

[6] p-アミノフェノール

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：p-アミノフェノール

(別の呼称：4-アミノヒドロキシベンゼン、4-ヒドロキシアニリン)

CAS 番号：123-30-8

化審法官報告示整理番号：3-675

化管法政令番号：2-6

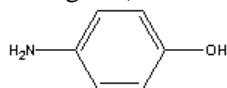
RTECS 番号：SJ5075000

分子式：C₆H₇NO

分子量：109.13

換算係数：1ppm=4.46mg/m³(気体、25°C)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色板状晶である¹⁾。

融点	187.5°C ²⁾ 、189.6~190.2°C ³⁾
沸点	284°C(分解する) ³⁾
密度	
蒸気圧	7.5×10 ⁻² mmHg(=1.0×10 ¹ Pa)(20°C) ⁴⁾ 、 4.0×10 ⁻⁵ mmHg(=5.33×10 ⁻³ Pa)(25°C) ⁵⁾
分配係数(1-オクタノール/水)(logKow)	0.04 ⁶⁾
解離定数(pKa)	pKa ₁ =5.48(25°C) ⁷⁾ 、pKa ₂ =10.46 ⁸⁾
水溶性(水溶解度)	16g/L(20°C) ⁴⁾

(3) 環境運命に関する基本的事項

p-アミノ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>
分解率：BOD 6% (試験期間：4 週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L) ⁹⁾
分解率：COD 87% (試験期間：5 日間、被験物質濃度：200mg/L(COD 換算)、活性汚泥濃度：100mg/L(馴致した活性汚泥)) ¹⁰⁾
<u>嫌氣的分解</u>
生分解は観察されなかった (試験期間：8 週間、活性汚泥濃度：10%(嫌気性汚泥)) ¹¹⁾
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：7.42×10 ⁻¹¹ cm ³ /(分子・sec) (25°C、AOPWIN ¹²⁾ により計算)
半減期：0.86~8.6 時間 (OH ラジカル濃度を 3×10 ⁶ ~3×10 ⁵ 分子/cm ³ ¹³⁾ と仮定し

て計算) 加水分解性 環境中では期待できない ¹⁴⁾ 生物濃縮性（高濃縮性ではないと判断される物質 ¹⁵⁾ 生物濃縮係数(BCF)：3.2 (BCFWIN ¹⁶⁾ 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 年における国内生産量は 400t とされている¹⁷⁾。OECD に報告している生産量は 1,000～10,000t である。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 10t である。

② 用途

本物質の主な用途は、医薬中間体(アセトアミノフェン・解熱鎮痛剤)、硫化染料の中間体、ゴム用老化防止剤、毛皮用酸化染料、写真現像薬とされている¹⁷⁾。

(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二種指定化学物質（政令番号：6）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基本的には一般環境等から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暴露評価を行った。

(1) 環境中への排出量

p-アミノフェノール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

PRTR データが得られなかったため、Level III Fugacity Model¹⁾による媒体別分配割合予測の結果²⁾を表 2.1 に示す。

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

排出先	大気	水	土壌	大気/水/土壌
排出速度 (kg/時間)	1000	1000	1000	1000 (各々)
大気	0.1	0.0	0.0	0.0
水	27.4	99.8	21.6	45.4
土壌	72.4	0.0	78.4	54.5
底質	0.01	0.2	0.0	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 2.2 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	文献
公共用水域・淡水 $\mu\text{g/L}$	<0.8	<0.8	<0.8	<0.8	0.8	0/1	大阪府	1986	3
公共用水域・海水 $\mu\text{g/L}$	<0.8	<0.8	<0.8	<0.8	0.8	0/8	全国	1986	3
底質(公共用水域・淡水) $\mu\text{g/g}$	<0.05	<0.05	<0.05	<0.05	0.05	0/1	大阪府	1986	3
底質(公共用水域・海水) $\mu\text{g/g}$	<0.05	<0.05	<0.05	<0.05	0.05	0/8	全国	1986	3

(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 2.3 のように整理した。評価に耐えられるデータは得られなかった。

表 2.3 公共用水域濃度

媒 体	平 均	最 大 値
水 質		
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。
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) 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		○	58.1	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO (RATE)*	3		○		2)
		○	62.5	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO (AUG)	3		○		2)
		○	169	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (AUG)	3		○		2)
		○	>1,000	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (RATE)*	3		○		2)
甲殻類		○	105	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC MOR	21		○		2)
		○	240	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	○			1)-846
		○	315	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	○			2)
魚類		○	64	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	NOEC GRO	41 (孵化 後 30)		○		3)
		○	925	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4	○			2)
		○	1,200	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	ニジマス	LC ₅₀ MOR	4			○	1)-11597
その他	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

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) 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

() 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、試験時の初期実測濃度を用いて 0-72 時間の毒性値を再計算したもの⁴⁾

なお本物質は文献 2) による藻類生長阻害試験の条件下では不安定な物質と考えられたため、藻類に対する毒性値の信頼性を b とした。また、同文献のオオミジンコ繁殖試験では繁殖への影響は認められなかったが、試験に用いた親ミジンコの死亡に差が認められたため、これにより NOEC が算定されている。

(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 (EC₅₀) が1,000µg/L超、甲殻類で *Daphnia magna* に対する遊泳阻害の48時間半数影響濃度 (EC₅₀) が240 µg/L、魚類では *Oryzias latipes* に対する96時間半数致死濃度 (LC₅₀) が925 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) 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小さい値 (甲殻類の240 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2.4 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58.1µg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する死亡の21日間無影響濃度 (NOEC) が105 µg/L、魚類では *Oryzias latipes* に対する41日間(孵化後30日間)無影響濃度 (NOEC) が64 µg/Lであった。慢性毒性値について3生物群 (藻類、甲殻類及び魚類) 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10を用いることとし、上記の毒性値のうち最も小さい値 (藻類の58.1 µg/L) 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5.8µg/Lが得られた。

本物質のPNECとしては、甲殻類の急性毒性値をアセスメント係数100で除した2.4µg/Lを採用する。

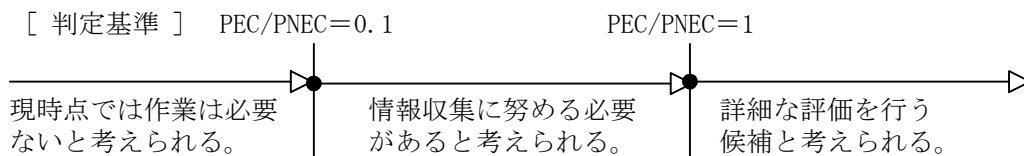
(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

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	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。	2.4 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。



現地では評価に耐える環境中濃度の情報が得られなかったため、実測データに基づく生態リスクの判定はできない。

本物質の化管法の製造・輸入量区分は10tであるが、平成13年における国内生産量は400tとの報告もある。また、本物質は水溶解度が高く、水域中に排出された場合はその大部分が水域中に留まることが予測されている。したがって、本物質については水環境中への放出の可能性等に関する知見の充実を図った上で、その結果により環境中濃度の把握を行う必要性について検討する必要があると考えられる。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 化学大辞典編集委員会 (1963) : 化学大辞典 (縮刷版) 、1、共立出版、pp.290-291.
- 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. 3-252.
- 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.244.
- 5) DUNN, S.A. (1954), *J. Amer. Chem. Soc.*, **76**: 6191-2. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 6) HANSCH, C., LEO, A., and HOEKMAN, D. (1995) *Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants*, Washington DC, ACS Professional Reference Book, p.20.
- 7) PERRIN, D.D. (1972) Dissociation Constants of Organic Bases in aqueous Solution. IUPAC Chemical Data Series: Supplement 1972. Butterworth, London. [HSDB]
- 8) SERJEANT, E.P. and DEMPSEY, B. (1972) Ionisation Constants of Organic Acids in Aqueous Solution. International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). IUPAC Chemical Data Series No. 23. New York, New York: Pergamon Press, Inc. 216. [HSDB]
- 9) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ
- 10) PITTER, P. (1976) Determination of Biological Degradability of Organic Substances. *Wat. Res.*, **10**: 231-235.
- 11) SHELTON, D.R. and TIEDJE, J.M. (1981) Development of Tests for Determining Anaerobic Biodegradation Potential. East Lansing, MI: Mich. State Univ., Dept Crop Soil Sci., USEPA 560/5-81-013 (NTIS PB84-166495).
- 12) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWINTM v1.91
- 13) 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.
- 14) LYMAN, W.J., et al (1990) *Handbook of Chemical Property Estimation Methods*. Washington, DC: Amer. Chem. Soc., pp.7-4, 7-5.
- 15) 通産省公報 (1997.12.26)
- 16) U.S. Environmental Protection Agency, BCFWINTM v2.15
- 17) 化学工業日報社(2003) : 14303 の化学商品

(2) 暴露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPIWINTM v3.11
- 2) (独) 国立環境研究所 : 平成 15 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書
- 3) 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」

846 : Kuhn, 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.

11597 : Hodson, P.V. (1985): A Comparison of the Acute Toxicity of Chemicals to Fish, Rats and Mice. J.Appl.Toxicol. 5(4):220-226.

2) 環境庁(1997):平成 8 年度 生態影響試験実施事業報告

3) 環境省(2001):平成 12 年度 生態影響試験実施事業報告

4) (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