

[5] 4,4'-ビス(2-スルホスチリル)ビフェニル-2 ナトリウム

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：4,4'-ビス(2-スルホスチリル)ビフェニル-2 ナトリウム

(別の呼称：フルオレスセント 351)

CAS 番号：27344-41-8

化審法官報公示整理番号：

化管法政令番号：

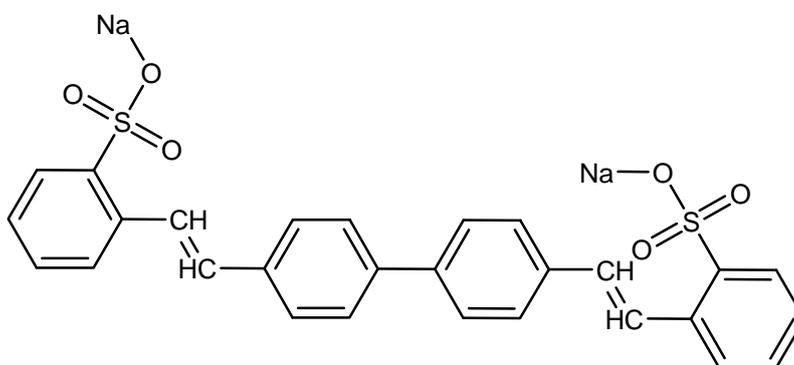
RTECS 番号：DB5044530

分子式： $C_{28}H_{20}Na_2O_6S_2$

分子量：562.56

換算係数：1 ppm = 23.01 mg/m<sup>3</sup> (気体、25°C)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は黄色の粉末である<sup>1)</sup>。

融点	>300°C <sup>1)</sup>
沸点	
密度	1.49g/cm <sup>3</sup> <sup>1)</sup>
蒸気圧	<5×10 <sup>-18</sup> mmHg(= <7×10 <sup>-16</sup> Pa)(25°C) <sup>1)</sup>
分配係数 (1-オクタノール/水) (log Kow)	-2.32 (pH=6.8、25°C) <sup>1)</sup>
解離定数 (pKa)	-2.5~-3.0 <sup>1)</sup>
水溶性 (水溶解度)	1.76×10 <sup>4</sup> mg/L(20°C) <sup>1)</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

蛍光増白剤 (FWAs) は、一般に OECD テストガイドライン 301 に準拠した分解度試験では易分解でない<sup>1)</sup>。4,4'-ジスチリルビフェニル誘導体の光分解生成物質の OECD テストガイドライン 301F に準拠した分解度試験では、易分解であった<sup>1)</sup>。

## 化学分解性

OH ラジカルとの反応性 (大気中)

反応速度定数：  $120 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$  (*cis*-体、AOPWIN<sup>2)</sup>により計算)

半減期：0.53 時間～5.3 時間 (OH ラジカル濃度を  $3 \times 10^6 \sim 3 \times 10^5 \text{ 分子/cm}^3$ <sup>3)</sup> と仮定し計算)

反応速度定数：  $140 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$  (*trans*-体、AOPWIN<sup>2)</sup>により計算)

半減期：0.48 時間～4.8 時間 (OH ラジカル濃度を  $3 \times 10^6 \sim 3 \times 10^5 \text{ 分子/cm}^3$ <sup>3)</sup> と仮定し計算)

オゾンとの反応性 (大気中)

反応速度定数：  $25 \times 10^{-17} \text{ cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$  (*cis*-体、AOPWIN<sup>2)</sup>により計算)

半減期：0.25 時間～1.5 時間 (オゾン濃度を  $3 \times 10^{12} \sim 5 \times 10^{11} \text{ 分子/cm}^3$ <sup>3)</sup> と仮定し計算)

反応速度定数：  $50 \times 10^{-17} \text{ cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$  (*trans*-体、AOPWIN<sup>2)</sup>により計算)

半減期：0.13 時間～0.76 時間 (オゾン濃度を  $3 \times 10^{12} \sim 5 \times 10^{11} \text{ 分子/cm}^3$ <sup>3)</sup> と仮定し計算)

加水分解性

半減期： >1 年 (pH4～9)<sup>1)</sup>

## 生物濃縮性

生物濃縮係数(BCF)：3.2 (BCFBAF<sup>4)</sup> により計算)

## 土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc)：125<sup>1)</sup>

## (4) 製造輸入量及び用途

## ① 生産量・輸入量等

2006 年度における国内流通量は約 300t とされている<sup>5)</sup>。

## ② 用途

本物質の主な用途は、蛍光増白剤である<sup>1)</sup>。本物質は、我が国で市販されている衣料用粉末合成洗剤に最大 0.4%まで配合されている<sup>5)</sup>。

## (5) 環境施策上の位置付け

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。予測結果を表 2.1 に示す。

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

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	0.0	0.0	0.0	0.0
水域	7.8	99.1	7.0	10.7
土壌	92.2	0.0	92.9	89.2
底質	0.1	0.9	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の

### (3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の環境中等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 <sup>b)</sup>	検出率	調査地域	測定年度	文献
公共用水域・淡水 <sup>d)</sup> μg/L	<b>&lt;0.5</b>	<0.5	<0.5	<b>2.3</b>	0.5	10/54	全国	2006	2)
	0.059 <sup>c)</sup>	0.33 <sup>c)</sup>	0.002 <sup>c)</sup>	4.0 <sup>c)</sup>	0.001 <sup>c)</sup>	20/20	全国	2004	3)
	0.58 <sup>c)</sup>	0.84 <sup>c)</sup>	0.043 <sup>c)</sup>	1.9 <sup>c)</sup>	0.0016	14/14	埼玉県	2002	4) <sup>e)</sup>
公共用水域・海水 <sup>f)</sup> μg/L	<b>&lt;0.5</b>	<0.5	<0.5	<b>&lt;0.5</b>	0.5	0/17	全国	2006	2)
	0.047 <sup>c)</sup>	0.077 <sup>c)</sup>	0.0089 <sup>c)</sup>	0.29 <sup>c)</sup>	0.0004 <sup>c)</sup>	12/12	東京湾	1998	5)
底質(公共用水域・淡水) μg/g									
底質(公共用水域・海水) μg/g									

## 5 4,4'-ビス(2-スルホスチリル)ビフェニル-2 ナトリウム

- 注：a) 最大値または幾何平均値の欄の**太字**で示した数字は、ばく露の推定に用いた値を示す  
 b) 検出下限値の欄の斜体で示されている値は、定量下限値として報告されている値を示す  
 c) 4,4'-ビス(2-スルホスチリル)ビフェニル (DSBP) 濃度の本物質濃度換算値  
 d) 1997～1998年に行われた調査で最大6.9 µg/L (本物質換算値) の報告がある<sup>5)</sup>  
 e) HPLCによる測定結果  
 f) 2002～2003年に行われた調査において、海水の表層水で0.0074～0.34 µg/L (本物質換算値) の報告がある<sup>6)</sup>

### (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では 2.3 µg/L 程度、海水域では 0.5 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	0.5 µg/L 未満程度 (2006)	<b>2.3 µg/L 程度(2006)</b>
海 水	0.5 µg/L 未満程度 (2006)	0.5 µg/L 未満程度 (2006)

- 注：1) ( ) 内の数値は測定年度を示す  
 2) 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		○	<b>1,870</b>	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)	3	A	A	3)* <sup>1</sup>
	○		<b>&gt;28,600</b>	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC <sub>50</sub> GRO(RATE)	3	A	A	3)* <sup>1</sup>
甲殻類		○	<b>1,840</b>	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	A	A	2)
	○		<b>20,900</b>	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC <sub>50</sub> IMM	2	A	A	2)
	○		40,330	<i>Ceriodaphnia cf. dubia</i>	ニセネコゼミジンコと同属	EC <sub>50</sub> IMM	2	B	B	1)-20672
魚類			100,000* <sup>2</sup>	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	NOEC GRO	14	A	C	2)
			>100,000* <sup>2</sup>	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC <sub>50</sub> MOR	14	A	C	2)
	○		<b>&gt;100,000*<sup>2</sup></b>	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC <sub>50</sub> MOR	4	A	A	2)
	○		126,000	<i>Ictalurus punctatus</i>	アメリカナマズ	LC <sub>50</sub> MOR	4	D	C	1)-5513
	○		130,000	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	ニジマス	LC <sub>50</sub> MOR	4	D	C	1)-5513
その他	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—

**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

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: 毒性値の算出方法

RATE: 生長速度より求める方法 (速度法)

\*1 文献 2) をもとに、試験時の実測濃度 (幾何平均値) を用いて速度法により 0-72 時間の毒性値を再計算したものを掲載

\*2 限度試験 (毒性値を求めるのではなく、定められた濃度において毒性の有無を調べる試験) より得られた値

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* (旧名 *Selenastrum capricornutum*) の生長阻害試験を GLP 試験として実施した。設定試験濃度は 0 (対照区)、0.5、1.2、2.9、6.9、17、40mg/L (公比 2.4) であった。被験物質の実測濃度は、試験開始時と試験終了時において、それぞれ設定濃度の 68.2~88.3%、33.0~59.6% であり、毒性値の算出には実測濃度 (試験開始時と終了時の幾何平均) が用いられた。速度法による 72 時間半数影響濃度(EC<sub>50</sub>)は 28,600µg/L 超、72 時間無影響濃度(NOEC)は 1,870µg/L であった<sup>3)</sup>。

### 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。試験は止水式で行われ、設定試験濃度区は 0 (対照区)、8.0、14.0、26.0、47.0、84.0、151.0mg/L (公比 1.8) であった。試験には Elendt M4 飼育水が用いられた。被験物質の実測濃度は、試験開始時、試験終了時において、それぞれ設定濃度の 30.5~95.1%、69.1~84.4% であり、毒性値の算出には実測濃度 (試験開始時と終了時の幾何平均) が用いられた。48 時間半数影響濃度(EC<sub>50</sub>)は 20,900µg/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. 202(1984)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。試験は半止水式 (週 3 回換水) で行われ、設定試験濃度は 0 (対照区)、1.3、2.4、4.3、7.7、13.9、25.0mg/L (公比 1.8) であった。試験には Elendt M4 飼育水が用いられた。被験物質の実測濃度は、換水後、換水前において、それぞれ設定濃度の 77.8~97.0%、62.1~82.2% であり、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。繁殖阻害 (産仔数) に関する 21 日間無影響濃度(NOEC)は 1,840µg/L であった。

### 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。試験は半止水式(48 時間後換水)で行われ、設定試験濃度は 0 (対照区)、100.0mg/L (限度試験) であった。試験には脱塩素水道水 (硬度 21.8mg/L、CaCO<sub>3</sub> 換算) が用いられた。被験物質の実測濃度は、試験期間を通して設定濃度の 91.2~99.2% を維持しており、毒性値の算出には設定濃度が用いられた。被験物質ばく露による毒性症状や死亡は観察されず、96 時間半数致死濃度(LC<sub>50</sub>)は 100,000µg/L 超とされた。

## (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>	28,600µg/L 超
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	遊泳阻害 ; 48 時間 EC <sub>50</sub>	20,900µg/L
魚類	<i>Oryzias latipes</i>	96 時間 LC <sub>50</sub>	100,000µg/L 超

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

限度試験から得られた魚類の毒性値を除いた、小さい方の値 (甲殻類の 20,900µg/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 210µg/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	1,870µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	繁殖阻害 ; 21 日間 NOEC	1,840µg/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 つの毒性値の小さい方の値 (甲殻類の 1,840µg/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 18µg/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 18µg/L を採用する。

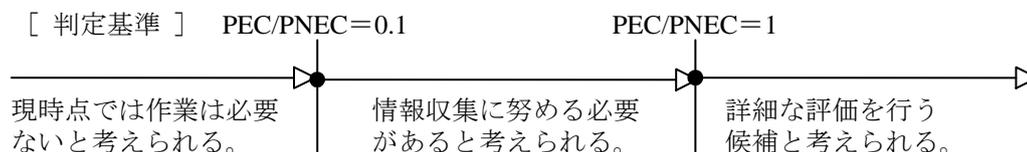
## (3) 生態リスクの初期評価結果

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	0.5µg/L未満程度(2006)	2.3µg/L程度(2006)	18 µg/L	0.1
公共用水域・海水	0.5µg/L未満程度(2006)	0.5µg/L未満程度(2006)		<0.03

注 : 1) 水質中濃度の( ) 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、平均濃度でみると淡水域、海水域とも 0.5µg/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、淡水域で 2.3µg/L 程度、海水域では平均濃度と同様に 0.5µg/L 未満程度であった。

予測環境中濃度(PEC)と予測無影響濃度(PNEC)の比は、淡水域で 0.1、海水域では 0.03 未満となるため、情報収集に努める必要があると考えられる。

#### 5 4,4'-ビス(2-スルホステリル)ビフェニル-2 ナトリウム

本物質については、魚類の慢性毒性試験を実施し、アセスメント係数を下げた上で再度評価を行うことが望ましいと考えられる。

## 4. 引用文献等

### (1) 物質に関する基本的事項

- 1) HERA Project(2003): Human & Environmental Risk Assessment ingredients of European household cleaning products, Fluorescent Brightener FWA-5, DRAFT, Version November, 2003.( <http://www.heraproject.com/RiskAssessment.cfm>, 2009.12.15 現在).
- 2) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.92.
- 3) Howard, P.H. et al. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xiv.
- 4) U.S. Environmental Protection Agency, BCFBAF™ v.3.00.
- 5) 日本石鹼洗剤工業会 (2007) : 蛍光増白剤のヒト健康影響と環境影響に関するリスク評価の結果について.

### (2) ばく露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPI Suite™ v.4.00.
- 2) 環境省水・大気環境局水環境課(2008) : 平成 18 年度要調査項目測定結果.
- 3) 真名垣聡, 小嶋早和香, 原田新, 中田典秀, 田中宏明, 高田秀重 (2005) : 高速液体クロマトグラフィー質量分析計による直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩および分解産物の分析方法と環境試料への応用. 水環境学会誌. 28(10):621-628.
- 4) Motoyuki Takahashi, Kiyoshi Kawamura (2007) : Simple Measurement of 4,4'-bis(2-sulfostyryl)-biphenyl in River Water by Fluorescence Analysis and Its Application as an Indicator of Domestic Wastewater Contamination. Water Air Soil Pollut. 180:39-49.
- 5) Yuko Hayashi, Satoshi Managaki, Hideshige Takada (2002) : Fluorescent Whitening Agents in Tokyo Bay and Adjacent Rivers: Their Application as Anthropogenic Molecular Markers in Coastal Environments. Environ. Sci. Technol. 36(16):3556-3563.
- 6) Satoshi Managaki, Hideshige Takada, Dong-Myung Kim, Toshihiro Horiguchi, Hiroaki Shiraishi (2006) : Three-dimensional distributions of sewage markers in Tokyo Bay water—fluorescent whitening agents (FWAs). Marine Pollution Bulletin. 52(3):281–292.

### (3) 生態リスクの初期評価

- 1) U.S.EPA 「AQUIRE」  
5513 : Keplinger, M.L., O.E. Fancher, F.L. Lyman, and J.C. Calandra (1974): Toxicologic Studies of Four Fluorescent Whitening Agents. Toxicol.Appl.Pharmacol. 27(3):494-506.  
20672 : Warne, M.S.J., and A.D. Schiffko (1999): Toxicity of Laundry Detergent Components to a Freshwater Cladoceran and Their Contribution to Detergent Toxicity. Ecotoxicol.Environ.Saf. 44(2):196-206.
- 2) 環境庁(1997) ; 平成 8 年度 生態影響試験
- 3) (独)国立環境研究所(2009) : 平成 20 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書