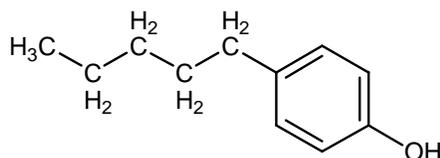


[9] 4-*n*-ペンチルフェノール

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： 4-*n*-ペンチルフェノール
 CAS 番号：14938-35-3
 化審法官報公示整理番号：3-503 (モノアルキル(C=3~9)フェノールとして)
 化管法政令番号：
 RTECS 番号：SM6750000
 分子式： C₁₁H₁₆O
 分子量： 164.24
 換算係数：1 ppm = 6.72 mg/m³ (気体、25)
 構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は薄い黄色透明液体である¹⁾。

融点	23 ^{2),3)}
沸点	250.5 (760 mmHg) ^{2),3)}
密度	0.960 g/cm ³ (20) ¹⁾
蒸気圧	0.011 mmHg (=1.5 Pa) (25 、MPBPWIN ⁴⁾ により計算)
分配係数 (1-オクタノール/水) (log Kow)	4.06 ^{3),5)}
解離定数 (pKa)	
水溶性 (水溶解度)	85 mg/L (25 、WSKOWWIN ⁶⁾ により予測)

(3) 環境運命に関する基本的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

化学分解性	<p><u>OH ラジカルとの反応性 (大気中)</u> 反応速度定数：46 × 10⁻¹² cm³/(分子・sec) (AOPWIN⁷⁾ により計算) 半減期：1.4 時間 ~ 14 時間 (OH ラジカル濃度を 3 × 10⁶ ~ 3 × 10⁵ 分子/cm³⁸⁾ と仮定し計算)</p>
生物濃縮性	<p>生物濃縮係数(BCF)：270 (BCFWIN⁹⁾ により計算)</p>
土壌吸着性	<p>土壌吸着定数(Koc)：5300 (PCKOCWIN¹⁰⁾ により計算)</p>

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

「化学物質の製造・輸入に関する実態調査」によると、モノアルキル(C=3~9)フェノールとしての平成16年度における製造(出荷)及び輸入量は10,000~100,000t/年未満である¹¹⁾。

用途

アルキル基が直鎖である本物質の主な用途に関する情報は現段階では得られていない。分岐型である4-*tert*-ペンチルフェノールの主な用途は、精密化学品(染料中間物・ゴム薬品・界面活性剤他)の原料、写真感光材料の原料とされている¹²⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

アルキルフェノール(C4~C9)は水環境保全に向けた取組のための要調査項目に選定されている。

2. ばく露評価

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ばく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

本物質は化学物質排出把握管理促進法（化管法）第一種指定化学物質ではないため、排出量及び移動量は得られなかった。

(2) 媒体別分配割合の予測

化管法に基づく排出量及び移動量が得られなかったため、Mackay-Type Level III Fugacity Model により媒体別分配割合の予測を行った。予測結果を表 2.1 に示す。

表 2.1 Level III Fugacity Model による媒体別分配割合（％）

排出媒体	大気	水域	土壌	大気/水域/土壌
排出速度（kg/時間）	1,000	1,000	1,000	1,000（各々）
大気	3.1	0.1	0.0	0.0
水域	1.3	55.9	0.2	0.4
土壌	94.8	2.5	99.7	99.3
底質	0.9	41.5	0.1	0.3

注：数値は、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の

(3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の環境中等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 2.2 に示す。

表 2.2 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	測定年度	文献	
公共用水域・淡水	μg/L	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0.01	1/130	全国	2001	2)
		<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0/130	全国	2000	3)
		<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0/130	全国	1999	4)
		<0.01	<0.01	<0.01	0.02	0.01	2/12	全国	1999	5)
		<0.0062	<0.0062	<0.0062	<0.0062	0.0062	0/104	千葉県、 神奈川県、 愛知県	1999	8)
		<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0/215	全国	1998	6)
		<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0/5	全国	1998	7)
公共用水域・海水	μg/L	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0/17	全国	2001	2)
		<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0/17	全国	2000	3)

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	測定年度	文献
底質(公共用水域・淡水) $\mu\text{g/g}$	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0/17	全国	1999	4)
	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0/48	全国	1998	6)
	<0.0015	<0.0015	<0.0015	<0.0015	0.0015	0/37	全国	2001	2)
	<0.0015	<0.0015	<0.0015	<0.0015	0.0015	0/37	全国	2000	3)
	<0.0015	<0.0015	<0.0015	<0.0015	0.0015	0/36	全国	1999	4)
	<0.001	<0.001	<0.001	<0.001	0.001	0/11	全国	1999	5)
	<0.00062	<0.00062	<0.00062	<0.00062	0.00062	0/30	千葉県、 神奈川県、 愛知県	1999	8)
	<0.005	<0.005	<0.005	<0.005	0.005	0/133	全国	1998	6)
底質(公共用水域・海水) $\mu\text{g/g}$	<0.001	<0.001	<0.001	<0.001	0.001	0/5	全国	1998	7)
	<0.0015	<0.0015	<0.0015	<0.0015	0.0015	0/11	全国	2001	2)
	<0.0015	<0.0015	<0.0015	<0.0015	0.0015	0/11	全国	2000	3)
	<0.0015	<0.0015	<0.0015	<0.0015	0.0015	0/12	全国	1999	4)
	<0.005	<0.005	<0.005	<0.005	0.005	0/19	全国	1998	6)
魚類(公共用水域・淡水) $\mu\text{g/g}$	<0.00064	<0.00064	<0.00064	<0.00064	0.00064	0/3	千葉県、 神奈川県、 愛知県	1999	8)
	<0.0015	<0.0015	<0.0015	<0.0015	0.0015	0/123	全国	1998	6)
魚類(公共用水域・海水) $\mu\text{g/g}$	<0.0015	<0.0015	<0.0015	<0.0015	0.0015	0/17	全国	1998	6)
貝類(公共用水域・淡水) $\mu\text{g/g}$	<0.0015	<0.0015	<0.0015	<0.0015	0.0015	0/1	三重県	1998	6)

(4) 水生生物に対するばく露の推定(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ばく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 0.02 $\mu\text{g/L}$ 程度、海水域では 0.01 $\mu\text{g/L}$ 未満程度となった。

表 2.3 公共用水域濃度

水 域	平 均	最 大 値
淡 水	0.01 $\mu\text{g/L}$ 未満 (2001)	0.02 $\mu\text{g/L}$ 程度 (1999)
海 水	0.01 $\mu\text{g/L}$ 未満程度 (2001)	0.01 $\mu\text{g/L}$ 未満程度 (2001)

注: 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、その信頼性及び採用の可能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。なお、ここでは内分泌かく乱作用に関する知見については収集していない。

表 3.1 水生生物に対する毒性値の概要

生物群	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	ばく露期 間[日]	試験の 信頼性	採用の 可能性	文献 No.
藻類			274	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)	3	B ^{*3}	B ^{*3}	3) ^{*2}
			500	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(AUG)	3	B ^{*3}	B ^{*1,3}	2)
			980	<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)	3	A	B	1)-14484
			1,280 [*]	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(AUG)	3	B ^{*3}	B ^{*1,3}	2)
			2,190	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(RATE)	3	B ^{*3}	B ^{*3}	3) ^{*2}
			2,600	<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(RATE)	3	A	B	1)-14484
甲殻類			135	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	B ^{*3}	B ^{*3}	2)
			899	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	B ^{*3}	B ^{*3}	2)
			1,330	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	B	B	1)-19263
魚類			1,250	<i>Poecilia reticulata</i>	グッピー	LC ₅₀ MOR	4	B	A	1)-19263
			1,440	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4	B ^{*3}	B ^{*3}	2)
その他			3,710	<i>Lymnaea stagnalis</i>	モノアラガイ科	LC ₅₀ MOR	4	B	B	1)-19263

毒性値(太字): PNEC 導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 導出の根拠として採用されたもの

試験の信頼性: 本初期評価における信頼性ランク

A: 試験は信頼できる、B: 試験は条件付きで信頼できる、C: 試験の信頼性は低い、D: 信頼性の判定不可

E: 信頼性は低くないと考えられるが、原著にあたって確認したものではない

採用の可能性: PNEC 導出への採用の可能性ランク

A: 毒性値は採用できる、B: 毒性値は条件付きで採用できる、C: 毒性値は採用できない

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、

NOEC (No Observed Effect Concentration): 無影響濃度

影響内容

GRO (Growth): 生長、IMM (Immobilization): 遊泳阻害、MOR (Mortality): 死亡、REP (Reproduction): 繁殖、再生産

() 内: 毒性値の算出方法

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 原則として速度法から求めた値を採用しているため採用の可能性は「B」とし、PNEC 導出の根拠としては用いない

*2 文献2)をもとに、試験時の実測濃度(幾何平均値)を用いて速度法により0-72時間の毒性値を再計算したものを掲載

*3 界面活性作用のある助剤を用いていたため、試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした

評価の結果、採用可能とされた知見のうち、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毒性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

環境省²⁾は OECD テストガイドライン No.201 (1984) に準拠し、緑藻類 *Pseudokirchneriella subcapitata* (旧名 *Selenastrum capricornutum*) の生長阻害試験を GLP 試験として実施した。設定試験濃度は 0、0.050、0.110、0.230、0.500、1.08、2.30、5.00 mg/L (公比約 2.2) であった。試験溶液は、ジメチルホルムアミド (DMF) 25 mg/L と界面活性作用のある硬化ひまし油 (HCO-40) 25 mg/L を助剤として調製した。被験物質の実測濃度は試験終了時において設定濃度の 26~105% であり、毒性値の算出には実測濃度 (試験開始時と終了時の幾何平均) が用いられた。速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は 2,190 µg/L、72 時間無影響濃度 (NOEC) は 274 µg/L であった³⁾。なお、界面活性作用のある助剤を用いていたため、試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした。また、面積法による毒性値のなかにはさらに低いものもあったが、本初期評価では原則として生長速度から求めた値を採用している。

2) 甲殻類

環境省²⁾は OECD テストガイドライン No.202 (1984) に準拠し、オオミジンコ *Daphnia magna* の急性遊泳阻害試験を GLP 試験として実施した。試験は止水式 (テフロンシート被覆) で行われ、設定試験濃度は 0、0.200、0.420、0.890、1.90、4.00 mg/L (公比約 2.1) であった。試験溶液の調製には、試験用水として Elendt M4 飼育水が、助剤としてジメチルホルムアミド (DMF) 20mg/L と界面活性作用のある硬化ひまし油 (HCO-40) 20mg/L が用いられた。被験物質の実測濃度は試験終了時においても設定濃度の 89~97% を維持しており、毒性値の算出には設定濃度が用いられた。48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は 899 µg/L であった。なお、界面活性作用のある助剤を用いていたため、試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした。

また、環境省²⁾は OECD テストガイドライン No.211 (1998) に準拠し、オオミジンコ *Daphnia magna* の繁殖試験を GLP 試験として実施した。試験は半止水式 (テフロンシート被覆、毎日換水) で行われ、設定試験濃度は 0、0.0200、0.0600、0.150、0.430、1.20 mg/L (公比約 2.8) であった。試験溶液の調製には、試験用水として Elendt M4 飼育水 (硬度約 250 mg/L、CaCO₃換算) が、助剤としてジメチルホルムアミド (DMF) 6 mg/L と界面活性作用のある硬化ひまし油 (HCO-60) 6 mg/L が用いられた。被験物質の実測濃度は、換水前において設定濃度の 44~97% であり、毒性値の算出には実測濃度 (時間加重平均) が用いられた。繁殖阻害に関する 21 日間無影響濃度 (NOEC) は 135 µg/L であった。なお、界面活性作用のある助剤を用いていたため、試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした。

3) 魚類

Ramos ら¹⁾⁻¹⁹²⁶³は OECD テストガイドライン No. 203 (1992) に準拠し、グッピー *Poecilia reticulata* の急性毒性試験を実施した。試験は半止水式 (24 時間毎換水) で行われ、設定試験濃度区は対照区+5 濃度区 (公比 2) であった。試験溶液の調製には、試験用水として銅を含まな

い水道水が、助剤としてイソプロパノール 0.5 mL/L が用いられた。実測濃度に基づく 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) は 1,250 µg/L であった。

4) その他

Ramos ら¹⁾⁻¹⁹²⁶³ は OECD テストガイドライン No.203 (1992) に準拠し、モノアラガイ科 *Lymnaea stagnalis* の急性毒性試験を実施した。試験は半止水式 (24 時間毎換水) で行われ、設定試験濃度区は対照区 + 5 濃度区 (公比 2) であった。試験用水には銅を含まない水道水が用いられた。実測濃度に基づく 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) は 3,710 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>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	生長阻害 ; 72 時間 EC ₅₀	2,190 µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	遊泳阻害 ; 48 時間 EC ₅₀	899 µg/L
魚類	<i>Poecilia reticulata</i>	96 時間 LC ₅₀	1,250 µg/L
その他	<i>Lymnaea stagnalis</i>	96 時間 LC ₅₀	3,710 µg/L

アセスメント係数 : 100 [3 生物群 (藻類、甲殻類、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 899 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 9.0 µg/L が得られた。

慢性毒性値

藻類	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	生長阻害 ; 72 時間 NOEC	274 µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	繁殖阻害 ; 21 日間 NOEC	135 µg/L

アセスメント係数 100 : [2 生物群 (藻類及び甲殻類) の信頼できる知見が得られたため]

2 つの毒性値の小さい方の値 (甲殻類の 135 µg/L) 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 1.4 µg/L が得られた。

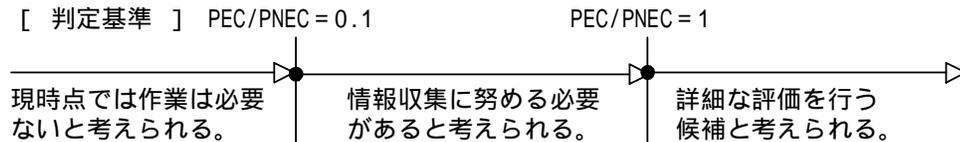
本物質の PNEC としては甲殻類の慢性毒性値から得られた 1.4 µg/L を採用する。

(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	0.01 μg/L未満 (2001)	0.02 μg/L程度 (1999)	1.4 μg/L	0.01
公共用水域・海水	0.01 μg/L未満程度 (2001)	0.01 μg/L未満程度 (2001)		< 0.007

注：1) 水質中濃度の () 内の数値は測定年度を示す
 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で 0.01 μg/L 未満、海水域では 0.01 μg/L 未満程度であった。安全側の評価値として設定された予測環境中濃度 (PEC) は、淡水域で 0.02 μg/L、海水域では 0.01 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、淡水域で 0.01、海水域では 0.007 未満となるため、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) 東京化成工業(株)(2000) : 化学物質等安全データシート 4-*n*-アミルフェノール 作成・改定日 : 2000.11.13.
- 2) Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- 3) 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: 908.
- 4) U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.1.42.
- 5) Hansch, C. et al. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book: 90.
- 6) U.S. Environmental Protection Agency, WSKOWWIN™ v.1.41.
- 7) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.92.
- 8) Howard, P.H. et al. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xiv.
- 9) U.S. Environmental Protection Agency, BCFWIN™ v.2.17.
- 10) U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWIN™ v.1.66.
- 11) 経済産業省(2007) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成 16 年度実績) の確報値
(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/jittaihou/kakuhou18.html, 2007.4.6 現在)
- 12) 丸善石油化学 : 製品情報 パラターシャリーアミルフェノール (PTAP) .
(http://www.chemiway.co.jp/data/new04_c.html, 2008.3.4 現在)

(2) ばく露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPI Suite™ v.3.20.
- 2) 環境省水環境部企画課(2002) : 平成 13 年度水環境中の内分泌攪乱化学物質(いわゆる環境ホルモン)実態調査結果の概要.
- 3) 環境省水環境部水環境管理課(2001) : 平成 12 年度水環境中の内分泌攪乱化学物質(いわゆる環境ホルモン)実態調査結果.
- 4) 環境庁水質保全局水質管理課(2000) : 平成 11 年度水環境中の内分泌攪乱化学物質(いわゆる環境ホルモン)実態調査結果.
- 5) 建設省河川局、建設省都市局下水道部(2000):平成 11 年度水環境における内分泌攪乱化学物質に関する実態調査結果.
- 6) 環境庁水質保全局水質管理課(1999) : 水環境中の内分泌攪乱化学物質(いわゆる環境ホルモン)実態調査.
- 7) 建設省河川局、建設省都市局(1999):平成 10 年度水環境における内分泌攪乱化学物質に関する実態調査結果.

- 8) 環境庁環境保健部環境安全課(2000)：平成 11 年度環境負荷量調査の結果について.

(3) 生態リスクの初期評価

1) U.S.EPA 「AQUIRE」

14484 : Ramos, E.U., W.H.J. Vaes, P. Mayer, and J.L.M. Hermens (1999): Algal Growth Inhibition of *Chlorella pyrenoidosa* by Polar Narcotic Pollutants: Toxic Cell Concentrations and QSAR Modeling. *Aquat.Toxicol.* 46(1):1-10.

19263 : Ramos, E.U., C. Vermeer, W.H.J. Vaes, and J.L.M. Hermens (1998): Acute Toxicity of Polar Narcotics to Three Aquatic Species (*Daphnia magna*, *Poecilia reticulata* and *Lymnaea stagnalis*) and Its Relation to Hydrophobicity. *Chemosphere* 37(4):633-650.

2) 環境省(2001)：平成 12 年度 生態影響試験

3) (独)国立環境研究所(2007)：平成 18 年度 化学物質環境リスク評価検討調査(第 7 次とりまとめ等に係る調査) 報告書