

[4] 2,2,2-トリクロロエタン-1,1-ジオール

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：2,2,2-トリクロロエタン-1,1-ジオール

(別の呼称：抱水クロラール)

CAS 番号：302-17-0

化審法官報公示整理番号：

化管法政令番号：

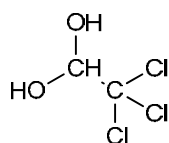
RTECS 番号：FM8750000

分子式：C₂H₃Cl₃O₂

分子量：165.40

換算係数：1 ppm = 6.76 mg/m³ (気体、25°C)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色透明の結晶である¹⁾。

融点	52°C ²⁾ 、57°C ^{3), 5)}
沸点	96°C(分解) ²⁾ 、98°C ^{3), 5), 6)}
密度	1.9081 g/cm ³ (20°C) ²⁾ 、1.91 g/cm ^{3 3)}
蒸気圧	15.0 mmHg (=2.0×10 ³ Pa)(25°C) ⁵⁾ 、 35 mmHg (=4.7×10 ³ Pa)(20°C) ⁶⁾
分配係数(1-オクタノール/水) (log Kow)	0.99 ^{4), 5)}
解離定数(pKa)	
水溶性(水溶解度)	9.31×10 ⁶ mg/L (38°C) ⁵⁾ 、自由混和 ^{3), 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。

生物分解性

好氣的分解

生分解性データは、得られなかった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：1.9×10⁻¹² cm³/(分子・sec) (AOPWIN⁸⁾により計算)

半減期：2.8～28 日 (OH ラジカル濃度を 3×10⁶～3×10⁵ 分子/cm^{3 9)}と仮定し計算)

加水分解性

高 pH で加水分解し、クロロホルムを生成する¹⁰⁾

生物濃縮性

生物濃縮係数(BCF) : 3.2 (BCFBAF¹¹⁾により計算)

土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc) : 1 (KOCWIN¹²⁾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 12～21 年における生産量は、約 5 t/年とされている¹³⁾。

本物質は、塩素消毒の際に塩素とフミン酸の反応でできる副生成物の一つである¹⁴⁾。また、本物質は、トリクロロアセトアルデヒドの水和により生成する。

② 用途

本物質の主な用途は、医薬品原料とされている¹⁵⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

本物質は水道水質管理目標設定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。

なお、本物質はトリクロロアセトアルデヒドの水和により生成する。トリクロロアセトアルデヒドは化管法の対象物質見直し前においては第一種指定化学物質であった。同法に基づき公表された、平成21年度の届出排出量、届出外排出量対象業種・非対象業種・家庭・移動体から集計した排出量等を表 2.1 に示す。なお、届出外排出量対象業種・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 21 年度）
（トリクロロアセトアルデヒド）

	届出						届出外（国による推計）				総排出量（kg/年）		
	排出量（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	廃棄物移動	対象業種	非対象業種	家庭	移動体			
全排出・移動量	0	1,500	0	0	0	0	-	-	-	-	1,500	-	1,500
業種等別排出量(割合)											総排出量の構成比(%)		
化学工業	0	1,500 (100%)	0	0	0	0					届出	届出外	
											100%	-	

トリクロロアセトアルデヒドの平成21年度における環境中への総排出量は1.5tとなり、すべて届出排出量であった。届出排出量のすべてが公共用水域へ排出されるとしており、公共用水域への排出量すべてが海域へ排出されるとしている。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

化管法に基づく届出排出量の排出先は、公共用水域の海域のみであったため、Mackay-Type Level III Fugacity Model¹⁾により媒体別分配割合の予測を行った。結果を表 2.2 に示す。

表 2.2 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	6.5	0.0	0.3	1.3
水域	45.0	99.7	43.5	59.0
土壌	48.5	0.1	56.1	39.6
底質	0.1	0.2	0.1	0.1

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

(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 2.3 に示す。また、表流水、湖沼水等を原水とする水道原水の調査結果から集計した結果を表 2.4 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	測定年度	文献
公共用水域・淡水 $\mu\text{g/L}$	<1	<1	<1	<1	1	0/2	北海道、 長野県	1986	2)
公共用水域・海水 $\mu\text{g/L}$	<1	<1	<1	<1	1	0/7	北海道、 兵庫県、 広島県	1986	2)
底質(公共用水域・淡水) $\mu\text{g/g}$	<0.006	<0.006	<0.006	<0.006	0.006	0/1	長野県	1986	2)
底質(公共用水域・海水) $\mu\text{g/g}$	<0.006	<0.006	<0.006	<0.006	0.006	0/6	兵庫県、 広島県	1986	2)

表 2.4 各媒体中の存在状況（水道原水の調査結果）

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 ^{a)} $\mu\text{g/L}$	<3	<3	<1	2	1~3	2/100	全国	2010	3)
	<4	<4	<1	2	1~4	2/109	全国	2009	4)
	<10	<10	<1	3	1~10	3/106	全国	2008	5)
	<10	<10	<1	4	1~10	3/107	全国	2007	6)
	<3	<3	<1	4	1~3	3/99	全国	2006	7)
	<3	<3	<1	4	1~3	4/106	全国	2005	8)
	<30	<30	<1	5	1~30	5/108	全国	2004	9)
	公共用水域・海水 $\mu\text{g/L}$								

注：a) 水道原水のうち、「表流水」、「湖沼水」、「ダム直接」又は「ダム放流」のデータのみを集計対象とした

(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 2.5 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）を設定できるデータは、得られなかった。なお、表流水、湖沼水又はダム湖水を原水とする水道原水の測定結果を PEC に用いると、淡水域では最大で $3 \mu\text{g/L}$ となった。

表 2.5 公共用水域濃度

水域	平均	最大値
淡水	データは得られなかった	データは得られなかった
海水	データは得られなかった	データは得られなかった

注：1) () 内の数値は測定年度を示す

2) 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。

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/和名	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		○	14,700	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)	3	A	A	2)
	○		>95,400	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(RATE)	3	A	A	2)
甲殻類		○	5,700	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC GRO	21	A	C	2)
		○	11,500	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	A	A	2)
		○	>97,700 *1	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	A	A	2)
		○	510,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ *2 IMM	1	B	B	1)-5718
魚類		○	>95,900 *1	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4	A	A	2)
		○	1,720,000	<i>Leuciscus idus melanotus</i>	コイ科	LC ₅₀ MOR	2	D	C	1)-547
その他			—	—	—	—	—	—	—	—

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、TT (Toxicity Threshold)：増殖阻害閾値

影響内容

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

POP (Population Changes)：個体群の変化、REP (Reproduction)：繁殖、再生産

エンドポイント/影響内容の欄の（ ）：毒性値の算出方法

RATE：生長速度より求める方法（速度法）

*1 限度試験（毒性値を求めるのではなく、定められた濃度において毒性の有無を調べる試験）より得られた値

*2 原著では「LC₅₀」とされているが、観察された影響内容が「遊泳阻害」のため、ここでは「EC₅₀」として取りまとめた

評価の結果、採用可能とされた知見のうち、急性毒性及び慢性毒性のそれぞれについて、生物群ごとに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

環境省²⁾は、「新規化学物質等に係る試験の方法について（化審法テストガイドライン）」(2011)に準拠し、緑藻類 *Pseudokirchneriella subcapitata* 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（対照区）、1.00、2.50、6.26、15.7、40.0、100 mg/L（公比 2.5）であった。被験物質の実測濃度は、試験開始時及び終了時に、それぞれ設定濃度の 100～103%、及び 79～91% 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値）が用いられた。全濃度区で 50% 以上の生長阻害が認められなかったため、速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は 95,400 µg/L 超とされた。72 時間無影響濃度 (NOEC) は 14,700 µg/L であった。

2) 甲殻類

環境省²⁾は、「新規化学物質等に係る試験の方法について（化審法テストガイドライン）」(2011)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。試験は止水式で行われ、限度試験（設定試験濃度 100 mg/L）であった。試験用水には Elendt M4 培地（硬度 250 mg/L、CaCO₃ 換算）が用いられた。被験物質の実測濃度は、試験開始時及び終了時に、それぞれ設定濃度の 99% 及び 96% であった。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値）が用いられた。被験物質ばく露によるオオミジンコの遊泳阻害は観察されず、48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は 97,700 µg/L 超とされた。

また、環境省²⁾は、OECD テストガイドライン No. 211(2008)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(48 又は 72 時間毎換水)で実施され、設定試験濃度は 0（対照区）、6.25、12.5、25.0、50.0、100 mg/L（公比 2.0）であった。試験用水には Elendt M4 培地（硬度 250 mg/L、CaCO₃ 換算）が用いられた。被験物質の実測濃度は、試験溶液調製時及び換水前に、それぞれ設定濃度の 98～104%、及び 76～94% であり、毒性値の算出には実測濃度（時間加重平均値）が用いられた。繁殖阻害（累積産仔数）に関する 21 日間無影響濃度 (NOEC) は 11,500 µg/L であった。

3) 魚類

環境省²⁾は、「新規化学物質等に係る試験の方法について（化審法テストガイドライン）」(2011)に準拠し、メダカ *Oryzias latipes* の急性毒性試験を GLP 試験として実施した。試験は半止水式(48 時間後換水)で行われ、設定試験濃度は 0（対照区）、100 mg/L（限度試験）であった。試験用水には脱塩素水道水（硬度 60 mg/L、CaCO₃ 換算）が用いられた。被験物質の実測濃度は、試験調製時及び 48 時間後の換水前において、それぞれ設定濃度の 101～102%、及び 90～91% であった。毒性値の算出には実測濃度（試験開始時と 48 時間後の幾何平均値）が用いられた。被験物質ばく露によるメダカの死亡は見られず、96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) は 95,900 µg/L 超とされた。

(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、上記本文で示した最小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>	72 時間 EC ₅₀ (生長阻害)	95,400 µg/L 超
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	48 時間 EC ₅₀ (遊泳阻害)	97,700 µg/L 超
魚類	<i>Oryzias latipes</i>	96 時間 LC ₅₀	95,900 µg/L 超

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

甲殻類及び魚類の毒性値は、設定濃度 100 mg/L の限度試験から得られたものであるため、PNEC 設定には適さない。藻類の 95,400 µg/L 超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 950 µg/L 超が得られた。

慢性毒性値

藻類	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	72 時間 NOEC (生長阻害)	14,700 µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	21 日間 NOEC (繁殖阻害)	11,500 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（甲殻類の 11,500 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 120 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 120 µg/L を採用する。

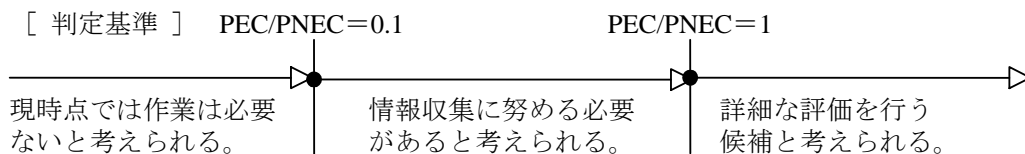
(3) 生態リスクの初期評価結果

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	データは得られなかった	データは得られなかった	120 µg/L	—
公共用水域・海水	データは得られなかった	データは得られなかった		—

注：1) 水質中濃度での () 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



本物質については、予測環境中濃度(PEC)を設定できるデータが得られなかったため、リスクの判定はできなかった。

仮に本物質の表流水、湖沼水又はダム湖水を原水とする水道原水の測定結果 $3 \mu\text{g/L}$ を淡水域の PEC とすると、PNEC との比は 0.1 よりも小さい値となる。

したがって、本物質については、現時点では作業の必要はないと考えられる。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 越後谷悦郎ら(監訳)(1986) : 実用化学辞典 朝倉書店 : 663.
- 2) Haynes.W.M.ed. (2012): CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, (Version 2012), CRC Press.
- 3) O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM).
- 4) Hansch, C. et al. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book: 4.
- 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: 301.
- 6) Verschueren, K. ed. (2009): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 5th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).
- 7) van Argteren MH et al(1998); Handbook on Biodegradation and Biological Treatment of Hazardous Organic Compounds. KluwerAcad Pub, Norwell, MA [Hazardous Substances Data Bank (<http://toxnet.nlm.nih.gov/>, 2011.4.8 現在)].
- 8) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.92.
- 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 DC, Lewis Publishers: xiv.
- 10) Stevens AA et al (1989); J Amer Water Works Assoc 81: 54-60 [Hazardous Substances Data Bank (<http://toxnet.nlm.nih.gov/>, 2011.4.8 現在)].
- 11) U.S. Environmental Protection Agency, BCFBAF™ v.3.00.
- 12) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.00.
- 13) 化学工業日報社(2002) : 14102 の化学商品;化学工業日報社(2003) : 14303 の化学商品; 化学工業日報社(2004) : 14504 の化学商品; 化学工業日報社(2005) : 14705 の化学商品; 化学工業日報社(2006) : 14906 の化学商品 ; 化学工業日報社(2007) : 15107 の化学商品; 化学工業日報社(2008) : 15308 の化学商品; 化学工業日報社(2009) : 15509 の化学商品; 化学工業日報社(2010) : 15710 の化学商品; 化学工業日報社(2011) : 15911 の化学商品.
- 14) 日本水道協会 (2001) : 上水試験方法解説編 2001 年版.
- 15) 化学工業日報社(2011) : 15911 の化学商品.

(2) ばく露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPI Suite™ v.4.00.
- 2) 環境庁環境保健部保健調査室(1987) : 昭和 61 年度化学物質環境汚染実態調査.
- 3) (社)日本水道協会(2012) : 平成 22 年度水道統計 水質編 第 93-2 号.
- 4) (社)日本水道協会(2011) : 平成 21 年度水道統計 水質編 第 92-2 号.

- 5) (社)日本水道協会(2010) : 平成 20 年度水道統計 水質編 第 91-2 号.
- 6) (社)日本水道協会(2009) : 平成 19 年度水道統計 水質編 第 90-2 号.
- 7) (社)日本水道協会(2008) : 平成 18 年度水道統計 水質編 第 89-2 号.
- 8) (社)日本水道協会(2007) : 平成 17 年度水道統計 水質編 第 88-2 号.
- 9) (社)日本水道協会(2006) : 平成 16 年度水道統計 水質編 第 87-2 号.

(3) 生態リスクの初期評価

1) U.S.EPA 「AQUIRE」

547 : Juhnke, I., and D. Luedemann (1978): Results of the Investigation of 200 Chemical Compounds for Acute Fish Toxicity with the Golden Orfe Test (Ergebnisse der Untersuchung von 200 Chemischen Verbindungen auf Akute Fischtoxizität mit dem Goldorfenest). Z.Wasser-Abwasser-Forsch. 11(5):161-164.

5718 : Bringmann, G., and R. Kühn (1977): Results of the Damaging Effect of Water Pollutants on *Daphnia magna* (Befunde der Schädigung Wassergefährdender Stoffe Gegen *Daphnia magna*). Z.Wasser-Abwasser-Forsch. 10(5):161-166.

2) 環境省(2011) : 平成 23 年度 生態影響試験