水式 (24時間毎換水) で実施した。設定試験濃度は0、25、50、100、150、200 mg/Lに設定された。設定濃度に基づく144時間半数影響濃度 (EC₅₀) は140,400 µg/Lであった。

(2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性及び慢性毒性のそれぞれについて、上記本文で示した毒性値に情報量に応じたアセスメント係数を適用し、予測無影響濃度 (PNEC) を求めた。

急性毒性値

藻類	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	生長阻害；96時間 EC ₅₀	500,000 µg/L超
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	48時間 LC ₅₀	85,000 µg/L
魚類	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96時間 LC ₅₀	109,600 µg/L
その他	<i>Crassostrea virginica</i>	144時間 EC ₅₀	140,400 µg/L

アセスメント係数：100 [3生物群（藻類、甲殻類及び魚類）及びその他の生物について信頼できる知見が得られたため]

これらの毒性値のうちその他の生物を除いた最も小さい値（甲殻類の85,000 µg/L）をアセスメント係数100で除することにより、急性毒性値に基づくPNEC値850 µg/Lが得られた。

慢性毒性値

甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	繁殖阻害；21日間 NOEC	5,000 µg/L
-----	----------------------	----------------	------------

アセスメント係数：100 [1生物群（甲殻類）の信頼できる知見が得られたため]

毒性値をアセスメント係数100で除することにより、慢性毒性値に基づくPNEC値50 µg/Lが得られた。

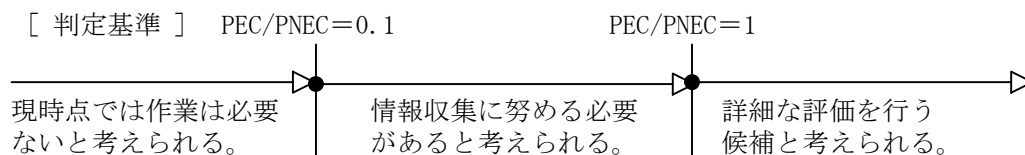
本物質のPNECとしては、甲殻類の慢性毒性値から得られた50 µg/Lを採用する。

(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

水質	平均濃度	最大濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
公共用水域・淡水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった	50 µg/L	—
公共用水域・海水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった		—

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。



現時点では評価に耐える十分なデータが得られなかったため、生態リスク評価の判定はできない。本物質の平成13年度における製造（出荷）及び輸入量は100～1,000t未満の範囲であり、平成15年度PRTRデータによれば水域への届出排出量は0.006tであった。したがって、本物質については生態リスク評価に向けて環境中の存在状況を優先的に把握する必要性は低いと考えられる。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 講談社サイエンティフィック (1985) : 有機化合物辞典 : 625.
- 2) Lide, D.R. ed. (2002-2003): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 83rd ed., Boca Raton, London, New York, Washington D.C., CRC Press: 3-260.
- 3) Mackay, D., Shiu, W.Y., and Ma, K.C. ed. (1995): Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Vol. IV, Oxygen, Nitrogen, and Sulfur Containing Compounds, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Press: 399-400.
- 4) Gorontzy, T. et al. (1994) [U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.41.]
- 5) Howard, P.H. and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 101.
- 6) 経済産業公報 (2003.1.17)
- 7) 独立行政法人製品評価技術基盤機構 : 既存化学物質安全性点検データ : (http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html , 2005.6.01 現在)
- 8) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.91.
- 9) 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 D.C., Lewis Publishers,: xiv.
- 10) Lyman, W.J., Reehl, W.F., and Rosenblatt D.H. (1990): Handbook of chemical property estimation methods: environmental behavior of organic compounds. American Chemical Society, Washington, D.C., USA. (Hazardous Substances Data Bank <http://toxnet.nlm.nih.gov/> , 2005.5.12 現在)
- 11) U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWIN™ v.1.66.
- 12) 経済産業省 (2003) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成 13 年度実績) の確報値報告について.
- 13) 環境省(2005) : PRTR データを読み解くための市民ガイドブック 化学物質による環境リスクを減らすために 平成 15 年度集計結果から

(2) 暴露評価

- 1) 経済産業省製造産業局化学物質管理課、環境省環境保健部環境安全課(2005) : 平成 15 年度特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律 (化学物質排出把握管理促進法) 第 1 1 条に基づき開示する個別事業所データ
- 2) 経済産業省製造産業局化学物質管理課、環境省環境保健部環境安全課(2005) : 平成 15 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法等の詳細 資料 1
(<http://www.env.go.jp/chemi/prtr/result/todokedegaiH15/syosai/1susogiri-1.pdf>)
- 3) 製品評価技術基盤機構 : 届出外排出量の推計値の対象化学物質別集計結果 算出事項 (対象業種・非対象業種・家庭・移動体) 別の集計 表 3-2 都道府県別
(<http://www.prtr.nite.go.jp/prtr/csv/2003a/2003a3-2.csv>)
- 4) (独)国立環境研究所(2004) : 平成 15 年度新規化学物質挙動追跡調査報告書

5) 環境庁環境保健部保健調査室 (1981) : 昭和 56 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」

- 846 : Kühn, 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 : Kühn, 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 : Kühn, 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.
- 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.
- 11079 : Goodfellow, W.L.J., D.T. Burton, W.C. Graves, L.W. Hall Jr., and K.R. Cooper (1983): Acute Toxicity of Picric Acid and Picramic Acid to Rainbow Trout, *Salmo gairdneri*, and American Oyster, *Crassostrea virginica*. Water Resour. Bull. 19(4):641-648.