

水生生物の保全に係る水質環境基準の項目追加等について

(第2次報告)に係る参考資料

参 考 資 料 目 次

参考 1	毒性評価文献を収集する生物種の範囲	1
参考 2	慢性影響について	2
参考 3	目標値検討に用いる影響内容と試験法等	3
参考 4	毒性値の信頼性評価について	5
参考 5	水質目標値の導出手順について	16
参考 6	「無影響導出値（魚介類）」の算出について	18
参考 7	無影響濃度（慢性影響を生じない濃度）の推定	19
参考 8	各物質の物性等について	20

(参考1) 毒性評価文献を収集する生物種の範囲

「我が国に生息する有用動植物(魚介類)とその餌生物」のほか、毒性評価に係る内外の知見を可能な限り広く収集することとし、目標値の導出に利用する対象生物群を以下の通り設定する。

(1) 淡水域

(魚介類)

我が国の淡水域に生息し、漁獲・放流あるいは養殖の対象となっている魚介類(魚類、甲殻類、貝類、藻類等)。

その他、元来我が国に生息する水生生物で、かつ、通常の実験等に供される水生生物種(例:化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律(化審法)、農薬取締法及び OECD テストガイドラインの推奨種であるメダカ)

(魚介類の餌生物)

我が国の淡水域に生息している全ての生物のうち、上記魚介類を除く生物。ただし、魚類については、餌生物になっている種類もあるが、その実態が不明なこともあり、餌生物としては扱わない。

その他、 に該当する生物の同属種、または、通常の実験等に供される魚類以外の種類(例:化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律(化審法)、農薬取締法及び OECD テストガイドラインの推奨種である緑藻)

(2) 海域

(魚介類)

我が国の海域に生息し、漁獲・放流あるいは養殖の対象となっている魚介類(魚類、甲殻類、貝類、藻類等)。

(魚介類の餌生物)

我が国の海域に生息している全ての生物のうち、上記魚介類を除く生物。ただし、魚類については、餌生物になっている種類もあるが、その実態が不明なこともあり、餌生物としては扱わない。

その他、 に該当する生物の同属種

(参考2) 慢性影響について

1. 慢性影響について

水生生物の世代交代を考慮した、個体群の存続への影響を慢性影響とする。

主な影響内容とエンドポイント：成熟、繁殖、増殖、交尾、胚と稚仔の生残・死亡、成長（生長）等に対する NOEC 及びこれに準ずる影響内容とエンドポイント

ばく露期間（試験期間）：対象生物の寿命あるいは世代交代の期間を超える期間の試験は慢性影響を判定する試験として位置付ける。また、世代交代あるいは個体群を維持するために重要な成長段階への影響を捉えるための試験は慢性影響に対する試験とし、それに要する期間をばく露期間とする。これには、魚類では胚から稚魚、未成熟から成熟・産卵にいたる期間以上、ミジンコ類では 14 日間以上（繁殖）、その他、カゲロウ類・トビケラ類等の水生昆虫や貝類等については成長や繁殖等への影響が認められる期間以上が該当する。ただし、藻類に対する急性、慢性影響の考え方は統一した見解が得られていないことから、ばく露期間は急性影響と同様の 72～96 時間とする。

2. 急性影響について

水生生物の生物寿命を考慮した上で、比較的短期間に生じる個体の生存に関わる影響を急性影響とする。水質目標値の導出においては、急性影響をそのまま用いることはしないが、慢性影響を捉えるための情報として用いる。

主な影響内容とエンドポイント：死亡に対する LC₅₀、孵化阻害、遊泳阻害、増殖阻害、生長遅延等の EC₅₀ 及びこれらに準ずる影響内容とエンドポイント

ばく露期間（試験期間）：藻類は 72～96 時間、甲殻類・魚類及びその他の生物（動物）は 48～96 時間のばく露期間を要する試験とし、それ以上のばく露期間の試験においても、対象生物の寿命、世代交代期間等を勘案し、急性的な影響と判断された場合には急性影響として扱う。

(参考3) 目標値検討に用いる影響内容と試験法等

水生生物保全に係る水質環境基準での類型区分において、特に産卵場及び感受性の高い幼稚仔等の時期に利用する水域については、より厳しい目標をあてはめることがあり得る。目標値の検討が、水生生物の成長段階毎に分けて行われることを考慮し、成長段階毎の影響内容と試験法の整理を行う。

また、水生生物保全に係る水質環境基準の目的は個体群の存続に対する影響（慢性影響）を防止することであるから、慢性影響を生じない濃度（無影響濃度）が得られる試験法を「水生生物保全に係る水質環境基準の標準試験法」として位置付け、これら試験法により得られた無影響濃度を優先する。なお、それ以外の試験法については「その他の試験法」として位置付け、試験法の信頼性及び目標値導出への利用可能性を個別に検討することとする。

各成長段階で用いる試験法を下表に示した。なお、表に示した影響内容や試験法は目標値の導出に用いるデータを検討する際の基本情報となるが、目標値導出手順の見直し等により改訂があり得るものである。

「水生生物保全に係る水質環境基準の標準試験法」

水域	生物	成長段階	影響内容	試験法
淡水	魚介類	胚～稚魚	死亡、ふ化、成長、繁殖 死亡、ふ化、成長、繁殖	OECD TG210 : Fish, Early-life Stage toxicity Test ISO 12890 : Water quality - Determination of toxicity to embryos and larvae of freshwater fish – Semi-static method
		成体	死亡、成長・生長、行動(忌避を含む)、繁殖	-
		全成長段階 成熟・産卵個体		-
	餌生物	全成長段階 幼生～成熟・産卵個体	藻類の生長 藻類の生長 ミジンコ類の繁殖 ミジンコ類の繁殖	OECD TG201 : Freshwater Alga and Cyanobacteria, Growth Inhibition Test ISO 8692 : Water quality - Freshwater algal growth inhibition test with unicellular green algae OECD TG211 : <i>Daphnia magna</i> Reproduction Test ISO 10706 : Water quality - Determination of long term toxicity of substances to <i>Daphnia magna</i> Straus (Cladocera, Crustacea)
海水	魚介類	胚～幼稚仔	死亡、ふ化、成長・生長、繁殖への有害影響	-
		成体	死亡、成長・生長、成熟への有害影響	-
		成熟・産卵個体、全成長段階		-
	餌生物	全成長段階	藻類の生長	ISO10253: Water quality. Marine algal growth inhibition test with <i>Skeletonema costatum</i> and <i>Phaeodactylum tric rnutum</i>

幼稚仔：成体と同じ体形や機能等を有しない成長段階（例えば、魚類では後期仔魚まで）

成体：幼稚仔以後で性成熟前まで、魚類では稚魚期から抱卵していない成魚の期間

「その他の試験法」

水域	生物	成長段階	影響内容	試験法
淡水	魚介類	胚～前期仔魚	ふ化しない	OECD TG212 : Fish, Short-term Toxicity Test on Embryo and Sac-Fry Stages
		稚魚～未成熟魚	死亡 成長 成長	OECD TG203 : Fish, Acute Toxicity Test、 OECD TG215 : Fish, Juvenile Growth Test、 ISO 10229 : Water quality - Determination of the prolonged toxicity of substances to freshwater fish - Method for evaluating the effects of substances on the growth rate of rainbow trout [<i>Oncorhynchus mykiss</i> Walbaum (Teleostei, Salmonidae)]
	餌生物	幼生	遊泳阻害 遊泳阻害	OECD TG202 : Daphnia sp., Acute Immobilisation Test ISO 6341 : Water quality - Determination of the inhibition of the mobility of <i>Daphnia magna</i> Straus (Cladocera, Crustacea) - Acute toxicity test
海水	魚介類	後期仔魚	死亡	海産魚類及び海産エビ類の急性毒性試験法（魚類仔魚期、エビ類ミシス期 第1版）（環境省） 同上
		ミシス（エビ類）	死亡	
		稚魚	死亡	海産魚類及び海産エビ類の急性毒性試験法（案）（第1版）（環境省） 同上
	ポストラバーバ（エビ類）	死亡		
	餌生物	幼生	死亡	海産動物プランクトン急性毒性試験（環境省検討中） ISO 14669 : Water quality - Determination of acute lethal toxicity to marine copepods (Copepoda, Crustacea)
成体		死亡		

(参考4) 毒性値の信頼性評価について

1. 毒性データを収集する文献範囲

水生生物の毒性評価を行う毒性データを取得するための生態毒性情報源として、生態毒性データベース、有害性評価書及びその他の生態毒性情報源（一般的な検索システム）を用いる。

【生態毒性データベース】

米国環境保護庁(US EPA)生態毒性データベース「AQUIRE」(AQUatic toxicity Information REtrieval)
欧州連合(EU)「IUCLID」(International Union Chemical Information Database)
欧州産業界 ECETOC の水生生物毒性データベース (ECETOC Aquatic Toxicity : EAT)
環境省(庁)生態影響試験報告書

【有害性評価書等】

環境省 化学物質の環境リスク評価(生態リスク初期評価)
(独)製品評価技術基盤機構・(財)化学物質評価研究機構 化学物質の初期リスク評価
(独)新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)委託事業)
(独)産業技術総合研究所 詳細リスク評価書
OECD(経済協力開発機構)HPVC プロジェクト「SIDS」(Screening Information Data Set)
欧州連合リスク評価書「EU-RAR」(European Union Risk Assessment Report)
世界保健機関(WHO)「EHC」(Environmental Health Criteria)
カナダ環境保護法優先物質評価書(Canadian Environmental Protection Act Priority Substances List Assessment Report)

【その他の生態毒性情報源】

上述した生態毒性データベースや評価書に掲載されていない情報については、以下に示す一般の検索システムや資料も利用することとする。

科学技術振興機構(JST)文献検索システム(JDream, 検索データベース: JSTPlus, JST7580, JMEDPlus, MEDLINE)
国立情報学研究所 NII 論文情報ナビゲーター(CiNii)
国立環境研究所所蔵マイクロフィッシュ資料
その他のインターネット検索 (Science Direct, BlackWell Synergy, SpringerLink 等)

原文における記載内容あるいは情報源に示されている供試生物や試験条件の情報を利用して毒性値の一次スクリーニングを行う。

2. 毒性データの一次スクリーニング

毒性値の信頼性は試験物質が妥当であるか、適切な試験方法を用いているかについて検討した上で、目標値導出への利用可能性を判断する。収集した毒性値の中には、信頼性の確

認に必要な試験条件等の情報が少ないもの、要約あるいは引用として記載されているもの、明らかに試験条件がテストガイドラインあるいは実水域での状況から逸脱しているものがある。これらの毒性値は、その後の水質目標値の検討に用いることができないと考えられるため、信頼性が確認できないものとして評価の対象としない。

毒性データの一次スクリーニングは、試験物質と試験方法の観点から原文記載内容に基づき以下の項目で行う。

(1) 試験物質

純度、成分等の記載の有無：記載が無いものは用いない。

成分：調剤や混合物の場合は用いない。水質目標値の検討対象物質そのものが混合物の場合はこの限りではない。

純度：80%未満で不純物等の成分が不明の場合は用いない。

検討対象物質が混合物の場合、含まれる成分による毒性の相違や野外環境での分析法等を十分考慮して、被験物質の妥当性を判断する。

(2) 試験方法

環境省が実施する環境リスク初期評価において信頼性が低いとされたデータは用いない。

テストガイドライン（別添）またはそれに準じた方法で行われた試験である場合：試験条件が標準的な試験条件から大きく逸脱しているものは用いない。

テストガイドライン（別添）またはそれに準じた方法でない試験である場合：実水域での状況から極端に逸脱していると考えられるデータは用いない。

試験物質の毒性に関与する条件が明らかな場合は、その条件（例えば、金属類での硬度、アンモニアでの pH 等）が記載されていない毒性値は用いない。

情報が極端に少ないあるいは米国環境保護庁生態毒性データベース「AQUIRE」に収録されている毒性データは、試験方法、条件等の情報量を考慮して分類されたスコア（Document code¹）が、「中程度」（Moderate）、「不十分」（Incomplete）に該当するデータは用いない。

4 . 毒性値の信頼性等の評価について

毒性値の評価は、その信頼性と水質目標値の検討への利用の適否について行う。

(1) 毒性値の信頼性

毒性値の信頼性は、答申参考資料に記載された「毒性試験結果の評価項目及び留意事項」を踏まえて検討を行う。具体的には、テストガイドライン（別添）に準じた試験についてはガイドラインの記載内容と比較して判断することとし、それ以外の試験については試験の妥当

¹Document Code：毒性データを得る上で重要と考えられる項目（淡水 16、海水 15）について、それぞれスコアが付けられており、それらの合計値が 51 未満の場合は「不十分」（Incomplete）、51～85 は「中程度」（Moderate）、86 以上の場合は「全て満たす」（Complete）の 3 段階に分類されている。なお、スコアが最も大きな項目はばく露期間・エンドポイント（各スコア 20）である。

性や毒性値の再現性、実水域での生息状況等から個別に判断する。

毒性値の信頼性評価は、一次スクリーニングを通過した毒性試験結果全てに対して、以下の判定基準で行う。

A 信頼性が高い

国際的なテストガイドライン（別添）に準拠した試験（GLPによる試験であることが望ましい）で、ガイドラインが定める試験の妥当性基準を満たし、試験条件等の逸脱はなく、再現性のよい試験で、試験結果は科学的に信頼できる。

国あるいは公的な機関により定められたテストガイドライン（別添）あるいはそれに準じた方法で行われた試験であり、試験条件はガイドラインと一部異なるものの、試験結果の算出法等信頼性を確認するために必要な情報は揃っており、再現性のよい試験が行われ、試験結果は科学的に信頼できる。

B 条件付きで信頼できる

B1 毒性値として信頼できる

テストガイドラインまたはそれに準じた方法で行われた試験では無いが、試験方法、試験結果の算出法等信頼性を確認するために必要な情報は揃っており、また、対象物質の物理化学的特性を考慮して行われているなど、試験の再現性がある（あるいは、科学的に妥当である）と判断できる。
界面活性作用のある助剤を用いる試験については、テストガイドライン（別添）またはそれに準じた方法で行われた試験であり、毒性値が試験溶液の溶解度に比べて低く、かつ、使用量はテストガイドラインの規定値未満であり、そして助剤対照区において供試生物への影響がないと判断される。

B2 毒性を示す定性情報としては信頼できる

対象生物への毒性を表していると考えられるが、毒性値の不確実性は高い。（テストガイドラインまたはそれに準じた方法で行われた試験であるが、助剤濃度がOECDの試験法に関するガイダンス文書での許容濃度を超えている等、試験方法に問題がある場合が該当する。）

C 信頼性は低い

テストガイドラインまたはそれに準じた方法で行われた試験であるがガイドラインの妥当性クライテリアを満たさない。
テストガイドラインの推奨種以外の種を用いた試験で、試験条件やばく露方法が当該種の我が国での生息環境（実水域）の状況から大きく逸脱している。試験対象物質の水中安定性や物理化学的特性を考慮していないなど、試験の手順が不適切である。

D 試験の信頼性を判断できる十分な情報がない

(2) 水質目標値の検討における利用の適否

利用の適否は、信頼性が確認された毒性値(A又はB1)から、答申参考資料改訂版の内容に基づき、該当する水域と類型における毒性値の利用可能性を試験方法、エンドポイント、ばく露期間、成長段階、試験物質の観点から、下記の判断基準により行う。

A: 利用できる

試験物質は水質目標値を検討する対象物質として妥当である。かつ、テストガイドラインまたはそれに準じた方法で行われた試験であり、エンドポイント、ばく露期間、成長段階等は該当する水域と類型における利用に適切である(表1)。又は、テストガイドラインまたはそれに準じた方法で行われた試験でない試験であるが、用いられている条件(水温、水質等)は我が国の実水域の状況と大きな相違はなく、エンドポイント、ばく露期間、成長段階等は、該当する水域と類型における利用に適切である(表1)。

B: 条件付きで利用できる

試験物質は水質目標値を検討する対象物質の一部であるが、対象そのものではない。
試験生物種あるいはその成長段階が検討対象として適当か否か十分判断できない。急性影響と慢性影響の区別が明確にできない試験内容であり、水域と類型における利用には考慮が必要である。

C: 利用できない

エンドポイント、ばく露期間、成長段階等が水域と類型における利用に適切でない。
試験物質は水質目標項目の対象ではない。

なお、信頼性が「B1」と判定された毒性試験結果は、「A(利用できる)」とはしない。

水質目標値導出に用いることができる毒性値は、「A(利用できる)」と「B(条件付きで利用できる)」と判断されたものとする。

表1 一次スクリーニングの目安

生物等	項目	魚類	甲殻類	藻類	その他の生物
全生物	魚介類	我が国に生息している生物			
	餌生物	我が国に生息している魚類以外の生物とその同属種または通常の実験等に供される魚類以外の種類			
標準的な試験法*での推奨種	成長段階（試験魚の全長、体重等）	急性（短期）毒性） OECD 試験法等で定められた試験魚の推奨全長の 1 / 2 ~ 2 倍の範囲 例： コイ：1.5 ~ 8.0cm ヒメダカ：1.0 ~ 4.6cm ニジマス：2.5 ~ 10cm 慢性（長期）毒性）テストガイドラインに記載された成長段階	テストガイドラインに記載された成長段階 例）ミジンコ 幼体：生後 24 時間令以内 成体（未成熟個体）：ばく露期間中に産仔することがない成長段階であること	初期細胞数密度： OECD 試験法等で定められた初期細胞数密度の 5 倍以内（ばく露期間が 4 日の場合は、初期細胞数密度）	-
	試験環境（水温）	設定温度がテストガイドラインで定められた温度範囲から 3 以内の水温である 例）コイ：17 ~ 27 ヒメダカ：18 ~ 28 ニジマス：10 ~ 20	設定温度がテストガイドラインで定められた温度範囲から 3 以内の水温である 例）ミジンコ：15 ~ 25	設定温度がテストガイドラインで定められた温度範囲から 3 以内の水温である 藻類：18 ~ 27	-
	試験環境（pH）	6 ~ 9		-	-
	試験環境（DO）	飽和度で 60% 以上（ミジンコについては 3 mg/L 以上）		-	-
	エンドポイント/影響内容	参考 2【慢性影響について】に準ずる			-
	ばく露期間	参考 2【慢性影響について】に準ずる 急性（短期）毒性）48 ~ 96 時間	参考 2【慢性影響について】に準ずる 急性（短期）毒性）48 ~ 96 時間	72 ~ 96 時間	-
	密度（供試生物数）	試験物質の濃度低下が無く、DO が確保されるのであれば可	例）ミジンコ 幼体：1 頭未満/ 2 mL、成体 1 頭未満/ 4 mL	-	-

生物等	項目	魚類	甲殻類	藻類	その他の生物
	毒性値	内挿により求められた毒性値であること。			-
それ以外	成長段階	幼稚仔：仔魚期まで（Early life 試験を含む） 未成魚：稚魚期（ライフサイクル試験を含む）	テストガイドラインに記載された成長段階	初期細胞数密度：試験期間中に十分増殖できる初期細胞数密度	テストガイドラインに記載された成長段階
	試験環境（水温）	当該生物或いはその同属種の我が国での生息水温 ± 3			
	試験環境（pH）	6 ~ 9		-	6 ~ 9
	試験環境（DO）	飽和度で 60%以上		-	飽和度で 60%以上
	エンドポイント/影響内容	参考 2【慢性影響について】に準ずる			
	ばく露期間	参考 2【慢性影響について】に準ずる 急性（短期）毒性）48 ~ 96 時間	参考 2【慢性影響について】に準ずる 急性（短期）毒性）48 ~ 96 時間	72 ~ 96 時間	参考 2【慢性影響について】に準ずる
	密度	試験物質の濃度低下が無く、DO が確保されるのであれば可	試験物質の濃度低下が無く、DO が確保されるのであれば可	-	試験物質の濃度低下が無く、DO が確保されるのであれば可
	毒性値	内挿により求められた毒性値であること。			

*：ここでの標準的な試験法とは、別添に示した試験法を指す。

水生生物を用いた主な毒性試験法

基本とするガイドライン（国際的なガイドライン等）

（ 1 ）経済協力開発機構（ Organisation for Economic Co-operation and Development : OECD ）

1. OECD TG201 : Freshwater Alga and Cyanobacteria, Growth Inhibition Test
2. OECD TG202 : *Daphnia* sp., Acute Immobilisation Test
3. OECD TG203 : Fish, Acute Toxicity Test
4. OECD TG210 : Fish, Early-life Stage toxicity Test
5. OECD TG211 : *Daphnia magna* Reproduction Test
6. OECD TG212 : Fish, Short-term Toxicity Test on Embryo and Sac-fry Stages
7. OECD TG215 : Fish, Juvenile Growth Test
8. OECD TG221 : *Lemna* sp. Growth Inhibition Test

（ 2 ）国際標準化機構（ International Organization for Standardization : ISO ）

9. ISO 6341 : Water quality - Determination of the inhibition of the mobility of *Daphnia magna* Straus (*Cladocera, Crustacea*) - Acute toxicity test
10. ISO 8692 : Water quality - Freshwater algal growth inhibition test with unicellular green algae
11. ISO 10229 : Water quality - Determination of the prolonged toxicity of substances to freshwater fish - Method for evaluating the effects of substances on the growth rate of rainbow trout [*Oncorhynchus mykiss* Walbaum (*Teleostei, Salmonidae*)
12. ISO 10253 : Water quality - Marine algal growth inhibition test with *Skeletonema costatum* and *Phaeodactylum tricornutum*
13. ISO 10706 : Water quality - Determination of long term toxicity of substances to *Daphnia magna* Straus (*Cladocera, Crustacea*)
14. ISO 12890 : Water quality - Determination of toxicity to embryos and larvae of freshwater fish - Semi-static method
15. ISO 14442 : Water quality - Guidelines for algal growth inhibition tests with poorly soluble materials, volatile compounds, metals and waste water
16. ISO 14669 : Water quality - Determination of acute lethal toxicity to marine copepods (*Copepoda, Crustacea*)

（ 3 ）海生生物テストガイドライン検討会

17. 海産魚類及び海産エビ類の急性毒性試験法（案）（第1版）

参考とするガイドライン（国あるいは公的な機関により定められたテストガイドライン）

（ 4 ）経済協力開発機構（ Organisation for Economic Co-operation and Development : OECD ）

18. OECD TG204 : Fish, Prolonged Toxicity Test

(5) 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律 (化審法)

19. 藻類生長阻害試験
20. ミジンコ急性遊泳阻害試験
21. 魚類急性毒性試験
22. ミジンコの繁殖に及ぼす影響に関する試験 (ミジンコ繁殖試験)

(6) 農薬取締法

23. 魚類急性毒性試験
24. 魚類 (ふ化仔魚) 急性毒性試験
25. ミジンコ類急性遊泳阻害試験
26. ミジンコ類 (成体) 急性遊泳阻害試験
27. ミジンコ類繁殖試験
28. ヌマエビ・ヌカエビ急性毒性試験
29. ヨコエビ急性毒性試験
30. ユスリカ幼虫急性毒性試験
31. 藻類生長阻害試験

(7) 米国

1) Toxic Substances Control Act (TSCA) 及び Federal Insecticide, Fungicide and Rodenticide Act (FIFRA)

32. OPPTS 850.1010 Aquatic invertebrate acute toxicity, test, freshwater daphnids
33. OPPTS 850.1020 Gammarid acute toxicity test
34. OPPTS 850.1025 Oyster acute toxicity test (shell deposition)
35. OPPTS 850.1035 Mysid acute toxicity test
36. OPPTS 850.1045 Penaeid acute toxicity test
37. OPPTS 850.1055 Bivalve acute toxicity test (embryo larval)
38. OPPTS 850.1075 Fish acute toxicity test, freshwater and marine
39. OPPTS 850.1085 Fish acute toxicity mitigated by humic acid
40. OPPTS 850.1300 Daphnid chronic toxicity test
41. OPPTS 850.1350 Mysid chronic toxicity test
42. OPPTS 850.1400 Fish early-life stage toxicity test
43. OPPTS 850.1500 Fish life cycle toxicity

(850 シリーズに統合以前)

a) Toxic Substances Control Act (TSCA) :

Code of Federal Regulations Title 40 Protection of Environment

44. § 797.1050 Algal acute toxicity test.
45. § 797.1300 Daphnid acute toxicity test.
46. § 797.1330 Daphnid chronic toxicity test.
47. § 797.1400 Fish acute toxicity test.

- 48. § 797.1600 Fish early life stage toxicity test.
- 49. § 797.1930 Mysid shrimp acute toxicity test.
- 50. § 797.1950 Mysid shrimp chronic toxicity test.

b) Federal Insecticide, Fungicide and Rodenticide Act (FIFRA)

- 51. OPP 72-1 Freshwater Fish Acute-warm and coldwater species with TGAI or TEP(FIFRA 158.490)
- 52. OPP 72-2 Freshwater Invertebrate Acute TGAI or TEP(FIFRA 158.490)
- 53. OPP 72-3 Estuarine/ Marine Fish, Shellfish, Shrimp Acute using TGAI or TEP(FIFRA 158.490)
- 54. OPP 72-4a Freshwater or Marine/Estuarine Fish Early Life Stage Chronic Toxicity using TGAI or TEP(FIFRA 158.490)
- 55. OPP 72-4b Freshwater Invertebrate Life Cycle Chronic Toxicity using TGAI or TEP(FIFRA 158.490)
- 56. OPP 72-5 Full Fish Life Cycle TGAI(FIFRA 158.490)

* TGAI= Technical Grade Active Ingredient TEP=Typical End-Use Product

- 57. SEP: Acute Toxicity Test for Freshwater Invertebrates (EPA-540/9-85-005;1985)
- 58. SEP: Acute Toxicity Test for Freshwater Fish (EPA-540/9-85-006; 1985)
- 59. SEP: Fish Life-Cycle Toxicity Tests (EPA-540/9-86-137; 1986)
- 60. SEP: Fish Early Life-Stage Test (EPA-540/9-86-138; 1986)
- 61. SEP: *Daphnia magna* Life-Cycle (21-Day Renewal) Chronic Toxicity Test (EPA-540/9-86-141; 1986)
- 62. SEP: Non target Plants: Growth and Reproduction of Aquatic Plants-Tiers 1 and 2 (EPA-540/9-86-134;1986)
- 63. SEP: Acute Toxicity Test for Estuarine and Marine Organisms (Estuarine Fish 96-Hour Acute Toxicity) (EPA-540/9-85-009, 1985)
- 64. SEP: Acute Toxicity Test for Estuarine and Marine Organisms (Shrimp 96-Hour Acute Toxicity Test) (EPA-540/9-85-010, 1985).
- 65. SEP: Acute Toxicity Test for Estuarine and Marine Organisms (Mollusc 96-Hour Flow Through Shell Deposition Study) (EPA-540/9-85-011, 1985) /
- 66. SEP: Acute Toxicity Test for Estuarine and Marine Organisms (Mollusc 48-Hour Embryo Larvae Study) (EPA-540/1-85-012, 1985)

*SEP : Standard Evaluation Procedure

2) 米国材料試験協会 (American Society for Testing and Materials : ASTM)

近年公表されているガイドライン

- 67. E724-98 : Standard Guide for Conducting Static Acute Toxicity Tests Starting with Embryos Four Species of Saltwater Bivalve Molluscs
- 68. E729-96 : Standard Guid for Conducting Acute Toxicity Tests on Test Materials with Fishes, Macroinvertebrates, and Amphibians
- 69. E1191-97 : Standard guide for conducting life-cycle toxicity tests with saltwater rmysids
- 70. E1193-97 : Standard Guid for Conducting *Daphnia magna* Life-cycle Toxicity Tests
- 71. E1218-97a : Standard guide for conducting static 96-h toxicity tests with microalgae

- 72. E1241-98 : Standard guide for conducting early life-stage toxicity tests with fishes
- 73. E1295-01 : Standard guide for conducting three-brood, renewal toxicity test with *Ceriodaphnia dubia*
- 74. E1415-91 : Standard guide for conducting static toxicity tests with *Lemna gibba* G3
- 75. E1440-91 : Standard guide for acute toxicity test with the rotifer *Barchionus*
- 76. E1463-92 : Standard guide for conducting static and flow-through acute toxicity tests with mysids from the west coast of the United States
- 77. E1562-00 : Standard guide for conducting acute, chronic, and life-cycle aquatic toxicity tests with polychaetous annelids
- 78. E1563-98 : Standard guide for conducting static acute toxicity tests with echinoid embryos

(8) カナダ

- 79. EPS1/RM/ 9 : Biological Test Method: Acute Lethality Test Using Rainbow Trout
- 80. EPS1/RM/ 10 : Biological Test Method: Acute Lethality Test Using Threespine Stickleback (*Gasterosteus aculeatus*)
- 81. EPS1/RM/ 11 : Biological Test Method: Acute Lethality Test Using *Daphnia* spp.
- 82. EPS1/RM/21 : Biological Test Method: Test of Reproduction and Survival Using the Cladoceran *Ceriodaphnia dubia*
- 83. EPS1/RM/24 : Biological Test Method: Toxicity Test Using Luminescent Bacteria
- 84. EPS1/RM/25 : Biological Test Method: Growth Inhibition using a Freshwater Alga
- 85. EPS1/RM/26 : Biological Test Method: Acute Test for Sediment Toxicity Using Marine or Estuarine Amphipods.
- 86. EPS1/RM/27 : Biological Test Method: Fertilization Assay Using Echinoids(Sea Urchins and Sand Dollars)
- 87. EPS1/RM/28 : Biological Test Method: Toxicity Tests Using Early Life Stages of Salmonid Fish (Rainbow Trout)
- 88. EPS1/RM/37 : Biological Test Method: Test for Measuring the Inhibition of Growth Using the Freshwater Macrophyte, *Lemna minor*

(9) ドイツ連邦規格(Deutsche Normen)²

- 89. DIN 38412-11 : German standard methods for the examination of water, waste water and sludge; Test methods using water organisms (group L); Determination of the effect on microcrustacea of substances contained in water (*Daphnia* short-time test) (L 11)
- 90. DIN 38412-33 : German standard methods for the examination of water, waste water and sludge; bio-assays (group L); determining the tolerance of green algae to the toxicity of waste water (*Scenedesmus* chlorophyll fluorescence test) by way of dilution series (L 33)
- 91. DIN 38412-37 : German standard methods for the examination of water, waste water and sludge - Bio-assays (group L) - Part 37: Determination of the inhibitory effect of water on the growth of

² ドイツ連邦規格(Deutsche Normen)には、DIN(国家規格)、DIN EN(欧州規格のドイツ版)、DIN EN ISO(国家規格、欧州規格および国際規格の組合せ)、DIN ISO(DIN協会が変更を加えずに採用したISO規格)、DIN VDE(ドイツ電気技術者協会のVDE規格と全く同一内容のDIN規格)、DIN IEC(DINが変更を加えずに採用した国際電気標準会議のIEC規格)がある。

(日本貿易振興機構 HP より、http://www.jetro.go.jp/world/japan/qa/export_12/04S-040009)

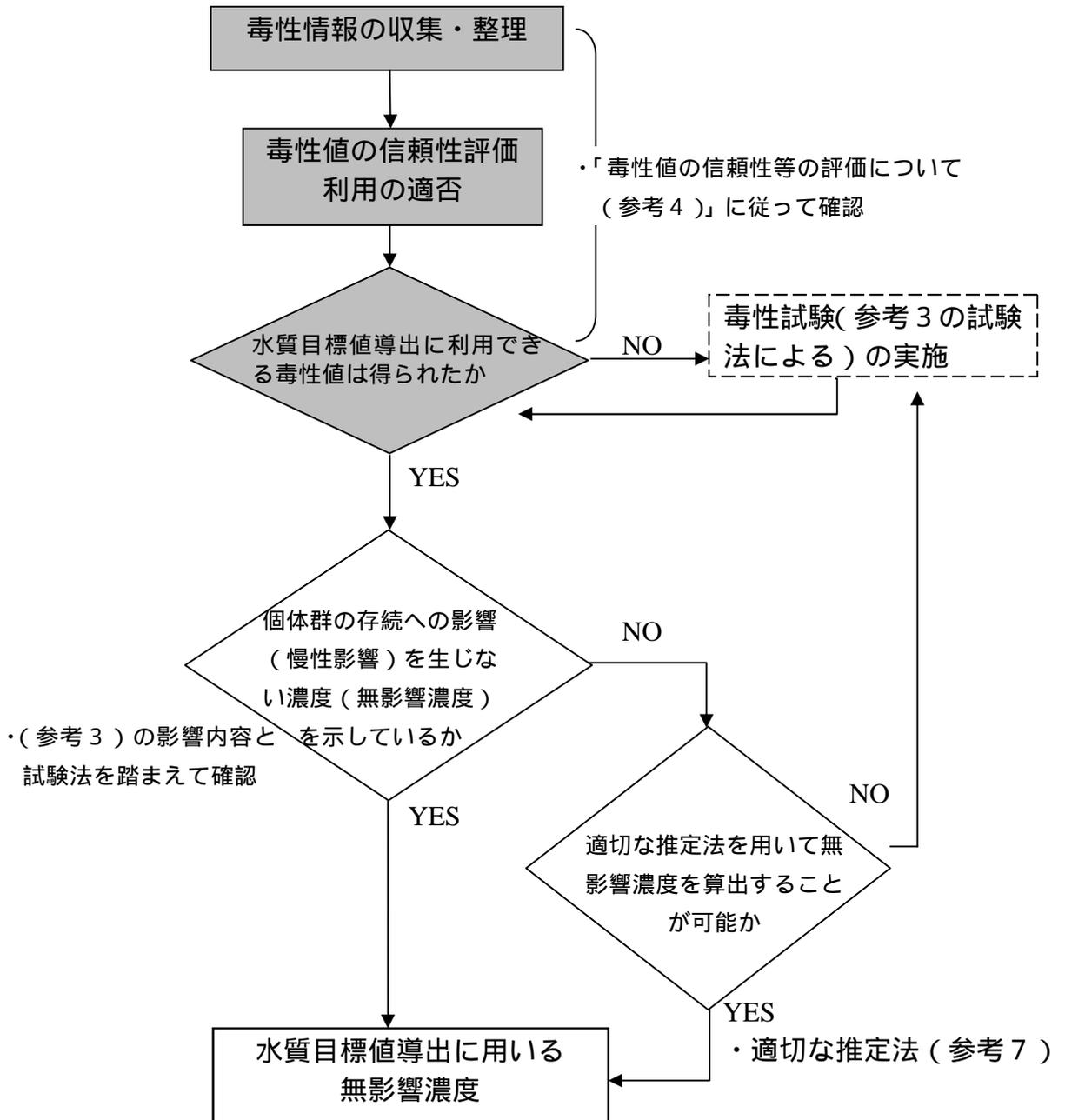
bacteria (*Photobacterium phosphoreum* cell multiplication inhibition test) (L 37)

92. DIN EN ISO 10253 : Water quality - Marine algal growth inhibition test with *Skeletonema costatum* and *Phaeodactylum tricornutum* (ISO 10253:2006); German version EN ISO 10253:2006
93. DIN EN ISO 10712 : Water quality - *Pseudomonas putida* growth inhibition test (*Pseudomonas* cell multiplication inhibition test) (ISO 10712:1995); German version EN ISO 10712:1995
94. DIN EN ISO 20079 : Water quality - Determination of the toxic effect of water constituents and waste water on duckweed (*Lemna minor*) - Duckweed growth inhibition test (ISO 20079:2005); German version EN ISO 20079:2006
95. DIN EN ISO 6341 : Water quality - Determination of the inhibition of the mobility of *Daphnia magna* Straus (Cladocera, Crustacea) - Acute toxicity test (ISO 6341:1996); German version EN ISO 6341:1996
96. DIN EN ISO 7346-2 : Water quality - Determination of the acute lethal toxicity of substances to a freshwater fish [*Brachydanio rerio* Hamilton-Buchanan (Teleostei, Cyprinidae)] - Part 2: Semi-static method (ISO 7346-2:1996); German version EN ISO 7346-2:1997
97. DIN EN ISO 8692 : Water quality - Freshwater algal growth inhibition test with unicellular green algae (ISO 8692:2004); German version EN ISO 8692:2004

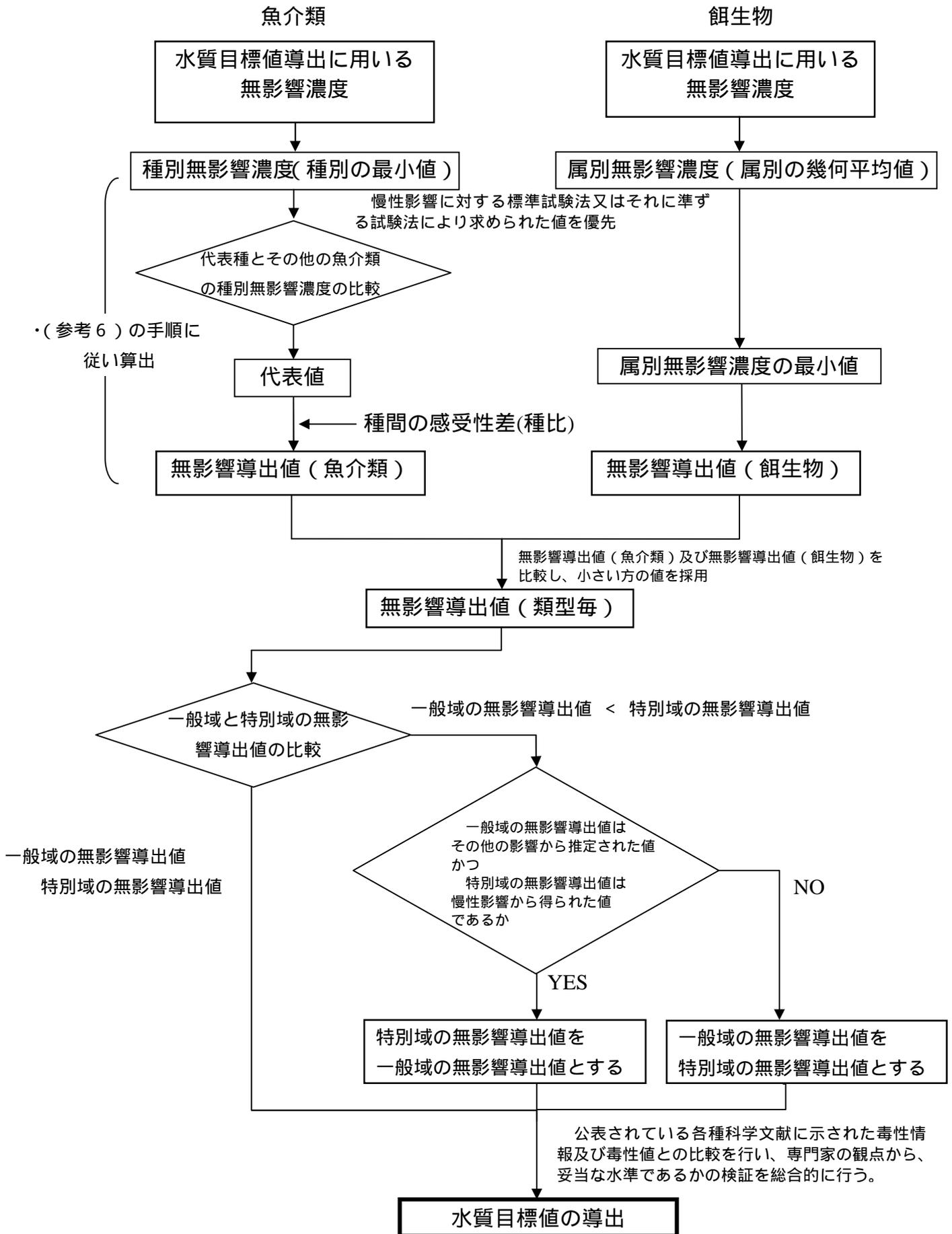
(参考5) 水質目標値の導出手順について

水質目標値の導出は、専門家による科学的な妥当性の判断を踏まえて、以下の手順により行う。

手順1 水質目標値の導出に用いる無影響濃度の選定



手順2 無影響導出値（類型毎）の算出及び水質目標値の導出



(参考6)「無影響導出値(魚介類)」の算出について

「無影響導出値(魚介類)」は、種別無影響濃度*の算出に用いた試験法の種類、試験の生物種、試験結果のばらつき、生物への作用特性や対象物質の蓄積性等を総合的に勘案し算出する。

1. 無影響導出値は、それぞれの水域での代表種*(ニジマス、コイまたはメダカ、マダイ)の種別無影響濃度と他種の種別無影響濃度を比較して求める。また、複数の代表種の種別無影響濃度があった場合は最小値を代表種の種別無影響濃度として採用する。

*代表種；代表的試験生物種

2. 種別無影響濃度が当該水域の代表種のみであった場合は、他の生物との感受性の相違(種比)として、係数「10」を適用する。

3. 代表種を含めた複数種の種別無影響濃度があり、かつ、代表種と他種の最小値の比が10未満(代表種の種別無影響濃度/他種の種別無影響濃度の最小値 <10)の場合は、代表種の種別無影響濃度に係数「10」を適用する

4. 代表種を含めた複数種の種別無影響濃度があり、かつ、代表種と他種の最小値の比が10以上(代表種の種別無影響濃度/他種の種別無影響濃度の最小値 ≥ 10)の場合は、他種の種別無影響濃度の最小値に係数「1」を適用する。

5. 代表種の種別無影響濃度がなく、他種のみである場合は、さらに毒性データ等の検討を行い、専門家の判断により係数を決定する。

なお、係数については各種データが蓄積された段階で適宜見直すこととする。

(参考7) 無影響濃度(慢性影響を生じない濃度)の推定

水生生物保全に係る水質目標値の導出は、信頼できる試験より得られた慢性影響を生じない濃度(以下、「無影響濃度」という。)を捉えることを基本とするが、信頼できる毒性値が得られない場合は、原則として、参考3の「水生生物保全に係る水質環境基準の標準試験法(以下、「標準試験法」という。)」を実施して毒性値を得ることとする。

現時点で標準試験法が確立されていない場合は、参考3に示した「その他の試験法」から得られた毒性値から無影響濃度を外挿する。

この判断は専門家により行うこととし、判断に際しては以下に示す事項に沿って検討を行う。

無影響濃度を推定する際には、魚介類や餌生物への毒性の作用特性を踏まえる。

「その他の試験法」から得られた毒性値から無影響濃度を推定する際には、国内外に生息する近縁種(生物分類学的に科あるいは目)の無影響濃度とその他の試験法での毒性値の比を利用することができる。

また、近縁種の毒性値が得られない場合は、「その他の試験法」で得られた毒性値を「10」で除して無影響濃度を得ることができる。

(参考8) 各物質の物性等について

1. 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩(LAS)

直鎖アルキルベンゼンスルホン酸は、ベンゼン環に直鎖のアルキル基(-C_nH_{2n+1})が結合した直鎖アルキルベンゼンにスルホ基(-SO₃H)が結合した化合物である。上市されている商用の直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩(LAS)はアルキル基の炭素数が10~14(平均鎖長11.8程度)で、アルキル基のベンゼン環への結合位置は定まっていない。スルホン酸体は強酸であり、製品として用いられることはなく、通常は、ナトリウムなどのアルカリ金属又はアンモニウムとの塩が、直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩として流通している。商用の直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩(LAS)はアルキル基の炭素数や結合位置の違いなど20以上の混合物からなる。なお、文中及び表中の()内の数字は出典番号を示している。

(1) 物理化学的特性等について

本物質の構造を図1、物理化学的特性等を表1に取りまとめた。

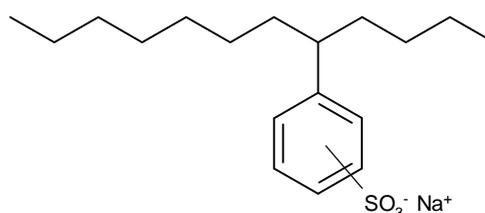


図1 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩の構造図の代表例

表1 物理化学的特性等

融点	198.5 ^{*1} (1)、>300 ^{*2} (2)、144 ^{*3} (3)	
沸点	444 (分解) ^{*1} (1)	
密度	1.0 (20、60%スラリー) ^{*2} (4)	
蒸気圧	2.3 × 10 ⁻¹⁵ mmHg (25) ^{*2} (MPBPWIN(5)により計算)	
解離定数(pKa)	現時点では得られていない	
オクタノール/水分配係数 (log K _{ow})	0.45 ^{*2} (2)、1.96 ^{*2} (6)、3.32 ^{*4} (7)	
水溶解度	2.0 × 10 ⁵ mg/L (25) ^{*2} (2)、2.5 × 10 ⁵ mg/L (20) ^{*4} (7)	
ヘンリー定数	6.38 × 10 ⁻³ Pa · m ³ /mol (25) ^{*2} (HENRYWIN(8)により計算)	
生物分解性	好氣的	良分解性 BOD73%、HPLC98% (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) ^{*3} (9)
	嫌氣的	分解され難い ^{*5} (10)
化学分解性	加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合はないので、水環境中では加水分解されない ^{*5} (10)
光分解性	水面では紫外線によって光分解される ^{*2} (11)	

生物濃縮性* ⁶ (12)	試験生物：ファットヘッドミノー				
	expt.	ばく露期間 [時間]	流水速度 [L/d/g-fish]	comp	BCF _{ss} [L/kg]
A	48	0.5	C ₁₀ -2	1.7	10.8
			C ₁₁ -2	5.8	
			C ₁₂ -2	47.6	
			C ₁₃ -2	353.8	
B	168 ~ 192	1	C ₁₁ -5	6.1	11.7
			C ₁₂ -2	99.1	
			C ₁₂ -5	10.0	
			C ₁₃ -5	34.0	
C	168 ~ 192	1	C ₁₁ -5	9.8	11.4
			C ₁₂ -2	168.4	
			C ₁₂ -3	42.1	
			C ₁₂ -6	31.9	
D	168 ~ 192	1	C ₁₀ -2	6.0	10.6
			C ₁₁ -2	31.9	
			C ₁₂ -2	211.5	
			C ₁₃ -2	987.2	
			C ₁₀ -in	3.0	
			C ₁₁ -in	9.1	
			C ₁₂ -in	29.9	
			C ₁₃ -in	112.4	

Comp:同族体での炭素数と異性体位置 n_c, A_v: 平均アルキル鎖長

脚注) *1: CAS 85117-50-6 C₁₀₋₁₄ Sodium alkyl benzene sulfonate
*2: CAS 25155-30-0 ドデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム
*3: CAS 2211-98-5 p-ドデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム
*4: CAS 68411-30-3 Benzenesulfonic acid, C₁₀₋₁₃ Alkylderivs., Sodium salts (混合物)
*5: 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩 (アルキル基の炭素数が 10 から 14 までのもの及びその混合物に限る。)
*6: 商用 LAS (C₁₀₋₁₃)

直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩(LAS) は、2 段階の反応を経て合成される。まず、ベンゼンに n-パラフィン又は塩化パラフィンを加え、フッ化水素又は塩化アルミニウム等を触媒として反応させ、ベンゼンをアルキル化することにより直鎖アルキルベンゼンを合成する。次いで、この直鎖アルキルベンゼンを三酸化硫黄と反応させて LAS を合成する。(10)

本物質の主な用途は、約 8 割が家庭の洗濯用洗剤、2 割弱がクリーニング、厨房や車両の洗浄などに使用される業務用洗浄剤であり、わずかではあるが繊維を染色加工する際の分散剤や農薬などの乳化剤に使用されている。家庭の台所用洗剤にはほとんど使われなくなっている。(13)

(2) 水環境中での挙動

平成 19 (2007) 年度から平成 23 (2011) 年度に調べられた我が国の淡水域からは、各年度の最大値として、70~19,000 $\mu\text{g/L}$ の LAS が検出され、検出下限値 0.01~100 $\mu\text{g/L}$ の範囲の中での検出率は、各年度ともに 30% を超える。環境中からは、アルキル基の炭素数が 10 から 13 の LAS 同族体が検出されている。

好氣的条件下では、LAS のアルキル基末端のメチル基が酸化 (ω -酸化) されてカルボキシル基を生じ、スルホフェニルカルボン酸 (Sulphophenyl Carboxylic Acid (SPC)) となり、さらにアルキル基の酸化短縮 (β -酸化) が炭素数 4~5 まで続いた後にベンゼン環の開裂を経て、最終的には二酸化炭素、水及び硫酸イオンに分解される⁽¹⁾。分解過程で生成した有機物の一部は、低級脂肪酸などに変換され、微生物に同化される⁽²⁾。

C_{10} 、 C_{11} 及び C_{12} 成分を含有する市販の LAS の河川水中での生分解特性としては、8 日後には C_{10} -LAS の 5-スルホフェニル異性体(炭素数 10 のアルキル基の末端から 5 番目の位置の炭素でベンゼン環に結合した構造の LAS)及び C_{11} -LAS の 5-及び 6-スルホフェニル異性体のみが残存し、末端メチル基がスルホフェニル基から最も離れて存在する異性体が最も分解しやすい⁽³⁾。生分解はアルキル基の炭素数が多い長鎖同族体 (C_{13} 、 C_{14})、アルキル基がより外側の炭素でベンゼン環へ結合している外部位置異性体ほど分解されやすい⁽⁴⁾。

LAS の河川・湖沼水中の懸濁物質 (吸着媒体) への吸着は、有機炭素含有率が高い吸着媒体ほど吸着量が多いという実験結果が得られている⁽⁵⁾。河川水中の LAS は、10~45% が懸濁物質に吸着して存在し⁽⁵⁾、炭素数別では C_{10} から C_{12} の大部分が溶存態、 C_{13} の 40~60% が懸濁態として存在している⁽⁶⁾。底質中では全 LAS 量の 99% 以上が吸着態として存していた⁽⁷⁾。底質中における LAS の分解速度は、水中よりも 2 桁以上遅いと報告されている⁽⁸⁾。

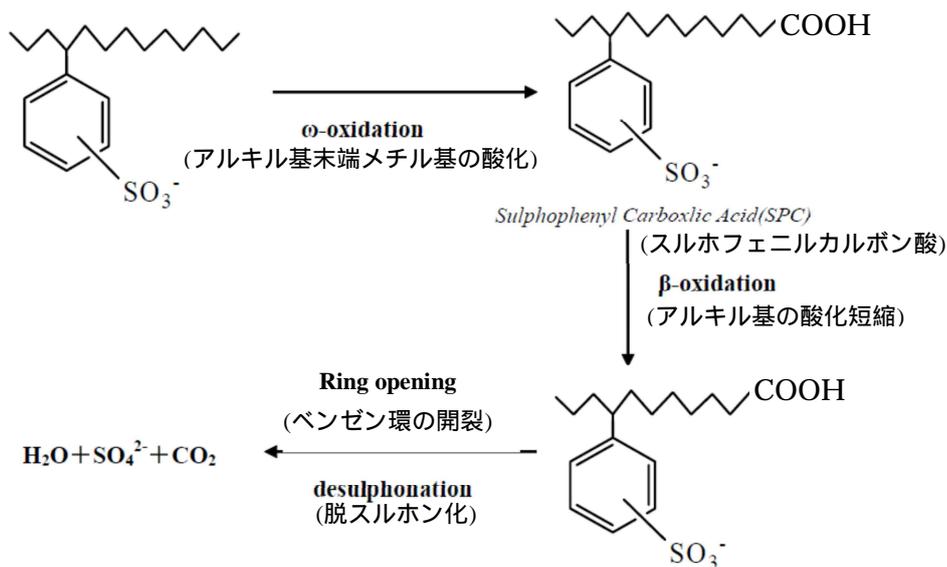


図2 LAS の分解過程 (1)

(3) 化学物質排出把握管理促進法 (化管法) による全国の排出量、化学物質審査規制法 (化審法) による生産量

直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩 (アルキル基の炭素数が 10 から 14 までのもの及びその混合物に限る。) の化学物質排出把握管理促進法 (化管法) における製造・輸入量区分は 100t 以上である。 (1)

表 1 2005 年度～2010 年度における化管法での排出量 (2、3)
(直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩)

排出 年度	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	当該事 業所外	対象 業種	非対象 業種	家庭	移 動 体			
2010	694	18,722	-	-	34,597	250,830	2,791,236	1,813,431	10,443,562		19,415	15,048,229	15,067,644
2009	1,030	17,282	-	-	21,803	361,839	3,061,477	1,693,168	10,888,793		18,312	15,643,438	15,661,750
2008	889	21,429	-	-	19,496	326,648	2,927,294	673,271	13,581,457		22,318	17,182,022	17,204,340
2007	1,336	34,019	-	-	15,877	352,039	3,237,350	472,997	9,377,409		35,355	13,087,756	13,123,111
2006	1,478	41,459	-	-	11,602	272,378	249,155	670,740	10,641,568		42,937	11,561,463	11,604,400
2005	1,553	39,648	-	-	17,045	288,622	118,632	1,251,325	12,676,743		41,201	14,046,700	14,087,901

本物質の生産量、輸入量、輸出量の推移を表 2 に示す。 (4)

表 2 国内生産量・輸出量・輸入量の推移

平成 (年)	13	14	15	16	17
生産量 (t) ^{a)}	106,578	72,078	85,749	87,026	62,088
輸出量 (t) ^{a)}	4,521	2,507	2,245	3,266	386
輸入量 (t) ^{a)}	0	971	3,272	3,573	5,472

注 : a) LAS 塩純分換算トン

「化学物質の製造・輸入量に関する実態調査」によると、直鎖アルキル (C=6 ~ 14) ベンゼンスルホン酸及びその塩 (K , Na , Li , Ca) として、2001 年度、2004 年度及び 2007 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。 (5)

出典)

物理化学的特性等

- (1) OECD High Production Volume Chemicals REPrAm (2006): SIDS (Screening Information Data Set) Initial Assessment Report. LINEAR ALKYL BENZENE SULFONATE.
- (2) International Programme on Chemical Safety (IPCS) (1997): International Chemical Safety Cards. 1189. SODIUM DODECYLBENZENE SULPHONATE
- (3) Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- (4) U.S. Coast Guard, Department of Transportation (1984-5): CHRIS - Hazardous Chemical Data. Volume II. Washington, D.C., U.S. Government Printing Office. [Hazardous Substances Data Bank (<http://toxnet.nlm.nih.gov/>, 2006.10.13 現在)]
- (5) U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.3.20
- (6) U.S. Environmental Protection Agency, EPI Suite™ v.4.0.
- (7) International Programme on Chemical Safety (IPCS) (2005): International Chemical Safety Cards. 1602. C10-13 ALKYL BENZENESULFONIC ACID, SODIUM SALT.
- (8) U.S. Environmental Protection Agency, HENRYWIN™ v.3.20.
- (9) 厚生労働省, 経済産業省, 環境省: 化審法データベース (J-CHECK)., (<http://www.safe.nite.go.jp/jcheck>).
- (10) 財団法人化学物質評価研究機構, 独立行政法人製品評価技術基盤機構 (2005) 化学物質の初期リスク評価書 No.5 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩(アルキル基の炭素数が10 から14 までのもの及びその混合物に限る。). (独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 委託事業).
- (11) Matsuura, T. and Smith, J.M. (1970): Kinetics of photodecomposition of dodecyl benzene sulfonate. Ing. Eng. Chem. Fund. 9:252-260.
- (12) Tolls, J. et al. (1997): Bioconcentration of LAS: Experimental Determination and Extrapolation to Environmental, Environmental Science & Technology, 31(12): 3426-3431.
- (13) 環境省 (2012) : 化学物質ファクトシート 2011 年版

水環境中での挙動

- (1) Schröder, R.D. (1989): Basic principles of LAS biodegradation, Tenside Detergents, 26, 86-94.
- (2) Swisher, R.D. (1987): Surfactant Biodegradation, Marcel Dekker Inc., New York. [財団法人化学物質評価研究機構, 独立行政法人製品評価技術基盤機構 (2005) 化学物質の初期リスク評価書 No.5 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩(アルキル基の炭素数が10 から14 までのもの及びその混合物に限る。). (独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構 委託事業)から]
- (3) Perales J. A., M. A. Manzano, D. Sales, J. M. Quiroga (1999) : Linear Alkylbenzene Sulphonates: Biodegradability and Isomeric Composition. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 63:94-100.
- (4) 天野耕二、福島武彦、中杉修身 (1990) : 湖沼河口域における直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩(LAS)の収支モデル. 水質汚濁研究. 13(9): 577-585.
- (5) 天野耕二、福島武彦、稲葉一穂、中杉修身 (1989) : 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩(LAS)の河川・湖沼水中懸濁物への吸着特性の変化とその要因について. 水質汚濁研究. 12(8): 506-515.
- (6) 日本石鹼洗剤工業会 (1997) : 日本における LAS の環境動態と生態影響評価. 環境年報. Vol.22(1996 ~ 1997 年度版): 1-7.

- (7) 平山南見子、高橋篤、松尾清孝、小塩英世、黒沢康弘、大嶋道孝 (1984): ODS カラム吸着法を用いた河川水中の LAS および蛍光増白剤の調査研究 - 主として LAS の存在状況 - . 川崎市公害研究所年報. 10:67-74.
- (8) 天野耕二、福島武彦、中杉修身 (1989): 湖沼底質中の直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩(LAS)の鉛直分布と季節変動について. 水質汚濁研究. 12(11): 724-735.

化管法による全国の排出量、化審法による生産量

- (1) 薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会 PRTR 対象物質調査会、化学物質審議会管理部会、中央環境審議会環境保健部会 PRTR 対象物質等専門委員会合同会合(第 4 回)(2008): 参考資料 1 現行化管法対象物質の有害性・暴露情報, (<http://www.env.go.jp/council/05hoken/y056-04.html>).
- (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: 平成 17 年度～平成 22 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 11 条に基づき開示する個別事業所データ.
- (3) (独)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 3-1 全国.
- (4) (社)環境情報科学センター編集(2006): 2006 年度界面活性剤流通状況調査報告書(修正版). [環境省(2008): 化学物質の環境リスク評価 第 6 巻.から].
- (5) 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, (http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/new_page/10/2.htm, 2005.10.2 現在). 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/jittaichousa/kakuhou18.html, 2007.4.6 現在). ; 経済産業省(2009): 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 19 年度実績)の確報値, (http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/kakuhou19.html, 2009.12.28 現在).

2. 4-t-オクチルフェノール (4(1,1,3,3-テトラメチルブチル)フェノール)

オクチルフェノールは、示性式 $C_6H_4(OH)C_8H_{17}$ で示され、直鎖のオクチル基、または分岐オクチル基がフェノール環に結合した環式有機化合物であり、オクチル基の分枝の違い及び置換位置の違いにより複数の異性体が存在する。

オクチルフェノールの中で、パラ位にアルキル基が付いた4(又はP)-オクチルフェノールには、オクチル基の構造の違いから、本報告の検討物質である1,1,3,3-テトラメチルブチル基が結合した4-(1,1,3,3-テトラメチルブチル)フェノール(4-t-オクチルフェノール)(CAS番号140-66-9)や直鎖のオクチル基が結合した4-n-オクチルフェノール(CAS番号1806-26-4)など複数の異性体がある。なお、文中及び表中の()内の数字は出典番号を示している。

(1) 物理化学的特性等について

本物質の構造を図1、物理化学的特性等を表1に取りまとめた。

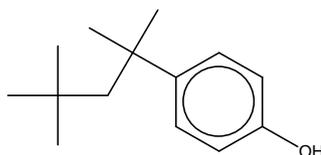


図1 4-t-オクチルフェノールの構造図

表1 4-t-オクチルフェノールの物理化学的特性等

融点	85 (1)、84~85 (2)、80 (3)	
沸点	279 (1)、277 (3)	
密度	0.95(20) (3)	
蒸気圧	4.78×10^{-4} mmHg(25) (2)、 <0.075 mmHg (20) (3)	
解離定数(pKa)	10.33 (25) (計算値) (4)	
オクタノール/水分配係数 (log K _{ow})	5.3(計算値)(3)	
水溶解度	<100 mg/L(20) (3)	
ヘンリー定数	$<1.3 \times 10^{-6}$ Pa·m ³ /mol (水溶解度 <100 mg/L、蒸気圧 4.78×10^{-4} mmHg による計算結果)	
生物分解性	好氣的	BOD 0%、GC(-)% (5) (試験期間:2週間、被験物質濃度:100mg/L、活性汚泥濃度:30mg/L)
	嫌氣的	-
化学分解性	加水分解性	加水分解しない(6)
生物濃縮性 (BCF)	濃縮性が無い又は低いと判断される物質(7) 113~469 (試験生物:コイ、試験期間:8週間、試験濃度:100μg/L), 12~135 (試験生物:コイ、試験期間:8週間、試験濃度:10μg/L) (5)	
土壌吸着性 (K _{oc})	10,000 (計算値)(8)	

4-t-オクチルフェノールはフェノールとジイソブチレンを反応させて製造される。(9)

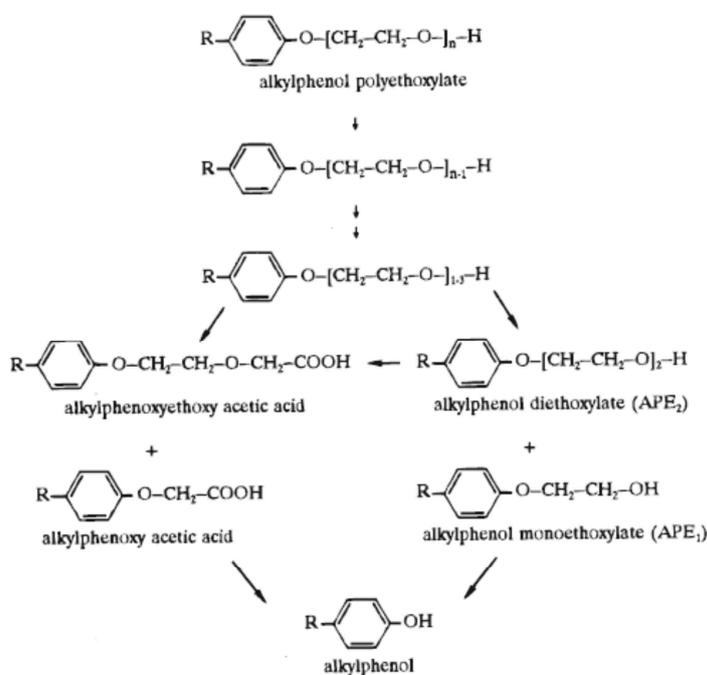
4-オクチルフェノールの主な用途は、接着剤、印刷インクやワニスに用いられる油性フェノール樹脂の原料並びに工業用の界面活性剤として用いられるポリ(オキシエチレン)オクチルフェニルエーテル(以下、「オクチルフェノールエトキシレート」という。)の原料である(10)。

オクチルフェノールエトキシレートは、オクチルフェノールにエチレンオキシドを圧力下で付加して生産される。(11)

(2) 水環境中での挙動

平成 19 (2007) 年度から平成 23 (2011) 年度に調べられた我が国の淡水域からは、最大で 0.96 $\mu\text{g/L}$ の 4-t-オクチルフェノールが検出され、検出下限値 0.00001 ~ 0.5 $\mu\text{g/L}$ の範囲の中での検出率は、各年度ともに 30% を超える。

環境中で検出される 4-t-オクチルフェノールは、4-t-オクチルフェノールエトキシレートとして排出されたものが図 2 の分解過程を経て副生成したものが多くと推定される。また、水環境中では馴化した微生物により徐々に生分解されると考えられる。なお、水面に存在するオクチルフェノールの 30% は 1 日で光分解され、日当たりのよい浅瀬(水深 20 ~ 25cm) の半減期は 13.9 時間とされている。(1)



4-t-オクチルフェノール; R の部分が 1,1,3,3-テトラメチルブチル基 (-C(CH₃)₂-CH₂-C(CH₃)₃)

図 2 アルキルフェノールエトキシレートの分解過程(2)

(3) 化学物質排出把握管理促進法(化管法)による全国の排出量、化学物質審査規制法(化審法)による生産量

本物質は化学物質排出把握管理促進法(化管法)の第一種指定化学物質である p-オクチルフェノールの異性体の一つである。

表1 2005年度～2010年度における化管法での排出量(1、2)
(p-オクチルフェノール)

排出年度	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		当該事業所外	対象業種	非対象業種	家庭			
2010	308.6	-	-	-	0.1	48,201					308.6	-	308.6
2009	174.0	-	-	-	0.1	35,263					174	-	174
2008	170.6	-	-	-	0.2	37,868					170.6	-	170.6
2007	358.1	-	-	-	96.1	172,125					358.1	-	358.1
2006	295.1	-	-	-	130.2	199,091					295.1	-	295.1
2005	188.9	-	-	-	0.2	259,689					188.9	-	188.9

参考) 2005年度～2010年度における化管法での排出量(1、2)
(オクチルフェノールエトキシレート)

排出年度	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		当該事業所外	対象業種	非対象業種	家庭			
2010	22.3	1,120	-	-	13,731	62,982	180,341	5,529	15,684		1,142	201,554	202,696
2009	12.4	944	-	-	5,661	85,850	394,383	1,275	15,638		957	411,296	412,253
2008	49.3	1,370	-	-	4,047	83,311	216,137	2,350	16,989		1,420	235,476	236,896
2007	65.9	1,328	-	-	6,818	82,103	177,620	39,805	12,429		1,393	229,854	231,247
2006	900.3	2,245	-	-	7,032	91,574	147,634	35,922	13,504		3,146	197,060	200,206
2005	52.2	2,214	-	-	10,333	109,138	95,599	2,804	17,134		2,267	115,537	117,804

化審法の旧第三種監視化学物質(通し番号:14)として届出された製造・輸入数量の推移を表2に示す⁽³⁾。

表2 製造・輸入数量の推移

平成(年度)	2007	2008	2009
製造・輸入数量(t)	27,192	17,970	20,876

注: 製造数量は出荷量を意味し、同一事業所内での自家消費分を含んでいない値を示す

「化学物質の製造・輸入量に関する実態調査」によると、モノアルキル(C=3~9)フェノールの2004年度における製造(出荷)及び輸入量は10,000~100,000 t/年未満⁽⁴⁾、2007年度は100,000~1,000,000 t/年未満⁽⁵⁾である。本物質の生産量、輸出入量の推移を表3に示す。

本物質の化学物質排出把握管理促進法(化管法)における製造・輸入量区分は100 t以上である⁽⁶⁾。

表3 生産量⁽⁷⁾、輸出入量⁽⁸⁾の推移

年	2002	2003	2004	2005	2006
生産量 (t) ^{a)}	10,000	15,000	15,000	18,000	18,000
輸入量 (t) ^{b)}	1,373	609	1,802	3,043	3,564
輸出量 (t) ^{b)}	8,032	8,852	9,292	9,317	10,416
年	2007	2008	2009	2010	2011
生産量 (t) ^{a)}	15,000	15,000	15,000	15,000	- ^{c)}
輸入量 (t) ^{b)}	3,275	4,018	3,909	4,117	6,431
輸出量 (t) ^{b)}	11,683	9,358	9,030	10,492	2,960

注：a) 推定値

b) オクチルフェノール及びノニルフェノール並びにこれらの異性体並びにこれらの塩

c) 公表されていない

出典)

物理化学的特性等

- (1) Lide, D.R. ed. (2012): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2012), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- (2) 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: 269.
- (3) 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).
- (4) OECD (2005) : OECD SIDS Initial Assessment Report PHENOL, 4-(1,1,3,3,-TETRAMETHYLBUTYL)-:pp.54.
- (5) 厚生労働省, 経済産業省, 環境省 : 化審法データベース (J-CHECK).(<http://www.safe.nite.go.jp/jcheck>, 2012.06.22 現在).
- (6) 財団法人化学物質評価研究機構 (2002): 既存化学物質安全性 (ハザード) 評価シート.
- (7) 通産省公報(1978.12.12).
- (8) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.00.
- (9) 化学工業日報社(2012) : 16112 の化学商品.
- (10) 環境省(2012) : 化学物質ファクトシート - 2011 年度版 - .
- (11) OECD (1995) : SIDS Initial Assessment Report PHENOL, 4-(1,1,3,3-TETRAMETHYLBUTYL)-

水環境中での挙動

- (1) OECD (1995) : SIDS Initial Assessment Report PHENOL, 4-(1,1,3,3-TETRAMETHYLBUTYL)-
- (2) 環境省 (2001) : 平成 13 年度第 2 回内分泌攪乱化学物質問題検討会 資料 5

化管法による全国の排出量、化審法による生産量

- (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 : 平成 17 年度 ~ 平成 22 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) 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 3-1 全国.
- (3) 経済産業省(通商産業省) 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律(化審法)第二十五条の二第二項の規定に基づき、同条第一項の届出に係る製造数量及び輸入数量を合計した数量として公表された値.
- (4) 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/jittaichousa/kakuhou18.html, 2007.4.6 現在).
- (5) 経済産業省(2009) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 19 年度実績)の確報値,(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/kakuhou19.html, 2009.12.28 現在).
- (6) 薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会 PRTR 対象物質調査会、化学物質審議会管理部会、中央環境審議会環境保健部会 PRTR 対象物質等専門委員会合同会合(第 4 回)(2008) : 参考資料 1 現行化管法対象物質の有害性・暴露情報,(<http://www.env.go.jp/council/05hoken/y056-04.html>, 2008.11.6 現在).
- (7) 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; 化学工業日報社(2012) : 16112 の化学商品.
- (8) 財務省 : 貿易統計(<http://www.customs.go.jp/toukei/info/> , 2012.6.20 現在)

3. アニリン

アニリンは、ベンゼンの1つの水素原子をアミノ基で置換した芳香族化合物であり、示性式 $C_6H_5NH_2$ で示される。なお、文中及び表中の()内の数字は出典番号を示している。

(1) 物理化学的特性等について

本物質の構造を図1、物理化学的特性等を表1に取りまとめた。

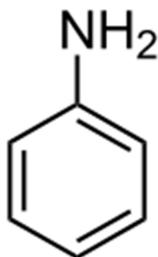


図1 アニリンの構造式

表1 アニリンの物理化学的特性等

融点	-6 (1)、-5.98 (3)	
沸点	184.1 (1)、184~186 (2)、184.4 (3)	
密度	1.0217 (20) (1)	
蒸気圧	0.68mmHg(25)(=90 Pa) (1)、0.49mmHg(25)(3)	
解離定数(pKa)	4.87 (25) (1)、4.60 (25) (3)	
オクタノール/水分配係数 (log K _{ow})	0.90 (1), (3)、0.84(4)	
水溶解度	3.6 × 10 ⁴ mg/L (25) (3)	
ヘンリー定数	2.3 × 10 ⁻⁶ atm・m ³ /mol (水溶解度 3.6 × 10 ⁴ mg/L、蒸気圧 0.68mmHg による計算結果)	
生物分解性	好氣的	良分解性(5)、BOD(NH ₃) 85%、TOC 99%、HPLC 100% (6)
	嫌氣的	生分解しない(7)
化学分解性	加水分解性	水環境中では加水分解されない(7)
生物濃縮性(BCF)	3.2(計算値)(8)	
土壌吸着性(K _{oc})	70(計算値)(9)	

アニリンの製造方法には、ニトロベンゼンを鑄鉄の微粉と塩酸で還元蒸留する、水素気流中で銅、ニッケル、白金触媒の存在下で還元する接触反応による、クロロベンゼンを銅触媒の存在下でアンモニアと加圧下に加熱する製法が知られている。(10)

アニリンは、特有の臭いがある無色透明または淡黄色の液体で、揮発性物質である。空气中に放置すると、徐々に酸化されて赤褐色になる。(11)

アニリンは、他の化学物質の原料として用いられ、主に硬質ウレタンフォームや接着剤・塗料などの原料であるジフェニルメタンジイソシアネート（MDI）の原料として使用されている。この他、染料、医薬品、農薬やゴム製品をつくる化学物質の原料に使われているほか、化審法の分解度試験において微生物による分解性を判断する標準物質とされている。（11）

（2）水環境中での挙動

平成 14（2002）年度から平成 20（2008）年度に調べられた我が国の淡水域からは、最大で、180 μ g/L のアニリンが検出され、検出下限値 0.02～0.06 μ g/L の範囲の中での検出率は、13～46% の範囲である。

ヘンリー定数を基にした水中から大気中へのアニリンの揮散について、モデル河川（水深 1 m、流速 1 m/秒、風速 3 m/秒）での半減期は 12 日、また、モデル湖水（水深 1 m、流速 0.05 m/秒、風速 0.5 m/秒）での半減期は 131 日と見積もられている。（1）

アニリンの非解離状態での土壌吸着係数 K_{oc} の値は 45 であるが、解離定数 pK_a が 4.60 であることから、酸性に傾いた環境水中では部分的にプロトン付加体の状態で存在するので、懸濁物質及び底質汚泥に吸着されやすいと推定される。（1）

水環境中に排出されたアニリンは、主に生分解により水中から除去されると推定される。なお、日射量が多い場合には、表層水中での光分解による除去の可能性もある。（1）

（3）化学物質排出把握管理促進法（化管法）による全国の排出量、化学物質審査規制法（化審法）による生産量

表 1 2005 年度～2010 年度における化管法での排出量（1、2）
（アニリン）

排出年度	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	当該事業所外	対象業種	非対象業種	家庭	移動体			
2010	3,124	7,590			1,047	554,798		1,035			10,715	1,035	11,750
2009	2,698	10,014			975	456,972		1,731			12,712	1,731	14,443
2008	2,912	10,128			1,728	581,462		1,750			13,040	1,750	14,790
2007	3,064	27,017			1,747	827,564		2,284			30,081	2,284	32,365
2006	3,130	28,437			2,277	871,824		2			31,567	2	31,569
2005	2,959	28,184			2,495	556,845		3			31,143	3	31,146

「化学物質の製造・輸入量に関する実態調査」によると、本物質の 2001 年度、2004 年度及び 2007 年度における製造（出荷）及び輸入量はそれぞれ 100,000～1,000,000 t/年未満である⁽³⁾。本物質の化審法に基づき公表された 2009 年度における製造・輸入数量は 294,943t であり⁽⁴⁾、2010 年度は 321,138 t である⁽⁵⁾。本物質の化学物質排出把握管理促進法（化管法）における製造・輸入量区分は 100 t 以上である⁽⁶⁾。

本物質の生産量、輸出入量の推移を表2に示す。

表2 生産量⁽⁷⁾、輸出入量⁽⁸⁾の推移

年	2002	2003	2004	2005	2006
生産量 (t)	237,436	259,842	261,854	324,383	377,584
輸入量 (t) ^{a)}	16,198	16,378	21,239	11,658	96
輸出量 (t) ^{a)}	-	-	-	-	-
年	2007	2008	2009	2010	2011
生産量 (t)	333,126	349,253	293,332	362,445	334,986
輸入量 (t) ^{a)}	16	32	220	1,392	1,570
輸出量 (t) ^{a)}	-	-	-	-	-

注：a) 普通貿易統計[少額貨物(1品目が20万円以下)、見本品等を除く]品別国別表より

出典)

物理化学的特性等

- (1) Lide, D.R. ed. (2012): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2012), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- (2) 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).
- (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: 35.
- (4) Hansch, C. et al. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book: 20.
- (5) 通産省公報(1993.12.28).
- (6) 厚生労働省, 経済産業省, 環境省: 化審法データベース (J-CHECK). (<http://www.safe.nite.go.jp/jcheck>, 2012.06.20 現在).
- (7) European Commission (2004): European Union Risk Assessment Report 1st Priority List Volume 50, Aniline.
- (8) U.S. Environmental Protection Agency, BCFBAF™ v.3.01.
- (9) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.00.
- (10) 化学工業日報社(2012): 16112の化学商品.
- (11) 環境省(2012): 化学物質ファクトシート - 2011年度版 - .

水環境中での挙動

- (1) 財団法人 化学物質評価研究機構, 独立行政法人 製品評価技術基盤機構 (2007) 化学物質の初期リスク評価書 No.63 アニリン). (独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構 委託事業)

化管法による全国の排出量、化審法による生産量

- (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：平成 17 年度～平成 22 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 11 条に基づき開示する個別事業所データ。
- (2) 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 3-1 全国。
- (3) 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,
(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/new_page/10/2.htm, 2005.10.2 現在). 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/jittaichousa/kakuhou18.html, 2007.4.6 現在). ; 経済産業省(2009)：化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 19 年度実績)の確報値,
(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/kakuhou19.html, 2009.12.28 現在).
- (4) 経済産業省(通商産業省) 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律(化審法)第二十五条の第二第二項の規定に基づき、同条第一項の届出に係る製造数量及び輸入数量を合計した数量として公表された値。
- (5) 経済産業省(2012)：一般化学物質等の製造・輸入数量(22 年度実績)について,
(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/H22jiseki-matome-ver2.html, 2012.3.30 現在).
- (6) 薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会 PRTR 対象物質調査会、化学物質審議会管理部会、中央環境審議会環境保健部会 PRTR 対象物質等専門委員会合同会合(第 4 回)(2008)：参考資料 1 現行化管法対象物質の有害性・暴露情報, (<http://www.env.go.jp/council/05hoken/y056-04.html>).
- (7) 経済産業省経済産業政策局調査統計部(編)(2003)：平成 14 年化学工業統計年報、(財)経済産業調査会；経済産業省経済産業政策局調査統計部(編)(2012)：平成 23 年化学工業統計年報、(財)経済産業調査会。
- (8) 財務省：貿易統計,
(<http://www.customs.go.jp/toukei/info/>, 2012.06.21 現在).

4. 2,4-ジクロロフェノール

2,4-ジクロロフェノールは、フェノールの2つの水素原子が塩素原子で置換されたフェノール化合物であり、示性式 $\text{Cl}_2\text{C}_6\text{H}_3(\text{OH})$ で示される。また、塩素原子の位置により異性体が存在する。なお、文中及び表中の()内の数字は出典番号を示している。

(1) 物理化学的特性等について

本物質の構造を図1、物理化学的特性等を表1に取りまとめた。

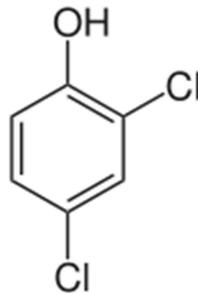


図1 2,4-ジクロロフェノールの構造図

表1 2,4-ジクロロフェノールの物理化学的特性等

融点	43 (1)、45 (2)、42~43 (3)	
沸点	210 (1)、209~210 (2)、209~210 (3)	
密度	1.38(60) (4)	
蒸気圧	0.067mmHg(25) (3)	
解離定数(pKa)	7.89(3)	
オクタノール/水分配係数 (log K _{ow})	3.23 (1)、3.06(3)、(5)	
水溶解度	5.5 × 10 ³ mg/1000g (25) (1)、4.5 × 10 ³ mg/L (20) (3)	
ヘンリー定数	3.2 × 10 ⁻⁶ atm・m ³ /mol (水溶解度 4.5 × 10 ³ mg/L、蒸気圧 0.067mmHg による計算結果)	
生物分解性	好氣的	BOD 0%、TOC 2%、HPLC 9% (6) (試験期間：4週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L)
	嫌氣的	馴化した微生物では分解し、4-クロロフェノールが主に生成する。(4)
化学分解性	加水分解性	加水分解しないと予想される(4)
生物濃縮性(BCF)	濃縮性がない又は低い(7) 7.1~69 (試験生物：コイ、試験期間：8週間、試験濃度：30μg/L)、 10~55 (試験生物：コイ、試験期間：8週間、試験濃度：3μg/L) (6)	
土壌吸着性(K _{oc})	490(計算値)(8)	

2,4-ジクロロフェノールは、塩素ガスあるいは塩化スルフリル (SO_2Cl_2) によりフェノールを塩素化することで合成される。(4)

本物質の主な用途は、一般分析(試薬)(9)、除草剤の合成中間体(10)、農薬(殺虫剤、除草剤)・染料原料(11)とされている。

(2) 水環境中での挙動

平成 14(2002)年度から平成 23(2011)年度に調べられた我が国の淡水域からは、最大で、 $0.88\mu\text{g/L}$ の 2,4-ジクロロフェノールが検出され、検出下限値 $0.001\sim 1\mu\text{g/L}$ の範囲の中での検出率は 0~7%の範囲である。

大気に放出された場合には、光化学反応により生じる水酸基(OH)ラジカルと反応し、半減期 5 日程度で分解する。2,4-ジクロロフェノールは酸性物質(pK_a 、7.8)であり、その化学形態(解離したイオンと中性分子の割合)は、環境媒体の pH によって異なる。(1)

本物質の環境中への発生源の可能性として、除草剤の 2,4-D (2,4-Dichlorophenoxyacetic acid ; 2,4-ジクロロフェノキシ酢酸)、その塩類及びそのエステル類の分解やフェノール含有水の塩素化が挙げられている。(2)

底質への吸着の割合も pH に依存する。多くの生物分解の試験により、嫌氣的にも好氣的にも微生物により分解することが知られている。(1)

水中では、光反応により生じる酸化剤(一重項酸素、水酸基ラジカル)との反応のほか、直接的に光分解される。(1)

(3) 化学物質排出把握管理促進法(化管法)による全国の排出量、化学物質審査規制法(化審法)による生産量

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。

本物質の化学物質排出把握管理促進法(化管法)における製造・輸入量区分は 1t 以上 100t 未満である⁽¹⁾。1998 年における生産量、輸入品は、それぞれ 200t、20~30t とされており、1997 年においても生産量、輸入品ともに同数量とされている⁽²⁾。

本物質の環境中への発生源の可能性として、除草剤の 2,4-D (2,4-Dichlorophenoxyacetic acid ; 2,4-ジクロロフェノキシ酢酸)の分解やフェノール含有水の塩素化が挙げられている⁽³⁾。

出典)

物理化学的特性等

- (1) Lide, D.R. ed. (2012): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2012), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- (2) 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).
- (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: 235.
- (4) OECD High Production Volume Chemicals Program(2006) : SIDS(Screening Information Data Set) Initial Assessment Report,2,4-Dichlorophenol.
- (5) Hansch, C. et al. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book: 17.
- (6) 厚生労働省, 経済産業省, 環境省 : 化審法データベース (J-CHECK).,(<http://www.safe.nite.go.jp/jcheck>, 2012.06.20 現在).
- (7) 通産省公報(1982.12.28).
- (8) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.00.
- (9) 化学工業日報社(2012) : 16112 の化学商品.
- (10) 小池順一、千室麻由子、千田千代子、西村和彦 (2004) : 川崎市内の河川、海域における化学物質濃度分布調査結果 (7) - SPEED'98 関連物質を中心にして - . 川崎市公害研究所年報. 31:48-56.
- (11) 独立行政法人 製品評価技術基盤機構 : 化学物質総合情報提供システム
(http://www.safe.nite.go.jp/japan/sougou/view/TotalSrchInput_jp.faces)

水環境中での挙動

- (1) 環境省 (2003) : 水生生物の保全に係る水質環境基準の設定について (第一次報告) .
- (2) 小池順一、千室麻由子、千田千代子、西村和彦 (2004) : 川崎市内の河川、海域における化学物質濃度分布調査結果 (7) - SPEED'98 関連物質を中心にして - . 川崎市公害研究所年報. 31:48-56.

化管法による全国の排出量、化審法による生産量

- (1) 薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会 P R T R 対象物質調査会、化学物質審議会管理部会、中央環境審議会環境保健部会 P R T R 対象物質等専門委員会合同会合 (第 4 回) (2008) : 参考資料 2 追加候補物質の有害性・暴露情報, (<http://www.env.go.jp/council/05hoken/y056-04.html>).
- (2) シーエムシー出版 (1999) : ファインケミカルマーケットデータ '99(上巻) : 76.
- (3) OECD(2006) : SIDS INITIAL ASSESSMENT PROFILE, 2,4-Dichlorophenol.