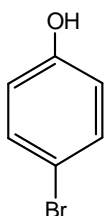


## [6] *p*-プロモフェノール

### 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： *p*-プロモフェノール  
 (別の呼称：4-プロモフェノール)  
 CAS 番号：106-41-2  
 化審法官報公示整理番号：3-896(プロムフェノール)  
 化管法政令番号：2-67  
 RTECS 番号：SJ7960000  
 分子式：C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>BrO  
 分子量：173.01  
 換算係数：1 ppm = 7.08 mg/m<sup>3</sup> (気体、25 )  
 構造式：



#### (2) 物理化学的性状

本物質は四角な複ピラミッド形の結晶（クロロホルム又はエーテルから再結晶）である<sup>1)</sup>。

融点	66.4 <sup>2)</sup> 、64 <sup>3),4)</sup> 、63.5 <sup>5)</sup>
沸点	238 (760 mmHg) <sup>2),4)</sup> 、238 <sup>3),5)</sup>
密度	1.84 g/cm <sup>3</sup> (15 ) <sup>2),5)</sup>
蒸気圧	0.0115 mmHg (=1.54 Pa) (25 ) <sup>6)</sup>
分配係数(1-オクタノール/水) (log Kow)	2.59 <sup>7),4)</sup> 、2.95 <sup>5)</sup>
解離定数(pKa)	9.37 (25 ) <sup>2)</sup> 、9.17(25 ) <sup>4)</sup>
水溶性(水溶解度)	1.40 × 10 <sup>4</sup> mg/L <sup>8)</sup> 、1.42 × 10 <sup>4</sup> mg/L (15 ) <sup>5)</sup>

#### (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	分解率：BOD 0%、TOC 2%、HPLC 0% (試験期間：2週間、被験物質濃度：100 mg/L、活性汚泥濃度：30 mg/L) <sup>9)</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：9.7 × 10 <sup>-12</sup> cm <sup>3</sup> /(分子・sec) (AOPWIN <sup>10)</sup> により計算) 半減期：6.6 ~ 66 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>11)</sup> と仮定して計算)

生物濃縮性（濃縮性がない又は低いと判断される物質<sup>12)</sup>）

生物濃縮係数(BCF)：

8.0～12（試験生物：コイ、試験期間：6週間、試験濃度：30 µg/L）<sup>9)</sup>

<4.8～(25)（試験生物：コイ、試験期間：6週間、試験濃度：3 µg/L）<sup>9)</sup>

土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc)：430（PCKOCWIN<sup>13)</sup>により計算）

#### （4）製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

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 である<sup>14)</sup>。

用途

本物質の主な用途は、殺菌剤とされている<sup>1)</sup>。しかし、調査した範囲において農薬原体としての登録はされていない<sup>15)</sup>。

#### （5）環境施策上の位置付け

本物質は化学物質審査規制法第三種監視化学物質（通し番号:50）及び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：67）に指定されている。また、本物質は水環境保全に向けた取組のための要調査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。

### (2) 媒体別分配割合の予測

化管法に基づく排出量及び下水道への移動量が得られなかったため、Mackay-Type Level III Fugacity モデル<sup>1)</sup>により媒体別分配割合の予測を行った。結果を表 2.1 に示す。

表 2.1 Level 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	0.2	0.0	0.0	0.0
水域	2.6	95.5	2.3	4.4
土壌	97.1	1.4	97.5	95.4
底質	0.1	3.1	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と

### (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。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 2.2 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	測定年度	文献
公共用水域・淡水 μg/L	<0.07	<0.07	<0.07	<0.07	0.07	0/6	全国	1996	2)
公共用水域・海水 μg/L	<0.07	<0.07	<0.07	<0.07	0.07	0/5	全国	1996	2)
底質(公共用水域・淡水) μg/g	<0.011	<0.011	<0.011	<0.011	0.011	0/6	全国	1996	2)
底質(公共用水域・海水) μg/g	<0.011	<0.011	<0.011	<0.011	0.011	0/5	全国	1996	2)

### (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 2.3 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、海水域とも 0.07 µg/L 未満程度となった。

表 2.3 公共用水域濃度

水 域	平 均	最 大 値
淡 水	0.07 µg/L 未満程度 (1996)	0.07 µg/L 未満程度 (1996)
海 水	0.07 µg/L 未満程度 (1996)	0.07 µg/L 未満程度 (1996)

注：1) 環境中濃度での（ ）内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

### 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	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			2,000*	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(AUG)	3	A	B* <sup>1</sup>	2)
			<b>2,000</b>	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)	3	A	A	3)* <sup>2</sup>
			4,710*	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC <sub>50</sub> GRO(AUG)	3	A	B* <sup>1</sup>	2)
			<b>9,190</b>	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC <sub>50</sub> GRO(RATE)	3	A	A	3)* <sup>2</sup>
甲殻類			<b>297</b>	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	B* <sup>3</sup>	A	2)
			<b>4,180</b>	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC <sub>50</sub> IMM	2	A	A	2)
			5,950	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	LC <sub>50</sub> MOR	2	C	C	1)-2120
魚類			5,190	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC <sub>50</sub> MOR	14	A	C	2)
			<b>8,730</b>	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC <sub>50</sub> MOR	4	A	A	2)
その他			<b>36,100</b>	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	IGC <sub>50</sub> GRO	60 時間	B	B	1)-10903

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

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、

IGC<sub>50</sub>（Median Inhibitory Growth Concentration）：半数増殖影響濃度

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る方法（面積法）

RATE：生長速度より求める方法（速度法）

\*1 原則として速度法から求めた値を採用しているため、採用の可能性は「B」としPNEC 導出の根拠としては用いない

\*2 文献2)をもとに、試験時の設定濃度を用いて速度法により0-48時間の毒性値を再計算したものを掲載

\*3 試験溶液濃度が極端に減少している期間があるため試験の信頼性を「B」とした

評価の結果、採用可能とされた知見のうち、生物群ごとに急性毒性値及び慢性毒性値のそ

れぞれについて最も小さい毒性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

環境庁<sup>2)</sup>は OECD テストガイドライン No.201 (1984) に準拠し、緑藻類 *Pseudokirchneriella subcapitata* (旧 *Selenastrum capricornutum*) の生長阻害試験を GLP 試験として実施した。試験は密閉系で行われ、設定試験濃度は 0、2.00、3.20、5.00、7.80、12.0、19.0、30.0 mg/L (公比 1.6) であった。被験物質の実測濃度は試験終了時においても設定濃度の 94~112% が維持されていたため、毒性値の算出には設定濃度を用いた。0~48 時間の結果に基づき、速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC<sub>50</sub>) は 9,190 µg/L、72 時間無影響濃度 (NOEC) は 2,000 µg/L であった<sup>3)</sup>。なお面積法による EC<sub>50</sub> 値はこれより小さかったが、本初期評価では原則として生長速度から求めた値を採用している。

#### 2) 甲殻類

環境庁<sup>2)</sup>は OECD テストガイドライン No. 202 (1984) 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。試験は閉鎖系・止水式で行われ、設定試験濃度は 0、3.00、5.00、7.00、10.0、12.0、18.0、30.0 mg/L (公比 1.5) であった。試験用水には脱塩素水道水 (硬度 63 mg/L as CaCO<sub>3</sub>) が用いられた。被験物質の実測濃度は試験終了時においても設定濃度の 98~101% であった。48 時間半数影響濃度 (EC<sub>50</sub>) は設定濃度に基づき 4,180 µg/L であった。

また、環境庁<sup>2)</sup>は OECD テストガイドライン No. 211 (1997 年 4 月提案) 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。試験は閉鎖系・半止水式 (2 日毎換水、12 日目以降毎日換水) で行われた。設定試験濃度は 0、0.080、0.200、0.560、1.50、4.00 mg/L (公比 2.7) であり、試験用水には脱塩素水道水 (硬度 63 mg/L as CaCO<sub>3</sub>) が用いられた。被験物質の実測濃度は換水前に設定濃度の <1~93% であったため、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。21 日間無影響濃度 (NOEC) は 297 µg/L であった。試験溶液濃度が極端に減少している期間があるため試験の信頼性を「B」とした。

#### 3) 魚類

環境庁<sup>2)</sup>は OECD テストガイドライン No. 203 (1992) 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。試験は閉鎖系・半止水式 (24 時間毎換水) で行われ、設定試験濃度は 0、1.00、2.00、4.00、8.00、16.00 mg/L (公比 2.0) であった。試験用水には脱塩素水道水 (硬度 63 mg/L as CaCO<sub>3</sub>) が用いられた。被験物質の実測濃度は換水前 (24 時間後) においても設定濃度の 86~98% を維持しており、設定濃度に基づく 96 時間半数致死濃度 (LC<sub>50</sub>) は 8,730 µg/L であった。

#### 4) その他

Schultz と Riggin<sup>1)10903</sup> はテトラヒメナ属 *Tetrahymena pyriformis* の急性毒性試験を実施した。試験は止水式で行われ、設定試験濃度区は対照区+6 濃度区であった。試験溶液の調製には、助剤としてジメチルスルホキシド (DMSO) 0.75% 未満が用いられた。60 時間半数増殖影響濃

度 (IGC<sub>50</sub>) は 36,100 µg/L であった。

## (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>	生長阻害 ; 72 時間 EC <sub>50</sub>	9,190 µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	遊泳阻害 ; 48 時間 EC <sub>50</sub>	4,180 µg/L
魚類	<i>Oryzias latipes</i>	96 時間 LC <sub>50</sub>	8,730 µg/L
その他	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	60 時間 IGC <sub>50</sub>	36,100 µg/L

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

3 つの毒性値のうち最も小さい値 (甲殻類の 4,180 µg/L) 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 42 µg/L が得られた。

### 慢性毒性値

藻類	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	生長阻害 ; 72 時間 NOEC	2,000 µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	繁殖阻害 ; 21 日間 NOEC	297 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 つの毒性値のうち小さい方の値 (甲殻類の 297 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 3.0 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 3.0 µg/L を採用する。

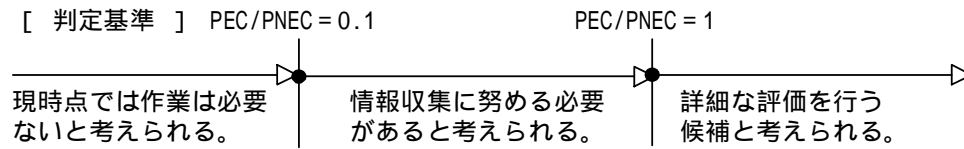
## (3) 生態リスクの初期評価結果

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	0.07 µg/L未満程度 (1996)	0.07 µg/L未満程度 (1996)	3.0	<0.02
公共用水域・海水	0.07 µg/L未満程度 (1996)	0.07 µg/L未満程度 (1996)	µg/L	<0.02

注 : 1) 環境中濃度での ( ) 内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



本物質の公共用水域における濃度は、平均濃度で見ると淡水域、海水域ともに  $0.07 \mu\text{g/L}$  未満程度であり、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った。

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  $0.02$  未満となるため、現時点では作業は必要ないと考えられる。



## 4 . 引用文献等

## (1) 物質に関する基本的事項

- 1) 化学大辞典編集委員 (1963): 化学大辞典(縮刷版)8 共立出版: 143.
- 2) Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- 3) O'Neil, M.J. ed. (2001): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co.,Inc. (CD-ROM)
- 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: 173
- 5) Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).
- 6) Parsons, G.H. et al. (1971): Effect of 4-Substitution on the Thermodynamics of Hydration of Phenol and the Phenoxide Anion, *Journal of Chemical Society*, B: 533-536.
- 7) Fujita, T., Iwasa, J. & Hansch, C., (1964): A New Substituent Constant,  $\pi$ , Derived from Partition Coefficients, *Journal of the American Chemical Society*, 86: 5175-5180
- 8) 通商産業省基礎産業局化学品安全課 監修、(財)化学品検査協会 編集 (1992): 化審法の既存化学物質安全性点検データ集、(社)日本化学物質安全・情報センター: 3-73.
- 9) 独立行政法人製品評価技術基盤機構: 既存化学物質安全性点検データ、([http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz\\_start.html](http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html), 2005.12.19 現在).
- 10) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.91.
- 11) 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.
- 12) 通産省公報 (1980.12.25).
- 13) U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWIN™ v.1.66.
- 14) 環境省 PRTR インフォメーション広場 第二種指定化学物質総括表、([http://www.env.go.jp/chemi/prtr/archive/target\\_chemi/02.html](http://www.env.go.jp/chemi/prtr/archive/target_chemi/02.html), 2007.8.14 現在).
- 15) (独)農薬検査所: 登録・失効農薬情報、(<http://www.acis.go.jp/toroku/index.htm>, 2006.3.27 現在).

## (2) ばく露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPI Suite™ v.3.12.
- 2) 環境庁環境保健部環境安全課 (1998): 平成 8 年度化学物質環境汚染実態調査.

## (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.
- 10903 : Schultz, T.W., and G.W. Riggin (1985): Predictive Correlations for the Toxicity of Alkyl- and Halogen-Substituted Phenols. Toxicol.Lett. 25:47-54.
- 2) : 環境庁 (1998) : 平成 9 年度 生態影響試験
- 3) : (独)国立環境研究所 (2006) : 平成 17 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書