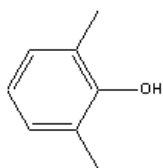


## [8] 2,6-キシレノール

### 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： 2,6-キシレノール  
(別の呼称：2,6-ジメチルフェノール)  
CAS 番号：576-26-1  
化審法官報告示整理番号：3-521  
化管法政令番号：1-62  
RTECS 番号：ZE6125000  
分子式：C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>O  
分子量：122.17  
換算係数：1ppm=4.99mg/m<sup>3</sup>(気体、25°C)  
構造式：



#### (2) 物理化学的性状

本物質は葉片あるいは針状晶である<sup>1)</sup>。

融点	45.7°C <sup>2)</sup>
沸点	201°C <sup>2)</sup> 、203°C <sup>3)</sup>
密度	
蒸気圧	0.158mmHg(=2.11×10 <sup>1</sup> Pa) (25°C、外挿値) <sup>4)</sup> 、 0.274mmHg(=3.65×10 <sup>1</sup> Pa) (25°C) <sup>5)</sup>
分配係数(1-オクタノール/水)(logKow)	2.36 <sup>6)</sup>
解離定数(pKa)	10.59(25°C) <sup>7)</sup>
水溶性(水溶解性)	6.05g/L(25°C) <sup>4)</sup> 、 <sup>8)</sup> 、6.23g/L(25°C) <sup>8)</sup>

#### (3) 環境運命に関する基本的事項

2,6-キシレ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 好氣的分解(難分解性と判断される物質 <sup>9)</sup> ) 分解率：BOD 2%、HPLC 2% (試験期間：4週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L) <sup>10)</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：6.59×10 <sup>-11</sup> cm <sup>3</sup> /(分子・sec) (25°C、測定値) <sup>11)</sup> 半減期：0.97~9.7時間 (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>12)</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

化学物質排出把握管理促進法（化管法）の製造・輸入量区分は10,000tである。OECDに報告している生産量は1,000～10,000tである。平成10年度の生産・輸入量は11,962t（製造11,954t 輸入8t）である<sup>13)</sup>。

##### ② 用途

本物質の主な用途は、耐熱性樹脂、抗酸化剤、防カビ剤とされている<sup>14)</sup>。

#### (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：62）として指定されているほか、有害大気汚染物質に該当する可能性がある物質及び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

2,6-キシレ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	5461	0	0	0	27	70023	0				5461	0	5461

業種別届出量(割合)

プラスチック製品製造業	4200 (76.9%)	0	0	0	0	0
化学工業	1001 (18.3%)	0	0	0	27 (100%)	69893 (99.8%)
非鉄金属製造業	260 (4.8%)	0	0	0	0	130 (0.2%)
石油製品・石炭製品製造業	0	0	0	0	0	0

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5tと報告されている。これはすべて届出排出量であり、その排出先は大気である。その他に下水道への移動量が0.03t届け出られている。主な排出源は、プラスチック製品製造業（76.9%）及び化学工業（18.3%）である。なお、この他に下水道への移動量も届けられている。

### (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栃木県（大気への排出量4t）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	12.4
水	域	3.9
土	壌	83.6
底	質	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。

## (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。

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	文献
公共用水域・淡水	μg/L		<0.020 <0.010	0.026 0.10	0.020 0.010	4/6 3/6	埼玉県 埼玉県	1996 1996	2 2 <sup>1)</sup>
公共用水域・海水	μg/L								
底質(公共用水域・淡水)	μg/g								
底質(公共用水域・海水)	μg/g								

注：1) 発生源近傍。

## (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。公共用水域の淡水域では検出最大値 0.026μg/L の報告があったが、全国レベルの暴露評価には不十分であった。同海水域では、環境中濃度の知見が得られなかった。

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	データは得られなかった	データは得られなかった。(0.026μg/Lの報告がある(1996))
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

### 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	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
甲殻類	○		<u>500</u>	<i>Artemia salina</i>	アルテミア属	LC <sub>50</sub> MOR	1		○		1)-16436
	○		11,200	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC <sub>50</sub> IMM	2		○		1)-2120
	○		11,200	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	LC <sub>50</sub> MOR	2			○	1)-7458
	○		14,300	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC <sub>50</sub> IMM	1		○		1)-3379
	○		16,500	<i>Crangon septemspinosa</i>	エビジャコ科	LT <sub>50</sub> MOR	4		○		1)-5810
魚類	○		<u>6,700</u>	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッドミノ	LC <sub>50</sub> MOR	2	○			1)-2189
その他	○		<u>1,500</u>	<i>Strongylocentrotus droebachiensis</i>	キタムラサキウニと同属	EC <sub>50</sub> MULT	4		○		1)-11059

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、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、LT<sub>50</sub> (Mean Survival Time) : 半数生存時間

影響内容) IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、MULT (Multiple effects reported as one result) : 死亡、発生など複合的な影響

#### (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、甲殻類では *Artemia salina* に対する 24 時間半数致死濃度 (LC<sub>50</sub>) が 500μg/L、魚類では *Pimephales promelas* に対する 48 時間半数致死濃度 (LC<sub>50</sub>) が 6,700μg/L、その他の生物ではキタムラサキウニと同属 *Strongylocentrotus droebachiensis* に対する死亡、発生など複合的な影響の 96 時間半数影響濃度 (EC<sub>50</sub>) が 1,500μg/L であった。急性毒性値について 2 生物群 (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 1,000 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 (甲殻類の 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 0.5μg/L が得られた。

慢性毒性値については、信頼できるデータが得られなかった。

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 1,000 で除した 0.5 μg/L を採用する。

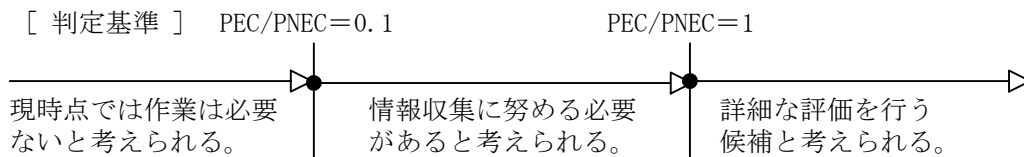
## (3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

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	データは得られなかった	データは得られなかった。(0.026 $\mu$ g/Lの報告がある(1996))	0.5 $\mu$ g/L	(0.052)
	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) 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。



現時点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、生態リスクの判定はできない。

OECD に報告している生産量は 1,000～10,000t で、化管法の製造・輸入量区分は 10,000t で、届出事業所からの環境中への排出は大気中のみであるが、下水道を経由した水域への排出の可能性もある。水中での生分解性は低く、PNEC 値は 0.5 $\mu$ g/L と小さいが、得られた生態毒性に関する知見は限られている。したがって、生産量の推移、環境中への排出の可能性等に関する情報を収集しつつ、試験の実施を通じて生態毒性に関する知見の充実を図る必要がある。

## 4. 引用文献等

## (1) 物質に関する基本的事項

- 1) 東京化学同人 (1989) : 化学大辞典.
- 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. 3-255.
- 3) VERSCHUEREN, K., ed. (1996) *Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals*, 3rd ed., New York, Albany, Bonn, Boston, Detroit, London, Madrid, Melbourne, Mexico City, Paris, San Francisco, Singapore, Tokyo, Toronto, Van Nostrand Reinhold, p.1904.
- 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.402.
- 5) DAUBERT, T.E. and DANNER, R.P. (1989) *Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation*. Washington, D.C.: Taylor and Francis. [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.44.
- 7) SERJEANT, E.P. and DEMPSEY, B. (1979) Ionisation constants of organic acids in aqueous solution. IUPAC Chem Data Ser No.23. NY,NY: Pergamon pp. 989. [HSDB]
- 8) YALKOWSKY, S.H. and HE, Y. (2003) *Handbook of Aqueous Solubility Data*, Boca Raton, London, New York, Washington DC, CRC Press, p.502.
- 9) 経済産業公報 (2002.3.26)
- 10) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ、1227B
- 11) KWOK, E.S.C. and ATKINSON, R. (1994). [U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v1.91]
- 12) 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, pp.xiv.
- 13) 化学物質安全性 (ハザード) 評価シート、[http://qsar.cerij.or.jp/SHEET/F2001\\_48.pdf](http://qsar.cerij.or.jp/SHEET/F2001_48.pdf)
- 14) 化学工業日報社(2003) : 14303 の化学商品

## (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) 埼玉県環境生活部環境政策課編 (1997) : 1997 年版環境白書

## (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.
- 3379 : Devillers, J. (1988) : Acute Toxicity of Cresols, Xylenols, and Trimethylphenols to *Daphnia magna* Straus 1820. *Sci. Total Environ.* 76(1):79-83.
- 5810 : McLeese, D.W., V. Zitko, and M.R. Peterson (1979) : Structure-Lethality Relationships for Phenols, Anilines and Other Aromatic Compounds in Shrimp and Clams. *Chemosphere* 8(2):53-57.
- 7458 : Carlson, R.M., H.L. Kopperman, R. Caple, and R.E. Carlson (1975) : Structure-Activity Relationships Applied. In: *Int. Joint Comm. Symp. Structure-Activity Correlations in Studies of Toxicity and Bioconcentration with Aquatic Organisms*, March 11-13, 1975, Canada Center for Inland Waters, Burlington, Ontario, Can.:57-72.
- 11059 : Falk-Petersen, I.B., E. Kjorsvik, S. Lonning, A.M. Naley, and L.K. Sydnes (1985) : Toxic Effects of Hydroxylated Aromatic Hydrocarbons on Marine Embryos. *Sarsia* 70 : 11-16.
- 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).
- 16436 : Barahona, M.V., and S. Sanchez-Fortun (1996) : Comparative Sensitivity of Three Age Classes of *Artemia salina* Larvae to Several Phenolic Compounds. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 56(2):271-278.