

# [19] 2,4,6-トリブロモフェノール

## 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： 2,4,6-トリブロモフェノール

(別の呼称：ブロモール)

CAS 番号：118-79-6

化審法官報告示整理番号：3-959

化管法政令番号：1-221

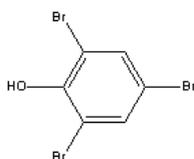
RTECS 番号：SN1225000

分子式：C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>OBr<sub>3</sub>

分子量：330.82

換算係数：1ppm=13.52mg/m<sup>3</sup>(気体、25°C)

構造式：



### (2) 物理化学的性状

本物質は柔らかい白色針状晶または柱状晶であり、臭素様の刺激臭がある<sup>1)</sup>。

融点	95.5°C <sup>2)</sup>
沸点	286°C <sup>2)</sup> 、244°C <sup>3)</sup>
密度	2.55g/cm <sup>3</sup> (20°C) <sup>2)</sup>
蒸気圧	5.72 × 10 <sup>-5</sup> mmHg (=7.62 × 10 <sup>-3</sup> Pa) (25°C) <sup>4)</sup>
分配係数(1-オクタノール/水) (logKow)	4.13 <sup>5), 6)</sup> , 3.96 <sup>6)</sup> , 4.23 <sup>6)</sup>
解離定数 (pKa)	
水溶性 (水溶解度)	70mg/L(15°C) <sup>4)</sup>

### (3) 環境運命に関する基礎的事項

2,4,6-トリブロモフェノールの分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性
<u>好氣的分解</u> (分解性が良好と判断される物質 <sup>7)</sup> ) 分解率：BOD 49%、HPLC 63% (試験期間：4週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L) <sup>8)</sup>
化学分解性
<u>OH ラジカルとの反応性 (大気中)</u> 反応速度定数：4.75 × 10 <sup>-13</sup> cm <sup>3</sup> /(分子・sec) (25°C、AOPWIN <sup>9)</sup> により計算) 半減期：5.6~56 日 (OH ラジカル濃度を 3 × 10 <sup>6</sup> ~3 × 10 <sup>5</sup> 分子/cm <sup>3</sup> <sup>10)</sup> と仮定して計算)

#### (4) 製造輸入量及び用途

##### ① 生産量・輸入量等

「化学物質の製造・輸入量に関する実態調査」によると平成 13 年度実績は 1,000～10,000 t 未満である<sup>11)</sup>。OECD に報告している生産量は 1,000～10,000t である。

##### ② 用途

本物質の主な用途は、添加剤（樹脂用）とされている<sup>11)</sup>。また、防腐剤、殺菌剤<sup>12)</sup>、2,4,6-トリブロモフェニルアリルエーテル合成の中間体、木材防腐剤<sup>13)</sup>、難燃剤の中間体、ポリジブロモフェニレンオキサイド(難燃剤)の合成<sup>14)</sup>に用いられているとされる。

#### (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：221）として指定されているほか、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一般環境等からの暴露を評価することとし、安全側に立った評価の観点から高濃度側のデータによって暴露評価を行った。データの信頼性を確認した上で最大濃度を評価に用いている。

### (1) 環境中への排出量

2,4,6-トリブロモフェノール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	0	6	0	0	480	7144					6	0	6

業種別届出量(割合)

化学工業	0	6 (100%)	0	0	480 (100%)	7144 (100%)
------	---	-------------	---	---	---------------	----------------

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0.006tと報告されており、すべて届出排出量である。これはすべて公共用水域へ排出されるとしており、その排出源は化学工業のみである。その他に下水道への移動量が0.5t届け出られている。

### (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<sup>1)</sup>。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愛媛県（水域への排出量0.006t）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	83.3
土	壌	5.6
底	質	11.1

(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。各媒体での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 水質及び底質中の存在状況

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 $\mu\text{g/L}$	<0.010	<0.010	<0.010	<0.010	0.010	0/47	全国	2002	2
	<0.35	<0.35	<0.35	<0.35	0.35	0/6	全国	1996	3
	<0.006	<0.006	<0.006	<0.006	0.006	0/4	全国	1986	4
公共用水域・海水 $\mu\text{g/L}$	<0.010	<0.010	<0.010	<0.010	0.010	0/3	全国	2002	2
	<0.35	<0.35	<0.35	<0.35	0.35	0/5	全国	1996	3
	<0.006	<0.006	<0.006	<0.006	0.006	0/7	全国	1986	4
底質(公共用水域・淡水) $\mu\text{g/g}$	<0.009	<0.009	<0.009	<0.009	0.009	0/6	全国	1996	3
	<0.0005	<0.0005	<0.0005	<0.0005	0.0005	0/4	全国	1986	4
底質(公共用水域・海水) $\mu\text{g/g}$	<0.009	<0.009	<0.009	<0.009	0.009	0/5	全国	1996	3
	<0.0005	<0.0005	<0.0005	0.0019	0.0005	1/7	全国	1986	4

## (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では  $0.010\mu\text{g/L}$  未満、同海水域では概ね  $0.010\mu\text{g/L}$  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	$0.010\mu\text{g/L}$ 未満 (2002)	$0.010\mu\text{g/L}$ 未満 (2002)
公共用水域・海水	概ね $0.010\mu\text{g/L}$ 未満 (2002)	概ね $0.010\mu\text{g/L}$ 未満 (2002)

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		○	220	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(AUG)	3		○		2)
		○	<b>220</b>	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)*	3		○		2)
	○		760	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC <sub>50</sub> GRO(AUG)	3		○		2)
	○		<b>1,900</b>	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC <sub>50</sub> GRO(RATE)*	3		○		2)
甲殻類		○	<b>≥100</b>	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21		○		2)
	○		1,310	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	LC <sub>50</sub> MOR	2		○		1)- 2120
	○		<b>2,200</b>	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC <sub>50</sub> IMM	2		○		2)
魚類	○		<b>1,500</b>	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC <sub>50</sub> MOR	4		○		2)
	○		6,250	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッド ミノー	LC <sub>50</sub> MOR	4	○			1)- 15031
	○		8,600	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッド ミノー	LC <sub>50</sub> MOR	4	○			1)-2189
その他	○		<b>2,950</b>	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	EC <sub>50</sub> GRO	60 時間	○			1)-10903

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) EC<sub>50</sub> (Median Effective Concentration) : 半数影響濃度、LC<sub>50</sub> (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

( ) 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た結果、RATE 生長速度より求めた結果

\*) : 文献2) をもとに、試験時の設定濃度を用いて0-48時間の毒性値を再計算したもの<sup>3)</sup>

なお、文献 2) の試験では界面活性作用のある分散剤が使用されていたため、信頼性は b とした。

#### (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 *Pseudokirchneriella subcapitata* に対する生長阻害の速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC<sub>50</sub>) が 1,900 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 (EC<sub>50</sub>) が 2,200 μg/L、魚類では *Oryzias latipes* に対する 96 時間半数

致死濃度 (LC<sub>50</sub>) が 1,500 µg/L、その他の生物ではテトラヒメナ属 *Tetrahymena pyriformis* に対する成長阻害の 60 時間半数影響濃度 (EC<sub>50</sub>) が 2,950 µg/L であった。急性毒性値について 3 生物群 (藻類、甲殻類及び魚類) 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 100 を用いることとし、上記の毒性値のうちその他の生物を除いた最も低い値 (魚類の 1,500 µg/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 15 µg/L が得られた。

慢性毒性値については、藻類では *Pseudokirchneriella subcapitata* に対する生長阻害の速度法による 72 時間無影響濃度 (NOEC) が 220 µg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する繁殖阻害の 21 日間無影響濃度 (NOEC) が 100 µg/L 超であった。慢性毒性値について 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、アセスメント係数として 100 を用いることとし、上記の毒性値のうち最も低い値 (甲殻類の 100 µg/L 超) にこれを適用することにより、慢性毒性値による PNEC として 1 µg/L 超が得られた。

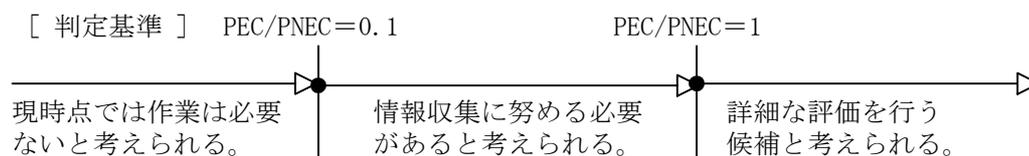
本物質の PNEC としては、甲殻類の慢性毒性値をアセスメント係数 100 で除した 1 µg/L 超を採用する。

### (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

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	0.010µg/L未満 (2002)	0.010µg/L未満 (2002)	>1 µg/L	<0.01
	公共用水域・海水	概ね0.010µg/L未満 (2002)	概ね0.010µg/L未満 (2002)		<0.01

注：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、平均濃度でみると淡水域で 0.010µg/L 未満、海水域が概ね 0.010µg/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、海水域ともに平均濃度と同様である。

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 0.01 未満となるため、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) 講談社サイエンティフィック (1985) : 有機化合物辞典.
- 2) LIDE, D.R., ed. (2002-2003) *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 83rd ed., Boca Raton, London, New York, Washington DC, CRC Press, p. 3-259.
- 3) BUDAVARI, S., ed. (1996) *The Merck Index*, 12th ed., Whitehouse Station, Merck & Co.
- 4) 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, p.228
- 5) W.BUTTE, C.FOOKEN, R.KLUSSMANN and D.SCHULLER (1981) Evaluation of Lipophilic Properties for a Series of Phenols, Using Reversed-Phase High-Performance Liquid Chromatography and High-Performance Thin-Layer Chromatography, *Journal of Chromatography*, **214** : 59-67.
- 6) HANSCH, C., LEO, A., and HOEKMAN, D. (1995) *Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants*, Washington DC, ACS Professional Reference Book, p.16.
- 7) 通産省公報 (1981.12.25)
- 8) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ、0492
- 9) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v1.91
- 10) 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, p.xiv.
- 11) 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.
- 12) SRI[HSDB]
- 13) ASHFORD, R.D. *Ashford's Dictionary of Industrial Chemicals*. London, England: Wavelength Publications Ltd., 1994. 902.
- 14) Gerhartz, W. (exec ed.). *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. 5th ed.Vol A1: Deerfield Beach, FL: VCH Publishers, 1985 to Present.,p. VA4 (85) 412. [Hazardous Substances Data Bank]

### (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 (2003) : 平成 13 年度要調査項目測定結果
- 3) 環境庁環境保健部環境安全課(1998) : 平成 9 年版化学物質と環境
- 4) 環境庁環境保健部保健調査室(1987) : 昭和 62 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」

- 2120 : Kopperman, H.L., R.M. Carlson, and R. Caple (1974) : Aqueous Chlorination and Ozonation Studies. I. Structure-Toxicity Correlations of Phenolic Compounds to *Daphnia magna*. Chem.-Biol.Interact. 9(4):245-251.
- 2189 : Phipps, G.L., G.W. Holcombe, and J.T. Fiandt (1981) : Acute Toxicity of Phenol and Substituted Phenols to the Fathead Minnow. Bull.Environ.Contam.Toxicol.26(5):585-593.
- 10903 : Schultz, T.W., and G.W. Riggan (1985) : Predictive Correlations for the Toxicity of Alkyl- and Halogen-Substituted Phenols. Toxicol.Lett. 25 : 47-54.
- 15031 : Broderius, S.J., M.D. Kahl, and M.D. Hoglund (1995) : Use of Joint Toxic Response to Define the Primary Mode of Toxic Action for Diverse Industrial Organic Chemicals. Environ.Toxicol.Chem.14(9):1591-1605.
- 15251 : Carlson, R.M., and R. Caple (1977) : Chemical/Biological Implications of Using Chlorine and Ozone for Disinfection. EPA-600/3-77-066, U.S.EPA, Duluth, Mn:88 P.(U.S.NTIS PB-270694).
- 2) 環境庁 (1999) : 平成 10 年度 生態影響試験実施事業報告
- 3) (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