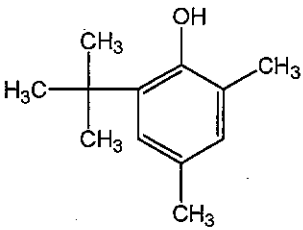


藻類生長阻害試験結果報告書

1. 一般的事項

新規化学物質等の名称 (IUPAC 命名法による)	6-tert-ブチル-2,4-キシレノール		
別名			
C A S 番号	1879-09-0		
構造式又は示性式 (いずれも不明な場合は、 その製法の概要)			
分子量	178.28		
試験に供した新規 化学物質の純度 (%)	99.1 %		
試験に供した新規 化学物質のロット番号	AGM01		
不純物の名称及び含有率	不明		
蒸気圧	0.0448 mmHg (25°C)		
対水溶解度	29.6 mg/L (25°C)		
ヘンリー定数	$1.76 \times 10^{-6} \text{ atm} \cdot \text{m}^3/\text{mole}$		
pKa 解離定数	12 (20°C)		
1-オクタノール/水分配係数	4.52		
融点	22.3°C		
沸点	249°C		
常温における性状	淡黄色透明液体		
安定性	通常の実験条件においては安定		
溶媒に対する溶解度等	溶媒	溶解度	溶媒中の安定性
	不明	不明	不明

2. 試験溶液の被験物質濃度の分析方法

項目	方法
分析方法	<p>試験溶液の一定量を、UV検出器を備えた高速液体クロマトグラフ (HPLC) に注入し、クロマトグラムと同時にピーク高さ (カウント数) をデータ処理装置から求める。このピーク高さを用い、標準液の検量線から試験溶液中の被験物質の濃度を求める。</p> <p>〔分析手順〕</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 定量条件で HPLC を作動し、装置を安定させる。 2. 検量線を作成する。 3. 前処理を行った試験溶液をHPLCに注入してクロマトグラムと同時にピーク高さを得る。 4. 検量線により濃度を求め、希釈率を補正し、試験溶液の被験物質濃度を算出する。
前処理法	<p>試験溶液分析の前処理：</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 被験物質の揮散による減少を防ぐため、試験溶液の採取時に等量のアセトニトリルを添加し混合する。 2. 検量線の被験物質濃度範囲内に入るように試験溶液の一定量を取り、アセトニトリル/純水 (50/50) で希釈する。
定量条件	<p>分析に用いた機器：</p> <p>高速液体クロマトグラフ (L-6200型 日立製作所) UV検出器 (L-4200型 日立製作所)</p> <p>測定条件：</p> <p>分離カラム : Mightysil RP-18, 250 mm×4.6φ 恒温槽温度 : 40℃ 溶離液 : アセトニトリル/純水 (65/35) 流量 : 1.0 mL/min 検出波長 : UV 220 nm 注入量 : 50 μL</p>

3. 試験材料及び方法

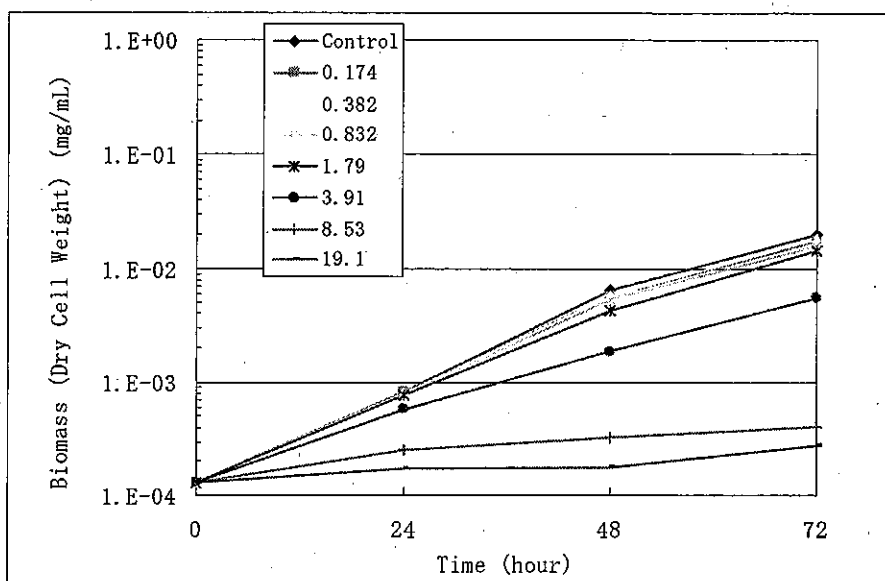
項目		内容	
試験生物	種 (学名・株名)	学名 : <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> 株名 : ATCC 22662 株	
	入手先	American Type Culture Collection	
	対照物質への感受性 (EC ₅₀) (対照物質名)	2.43 mg/L (これまでの値 E ₁ C ₅₀ 2.40, 2.38 mg/L、n=2) であった。 3, 5-ジクロロフェノール, 試薬特級	
前培養	前培養の期間	2007年2月24日～2007年2月27日	
	培地名	OECD 培地	
	環境条件 (温度、光強度)	23±2℃、60～120 μE/m ² /s	
試験条件	試験容器	共栓付 300 mL 容ガラス製三角フラスコ (ヘッドスペース:250 mL)	
	培地名	OECD 培地	
	暴露期間	2007年2月27日～2007年3月2日	
	試験濃度 (設定値)	対照区, 0.20, 0.43, 0.93, 2.0, 4.3, 9.3, 20 mg/L (公比 2.2)	
	初期生物量 (細胞濃度)	< 0.5 mg/L 以下 (0.5 × 10 ⁴ cells/mL)	
	連数	試験濃度区	3 連
		対照区	6 連
	試験溶液量	100 mL/容器	
	助剤	助剤の有無	無
		種類	—
		濃度	—
		助剤対照区の連数	—
	培養方式	振とう培養 (100 rpm)	
水温又は培養温度	培養温度 : 22.6 ~ 22.8 °C		
照明 (光強度・時間等)	平均 69 (65~81) μE/m ² /s・連続照射		
結果の算出 方法	速度法	Logit 法	

4. 試験結果及び考察

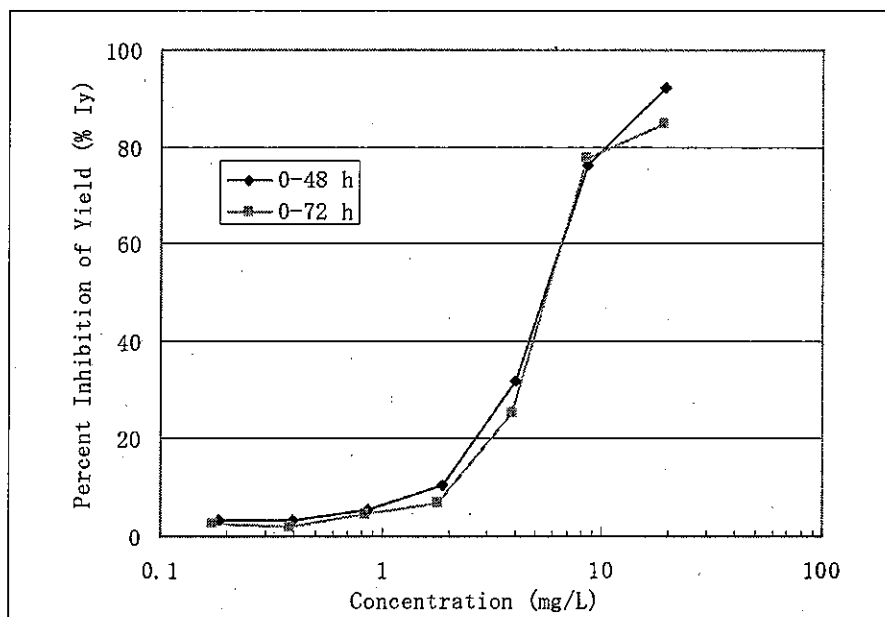
項目	内容
毒性値	0-48hE _r C ₅₀ = 5.4 mg/L
	0-72hE _r C ₅₀ = 6.0 mg/L
	NOEC (Rate 0-48) = 0.40 mg/L
	NOEC (Rate 0-72) = 0.38 mg/L
試験濃度	1. 設定値 2. 実測値
考察及び特記事項	<p>被験物質の対水溶解度が 29.6 mg/L(25℃)であることから、実験開始前に、フラスコ攪拌法により被験物質の試験培地に対する溶解度を調べたが、培地に分散状態となり分離が困難で(文献値の融点 22.3℃よりも低い 15℃において操作した場合も同等)、適切な溶解度は測定できなかった。試験時には、文献値の 29.6 mg/L(25℃)を基に、この溶解度以下で試験原液の調製を行い、被験物質の揮散による減少があることから密閉系とした。</p> <p>暴露期間中の被験物質濃度の変動は、揮散による減少の可能性もあったものの、分析誤差の範囲と考えられたため、暴露開始時と 48 時間目、および暴露開始時と暴露終了時の算術平均値を求め各影響濃度を算出した。</p> <p>試験の有効性については、化審法テストガイドラインから逸脱した点もなく、また試験の有効性基準を満たしたことから、有効であると判断した。</p>

5. 藻類生長曲線及び濃度－生長阻害率曲線

藻類の生長曲線

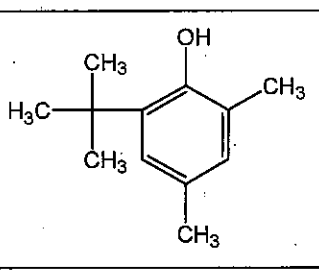


被験物質濃度－生長阻害率曲線 (速度法)



ミジンコ急性遊泳阻害試験結果報告書

1. 一般的事項

新規化学物質等の名称 (IUPAC 命名法による)	6-tert-ブチル-2,4-キシレノール		
別名			
C A S 番号	1879-09-0		
構造式又は示性式 (いずれも不明な場合は、 その製法の概要)			
分子重量	178.28		
試験に供した新規 化学物質の純度 (%)	99.1 %		
試験に供した新規 化学物質のロット番号	AGM01		
不純物の名称及び含有率	不明		
蒸気圧	0.0448 mmHg (25°C)		
対水溶解度	29.6 mg/L (25°C)		
ヘンリー一定数	$1.76 \times 10^{-6} \text{ atm} \cdot \text{m}^3/\text{mole}$		
pKa 解離定数	12 (20°C)		
1-オクタノール/水分配係数	4.52		
融点	22.3°C		
沸点	249°C		
常温における性状	淡黄色透明液体		
安定性	通常の取扱い条件においては安定		
溶媒に対する溶解度等	溶媒	溶解度	溶媒中の安定性
	不明	不明	不明

2. 試験溶液の被験物質濃度の分析方法

項目	方法
分析方法	<p>試験溶液の一定量を、UV検出器を備えた高速液体クロマトグラフ (HPLC) に注入し、クロマトグラムと同時にピーク高さ (カウント数) をデータ処理装置から求める。このピーク高さを用い、標準液の検量線から試験溶液中の被験物質の濃度を求める。</p> <p>[分析手順]</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 定量条件で HPLC を作動し、装置を安定させる。 2. 検量線を作成する。 3. 前処理を行った試験溶液をHPLCに注入してクロマトグラムと同時にピーク高さを得る。 4. 検量線により濃度を求め、希釈率を補正し、試験溶液の被験物質濃度を算出する。
前処理法	<p>試験溶液分析の前処理：</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 被験物質の揮散による減少を防ぐため、試験溶液の採取時に等量のアセトニトリルを添加し混合する。 2. 検量線の被験物質濃度範囲内に入るように試験溶液の一定量をとり、アセトニトリル/純水 (50/50) で希釈する。
定量条件	<p>分析に用いた機器：</p> <p>高速液体クロマトグラフ (L-6200型 日立製作所) UV検出器 (L-4200型 日立製作所)</p> <p>測定条件：</p> <p>分離カラム : Mightysil RP-18, 250 mm×4.6φ 恒温槽温度 : 40℃ 溶離液 : アセトニトリル/ 純水 (65/35) 流量 : 1.0 mL/min 検出波長 : UV 220 nm 注入量 : 50 μL</p>

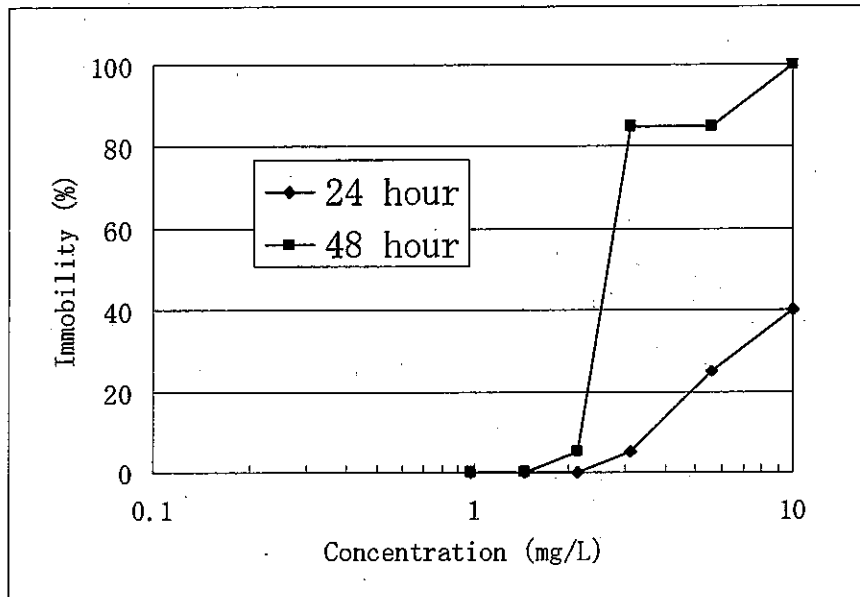
3. 試験材料及び方法

項目		内容	
試験生物	種 (学名・系統・時間齢)	学名: <i>Daphnia magna</i> 系統: 当施設で継代飼育 時間齢: 生後 24 時間以内齢	
	入手先	環境省国立環境研究所	
	対照物質への感受性 (EC ₅₀) (対照物質名)	0.71 mg/L (これまでの EC ₅₀ mean=0.88 mg/L, S.D.=0.21 mg/L, n=17) 重クロム酸カリウム、試薬特級	
飼育	飼育水の種類	Elendt M4 人工調製水	
	環境条件 (水温、明暗周期)	20±1°C、16 時間明/8 時間暗	
試験条件	試験容器	110 mL ガラス製スクリー管瓶(密閉容器)	
	試験用水	種類	Elendt M4 人工調製水
		硬度	247 mg/L (CaCO ₃ 換算値)
		pH	7.9
	暴露期間	2007 年 2 月 26 日～2007 年 2 月 28 日	
	試験濃度 (設定値)	対照区, 1.0, 1.5, 2.2, 3.2, 5.6, 10 mg/L 公比 1.8(ただし, 1.0 ~ 3.2 mg/L は 1.5 の変則公比)	
	供試数	20 頭/試験区	
	連数	試験濃度区	4 連
		対照区	4 連
	試験溶液量	100 mL/容器	
	助剤	助剤の有無	無
		種類	—
		濃度	—
		助剤対照区の連数	—
	試験方式	止水式	
	換水又は流水条件	該当しない	
水温	20.1~20.4°C		
結果の算出 方法	EC ₅₀	Logit 法	

4. 試験結果及び考察

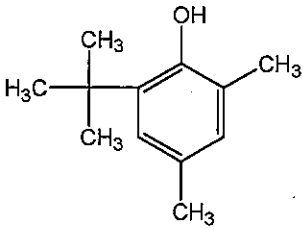
項目	内容
毒性値	48hEC ₅₀ = 2.9 mg/L
試験濃度	1. 設定値 2. 実測値
考察及び特記事 項	<p>被験物質の対水溶解度が 29.6 mg/L(25℃)であることから、実験開始前に、フラスコ攪拌法により被験物質の試験培地に対する溶解度を調べたが、培地に分散状態となり分離が困難で(文献値の融点 22.3℃よりも低い 15℃において操作した場合も同等)、適切な溶解度は測定できなかった。試験時には、文献値である 29.6 mg/L(25℃)を基に、この溶解度以下の濃度で試験原液の調製を行い、被験物質の揮散による減少があることから、密閉系とした。</p> <p>暴露期間中の被験物質濃度の変動は分析の測定誤差と考えられたため、暴露開始時と暴露終了時の算術平均値を算出し、各影響濃度を算出した。</p> <p>試験の有効性については、化審法テストガイドラインから逸脱した点もなく、また試験の有効性基準を満たしたことから、有効であると判断した。</p>

5. ミジンコの濃度-遊泳阻害率曲線
被験物質濃度-遊泳阻害率曲線



魚類急性毒性試験結果報告書

1. 一般的事項

新規化学物質等の名称 (IUPAC 命名法による)	6-tert-ブチル-2,4-キシレノール		
別名			
C A S 番号	1879-09-0		
構造式又は示性式 (いずれも不明な場合は、 その製法の概要)			
分子量	178.28		
試験に供した新規 化学物質の純度 (%)	99.1 %		
試験に供した新規 化学物質のロット番号	AGM01		
不純物の名称及び含有率	不明		
蒸気圧	0.0448 mmHg (25°C)		
対水溶解度	29.6 mg/L (25°C)		
ヘンリー定数	$1.76 \times 10^{-6} \text{ atm} \cdot \text{m}^3/\text{mole}$		
pKa 解離定数	12 (20°C)		
1-オクタノール/水分配係数	4.52		
融点	22.3°C		
沸点	249°C		
常温における性状	淡黄色透明液体		
安定性	通常の実験条件においては安定		
溶媒に対する溶解度等	溶媒	溶解度	溶媒中の安定性
	不明	不明	不明

2. 試験溶液の被験物質濃度の分析方法

項目	方法
分析方法	<p>試験溶液の一定量を、UV検出器を備えた高速液体クロマトグラフ (HPLC) に注入し、クロマトグラムと同時にピーク高さ (カウント数) をデータ処理装置から求める。このピーク高さを用い、標準液の検量線から試験溶液中の被験物質の濃度を求める。</p> <p>[分析手順]</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 定量条件で HPLC を作動し、装置を安定させる。 2. 検量線を作成する。 3. 前処理を行った試験溶液をHPLCに注入してクロマトグラムと同時にピーク高さを得る。 4. 検量線により濃度を求め、希釈率を補正し、試験溶液の被験物質濃度を算出する。
前処理法	<p>試験溶液分析の前処理：</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 被験物質の揮散による減少を防ぐため、試験溶液の採取時に等量のアセトニトリルを添加し混合する。 2. 検量線の被験物質濃度範囲内に入るように試験溶液の一定量を取り、アセトニトリル/純水 (50/50) で希釈する。
定量条件	<p>分析に用いた機器：</p> <p>高速液体クロマトグラフ (L-6200型 日立製作所) UV検出器 (L-4200型 日立製作所)</p> <p>測定条件：</p> <p>分離カラム : Mightysil RP-18, 250 mm×4.6φ 恒温槽温度 : 40℃ 溶離液 : アセトニトリル/純水 (65/35) 流量 : 1.0 mL/min 検出波長 : UV 220 nm 注入量 : 50 μL</p>

3. 試験材料及び方法

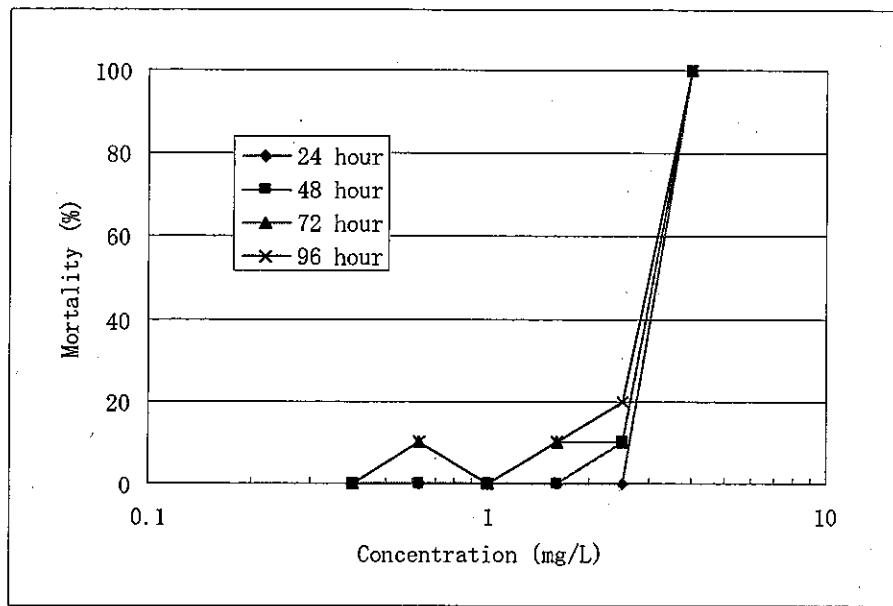
項目		内容	
試験生物	種 (和名・学名・系統)	和名：ヒメダカ 学名：Oryzias latipes	
	入手先	三協ラボサービスから入手したものを自家繁殖	
	対照物質への感受性 (LC ₅₀) (対照物質名)	0.21 mg/L (無水物換算) (これまでの LC ₅₀ mean=0.30mg/L, S.D.=0.11 mg/L, n=25) 硫酸銅 (II) 五水和物、試薬特級	
じゅん化	じゅん化期間	2006年12月25日～2007年3月12日	
	飼育水の種類	脱塩素水	
	じゅん化前の薬浴の有無	無	
	環境条件 (水温、明暗周期)	24±1℃、16時間明/8時間暗	
	餌料 (種類・量・頻度)	テトラミン (テトラ社)・体重の2%/日	
試験条件	試験容器		5 L 容ネジロビン
	試験用水	種類	脱塩素水
		硬度	26 mg/L (CaCO ₃ 換算値)
		pH	7.9
	暴露期間		2007年3月12日～2007年3月16日
	試験濃度 (設定値)		対照区, 0.40, 0.63, 1.0, 1.6, 2.5, 4.0 mg/L (公比1.6)
	供試数		10 尾/試験容器
	試験溶液量		5 L/試験容器
	助剤	助剤の有無	無
		種類	—
		濃度	—
	試験方式		半止水式
	換水又は流水条件		48時間目で試験溶液の全量を換水
	水温		24.0℃
	溶存酸素濃度 (DO)		飽和濃度の60%以上 (7.5～8.2 mg/L)
明暗周期		16時間明/8時間暗	
結果の算出方法	LC ₅₀	Logit 法	

4. 試験結果及び考察

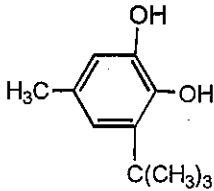
項目	内容
毒性値	96hLC ₅₀ = 2.5 mg/L
試験濃度	1. 設定値 2. 実測値
考察及び特記事項	<p>被験物質の対水溶解度が 29.6 mg/L (25℃) であることから、実験開始前に、フラスコ攪拌法により被験物質の試験用水に対する溶解度を調べたが、試験用水に分散状態となり分離が困難で（文献値の融点 22.3℃ よりも低い 15℃ において操作した場合も同等）、適切な溶解度は測定できなかった。そのため、試験時には文献値である 29.6 mg/L (25℃) を基に、この溶解度以下の濃度で試験原液の調製を行い、被験物質の揮散による減少があることから密閉系とした。</p> <p>暴露期間中の被験物質濃度の変動は揮散による減少と考えられたため、時間加重平均値（暴露開始時と 48 時間換水前、および 48 時間換水後と暴露終了時の、それぞれの対数平均値を算出しそれらの算術平均値）を求め、各影響濃度を算出した。</p> <p>試験の有効性については、化審法テストガイドラインから逸脱した点もなく、また試験の有効性基準を満たしたことから、有効であると判断した。</p>

5. 魚類の濃度-死亡率曲線

被験物質濃度-死亡率曲線



SIDS INITIAL ASSESSMENT PROFILE

CAS No.	1879-09-0
Chemical Name	2,4-Xylenol, 6-t-butyl-
Structural Formula	
CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS	
<p>A potential hazard to man due to a low no-effect-level in repeated dose animal studies is identified, but exposure is considered to be low.</p> <p>Unless further information on exposure in other member countries presents evidence to the contrary, it is currently considered of low potential risk and low priority for further work.</p>	
SHORT SUMMARY WHICH SUPPORTS THE REASONS FOR THE CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS	
<p>6-tert-Butyl-2,4-xylenol is not produced in Japan, and there are no imported volumes. However, this chemical is registered in TSCA and EINECS. This chemical is stable in acidic, neutral and alkaline solutions, and is considered as "not readily biodegradable".</p> <p>For the environment, various NOEC and LC₅₀ values were gained from test results; LC₅₀ = 4.4 mg/l (acute fish); EC₅₀ = 5.6 mg/l (acute daphnia); EC₅₀ = 3.6 mg/l (algae); NOEC = 1.7 mg/l (algae); NOEC = 0.32 mg/l (long-term daphnia reproduction). Therefore, the chemical is considered to be moderately toxic to fish and daphnids and algae. The lowest chronic toxicity result, 21 d-NOEC (reproduction) of <i>Daphnia magna</i> (0.32 mg/l), was adopted for the calculation of the PNEC, applying an assessment factor of 100. Thus the PNEC of 6-tert-butyl-2,4-xylenol is 0.0032 mg/l. Since the chemical is not produced in member countries, PEC/PNEC ratio could not be calculated. Therefore, it is considered to be currently of low potential risk for the environment.</p> <p>The chemical showed no genotoxic effects in bacteria and in a chromosomal aberration test <i>in vitro</i>.</p> <p>In a combined repeat dose and reproductive/developmental toxicity screening test, there were no clinical observations attributed to the administration of the test substance in parental animals. However, increases of liver and kidney weights were observed at the middle and highest dose level (30 and 150 mg/kg/day). In addition, histopathological examination showed swelling of liver cells and degeneration and protein cast of the proximal renal tubules in the groups. From the view point of reproductive/developmental end-points, only a few females at the highest dose lost their litters during lactation period. Other effects (e.g. mating, fertility and estrous cycle) were not observed. Therefore, the NOEL was 6 mg/kg/day for repeated dose toxicity and 30 mg/kg/day for reproductive toxicity.</p> <p>For human health, daily intake of the chemical could not be estimated, because of the lack of exposure scenarios. However, the health risk is presumably low due to its exposure situation.</p>	
NATURE OF FURTHER WORK RECOMMENDED	

FULL SIDS SUMMARY

6-tert-Butyl-2, 4-xyleneol

CAS NO: 1879-09-0		SPECIES	PROTOCOL	RESULTS
PHYSICAL-CHEMICAL				
2.1	Melting Point			21 – 22 °C
2.2	Boiling Point			247.8 – 248.3 °C
2.3	Density			No data available
2.4	Vapour Pressure		OECD TG 104	1.7 Pa at 25 °C
2.5	Partition Coefficient (Log Pow)		OECD TG 107	4.08 at 25 °C
2.6 A.	Water Solubility		OECD TG 105	150 mg/l at 25 °C
B.	pH			No data available.
	pKa			No data available
2.12	Oxidation: Reduction Potential			No data available.
ENVIRONMENTAL FATE AND PATHWAY				
3.1.1	Photodegradation		Calculation	Half-life: 2.16 years (direct photolysis in water)
3.1.2	Stability in Water		OECD TG 111	Stable at pH 4.0, 7.0 and 9.0
3.2	Monitoring Data			No data available
3.3	Transport and Distribution		Calculated (Fugacity Level III)	100% released to water, In Air 0.72% In Water 40.70% In Soil 30.70% In Sediment 27.88%
3.5	Biodegradation		OECD TG 301C	Not readily biodegradable: 3-5% (BOD) in 28 days, 0-4% (GC) in 28 days
3.6	Bioaccumulation			No data available
ECOTOXICOLOGY				
4.1	Acute/Prolonged Toxicity to Fish	<i>Oryzias latipes</i>	OECD TG 203	LC ₅₀ (24hr): 6.0 mg/L LC ₅₀ (96hr): 4.4 mg/L
4.2	Acute Toxicity to Aquatic Invertebrates (<i>Daphnia</i>)	<i>Daphnia magna</i>	OECD TG 202	EC ₅₀ (24hr): 5.6 mg/l
4.3	Toxicity to Aquatic Plants e.g. Algae	<i>Selenastrum capricornutum</i>	OECD TG 201	EC ₅₀ (72hr): 3.6 mg/l NOEC: 1.7 mg/l
4.5.2	Chronic Toxicity to Aquatic Invertebrates (<i>Daphnia</i>)	<i>Daphnia magna</i>	OECD TG 202	EC ₅₀ (21d, Immobility): 2.5 mg/l EC ₅₀ (21d, Reproduction): 0.60 mg/l NOEC (21d, Repro): 0.32 mg/l
4.6.1	Toxicity to Soil Dwelling Organisms			No data available.
4.6.2	Toxicity to Terrestrial Plants			No data available.

A chromosomal aberration test in line with Guidelines for Screening Mutagenicity Testing of Chemicals (Japan) and OECD Test Guideline 473 was conducted using cultured Chinese Hamster lung (CHL/IU) cells. This study was well controlled and regarded as a key study.

No structural chromosomal aberrations or polyploidy were recognized up to a maximum concentration of 3.5 mg/ml under conditions of both continuous treatment and short-term treatment with or without an exogenous metabolic activation system (MHW, 1998).

In vivo Studies

No data are available on *in vivo* genotoxic effects.

3.1.4 Toxicity for Reproduction

6-tert-Butyl-2,4-xyleneol was studied for oral toxicity in rats according to the OECD combined repeated dose and reproductive/developmental toxicity test [OECD TG 422] at doses of 0, 6, 30 and 150 mg/kg/day.

Test substance showed no effects on mating, fertility and estrous cycle. In observation at delivery, three females given 150 mg/kg lost their litters during lactation period, and tendency to decrease of viability index of pups at Day 4 after birth was observed in 150 mg/kg group. The results described above led to a conclusion that effects of reproductive toxicity study were considered to appear at 150 mg/kg/day in rats (MHW, Japan, 1994). The NOEL for repeated dose toxicity in rats is considered to be 30 mg/kg/day in parental animals males and 30 mg/kg/day in F₁ offspring.

3.2 Initial Assessment for Human Health

The chemical showed no genotoxic effects in bacteria and in a chromosomal aberration test *in vitro*. In a combined repeat dose and reproductive/developmental toxicity screening test, there were no clinical observation attributed to the administration of the test substance in parental animals. However, increases of liver and kidney weights were observed at the middle and highest dose level (30 and 150 mg/kg/day). In addition, histopathological examination showed swelling of liver cells and degeneration and protein cast of the proximal renal tubules in the groups. From the view point of reproductive/developmental end-points, only a few females at the highest dose lost their litters during lactation period. Other effects (e.g. mating, fertility and estrous cycle) were not observed. Therefore, the NOEL was 6 mg/kg/day for repeated dose toxicity and 30 mg/kg/day for reproductive toxicity.

For human health, daily intake of the chemical could not be estimated, because of the lack of exposure scenarios. Therefore, the health risk is presumably low due to its exposure situation.

4 HAZARDS TO THE ENVIRONMENT

4.1 Aquatic Effects

6-tert-Butyl-2,4-xyleneol has been tested in a limited number of aquatic species (*Selenastrum capricornutum*, *Daphnia magna* and *Oryzias latipes*), under OECD test guidelines [OECD TG 201, 202, 203]. Acute and chronic toxicity data to test organisms for 6-tert-butyl-2,4-xyleneol are summarized in Table 2. No other ecotoxicological data are available.

Various NOEC and LC₅₀ values were gained from above tests; 96h LC₅₀ = 4.4 mg/l (acute fish); 24h EC₅₀ = 5.6 mg/l (acute daphnia); 72h EC₅₀ = 3.6 mg/l (acute algae); NOEC = 1.7 mg/L (algae), 21d NOEC = 0.32 mg/l (long-term daphnia reproduction). Therefore, the chemical is considered to

be moderately toxic to fish, daphnids and algae. As the lowest chronic toxicity result, the 21 d-NOEC (reproduction) of *Daphnia magna* (0.32 mg/l) was adopted. An assessment factor of 100 is applied. Thus PNEC of 6-tert-butyl-2, 4-xyleneol is 0.0032 mg/l. Since the chemical is not produced in member countries, PEC/PNEC ratio could not be calculated. Therefore, it is considered to be currently of low potential risk for the environment.

Table 2. Acute and chronic toxicity data of 6-tert-butyl-2,4-xyleneol to aquatic organisms.

Species	Endpoint ¹	Conc. (mg/L)	Reference
<i>Selenastrum capricornutum</i> (algae)	Biomass: EC ₅₀ (72h)	3.6 mg/L	EA, Japan. (1994)
	NOEC	1.7 mg/L	
<i>Daphnia magna</i> (water flea)	Imm: EC ₅₀ (24h)	5.6 mg/L	
	Imm: EC ₅₀ (21d)	2.5 mg/L	
	Rep: EC ₅₀ (21d)	0.60 mg/L	
	NOEC(21d)	0.32 mg/L	
<i>Oryzias latipes</i> (fish, Medaka)	Mor: LC ₅₀ (24h)	6.0 mg/L	
	Mor: LC ₅₀ (72h)	5.0 mg/L	
	Mor: LC ₅₀ (96h)	4.4 mg/L	

Notes: ¹ Mor, mortality, Rep, reproduction, Imm, immobilisation

4.2 Initial Assessment for the Environment

6-tert-Butyl-2,4-xyleneol is not produced in Japan, and there are no imported volumes. However, this chemical is registered in TSCA and EINECS. This chemical is stable in acidic, neutral and alkaline solutions, and is considered as "not readily biodegradable".

For the environment, various NOEC and LC₅₀ values were gained from test results; 96h LC₅₀ = 4.4 mg/l (acute fish); 24h EC₅₀ = 5.6 mg/l (acute daphnia); 72h NOEC = 1.7 mg/l (algae); 21d NOEC = 0.32 mg/l (long-term daphnia reproduction). Therefore, the chemical is considered to be moderately toxic to fish and daphnids and algae. As the lowest chronic toxicity result, the 21 d-NOEC (reproduction) of *Daphnia magna* (0.32 mg/l) was adopted. An assessment factor of 100 is applied. Thus the PNEC of 6-tert-butyl-2, 4-xyleneol is 0.0032 mg/l. Since the chemical is not produced in member countries, PEC/PNEC ratio could not be calculated. Therefore, it is considered to be currently of low potential risk for the environment.

5 RECOMMENDATIONS

A potential hazard to man due to a low no-effect-level in repeated dose animal studies is identified, but exposure is considered to be low.

Unless further information on exposure in other member countries presents evidence to the contrary, it is currently considered of low potential risk and low priority for further work.

要 約

試験委託者：環境省

表 題：イソチオシアン酸メチルの藻類 (*Pseudokirchneriella subcapitata*)
に対する生長阻害試験

試験番号：A030423-1

試験方法：

- 1) 適用ガイドライン：OECD 化学品テストガイドライン No. 201 「藻類生長阻害試験」
(1984年)
- 2) 暴露方式：止水式 (密閉系), 振とう培養 (100rpm)
- 3) 供試生物：*Pseudokirchneriella subcapitata* (株名：ATCC22662)
(旧学名：*Selenastrum capricornutum*)
- 4) 暴露期間：72時間
- 5) 試験濃度：対照区, 助剤対照区,
(設定値) 0.0200, 0.0330, 0.0540, 0.0890, 0.150, 0.240, 0.400 mg/L
公比：1.6
助剤濃度一定：93 mg/L (N,N-ジメチルホルムアミド使用)
- 6) 試験液量：100 mL/容器
- 7) 連 数：3 容器/試験区
- 8) 初期細胞濃度：前培養した藻類 1×10^4 cells/mL
- 9) 試験温度： 23 ± 2 °C
- 10) 照 明：4000 lux (±20%の変動内, フラスコ液面付近) で連続照明
- 11) 分 析 法：ガスクロマトグラフィー質量分析 (GC/MS)

試験結果：

- 1) 試験液および試験培養液中の被験物質濃度

被験物質濃度分析の結果, 測定値の設定値に対する割合は, 暴露開始時の試験液において 96~101 %, 暴露終了時の試験培養液において 17~95 %であった。濃度減少の主な原因は, 藻体への移行および揮散と考えられた。阻害濃度の算出には開始時の測定値を用いた。

2) 生長曲線下面積の比較による阻害濃度

50%生長阻害濃度 EbC50 (0-72h) : 0.135 mg/L (95%信頼区間 : 0.131~0.139 mg/L)

最大無作用濃度 NOECb (0-72h) : 0.0548 mg/L

3) 生長速度の比較による阻害濃度

50%生長阻害濃度 ErC50 (24-48h) : 0.181 mg/L (95%信頼区間 : 算出不可)

最大無作用濃度 NOECr (24-48h) : 0.0548 mg/L

50%生長阻害濃度 ErC50 (24-72h) : 0.193 mg/L (95%信頼区間 : 算出不可)

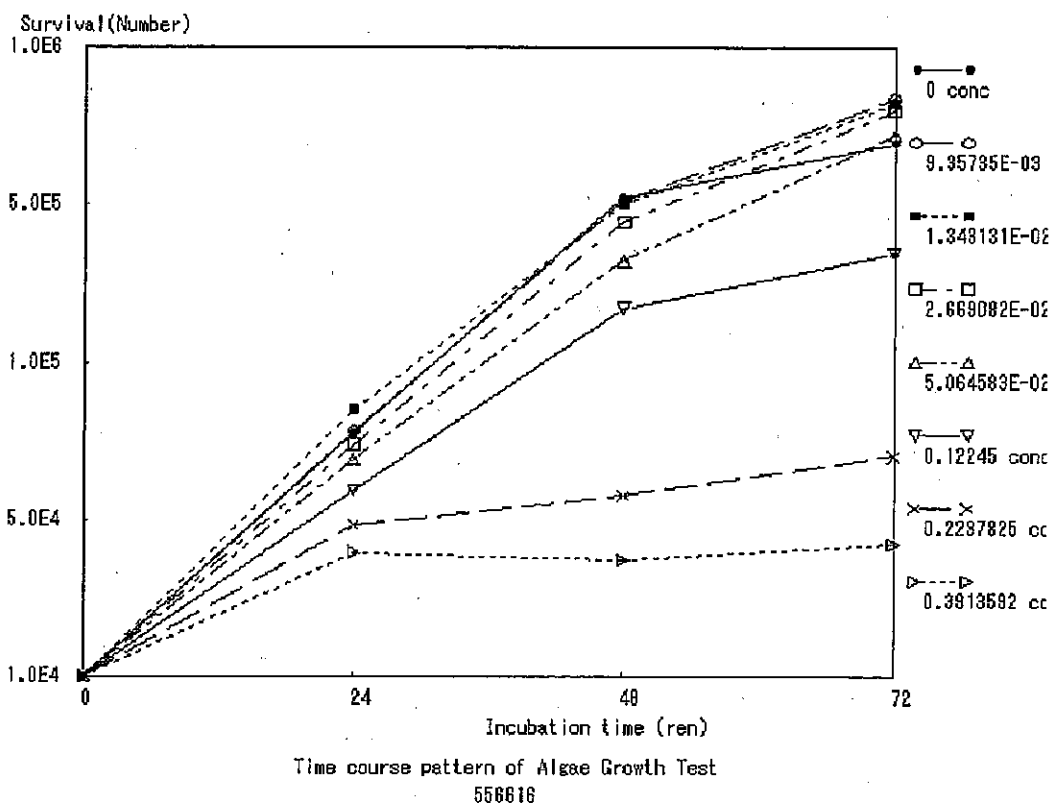
最大無作用濃度 NOECr (24-72h) : 0.0855 mg/L

4) 藻類の形態観察

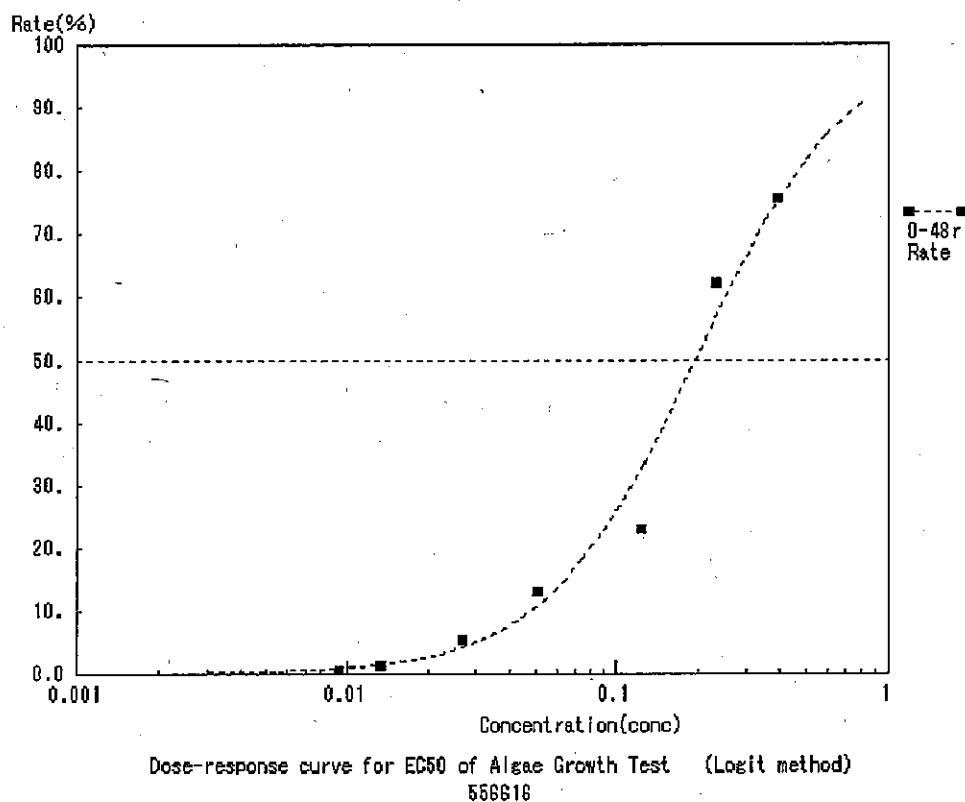
暴露終了時の顕微鏡下での細胞形態観察の結果、0.240 mg/L以上の濃度区で、細胞容積の拡大（膨張）が認められた。0.150 mg/L以下の濃度区では細胞形態の変化（収縮、膨張、破裂等）や細胞凝集は認められず、また、対照区および助剤対照区との相違もなかった。

イソチオシアン酸メチル (CAS.556-61-6)

① 生長曲線



②阻害率曲線



③毒性値

48hErC50(実測値に基づく)=0.19mg/L
48hNOECr(実測値に基づく)=0.027mg/L

要 約

試験委託者： 環境省

表 題： イソチオシアン酸メチルのオオミジンコ (*Daphnia magna*) に対する
急性遊泳阻害試験

試験番号： A030423-2

試験方法：

- 1) 適用ガイドライン： OECD 化学品テストガイドライン No. 202 「ミジンコ類、急性遊泳阻害試験および繁殖試験」 (1984年)
- 2) 暴露方式： 半止水式 (24時間後に試験液の全量を交換)
水面をテフロンシートで被覆
- 3) 供試生物： オオミジンコ (*Daphnia magna*)
- 4) 暴露期間： 48時間
- 5) 試験濃度： 対照区, 0.0200, 0.0360, 0.0630, 0.110, 0.200 mg/L
(設定値) 公比： 1.8
- 6) 試験液量： 100 mL/容器
- 7) 連 数： 4 容器/試験区
- 8) 供試生物数： 20頭/試験区 (5頭/容器)
- 9) 試験温度： 20±1℃
- 10) 照 明： 室内光, 16時間明 (800 lux以下) / 8時間暗
- 11) 分 析 法： ガスクロマトグラフィー質量分析 (GC/MS)

試験結果：

1) 試験液中の被験物質濃度

試験液の分析の結果、測定値の設定値に対する割合は、暴露開始時において 86~87%、
換水前において 73~79%であった。

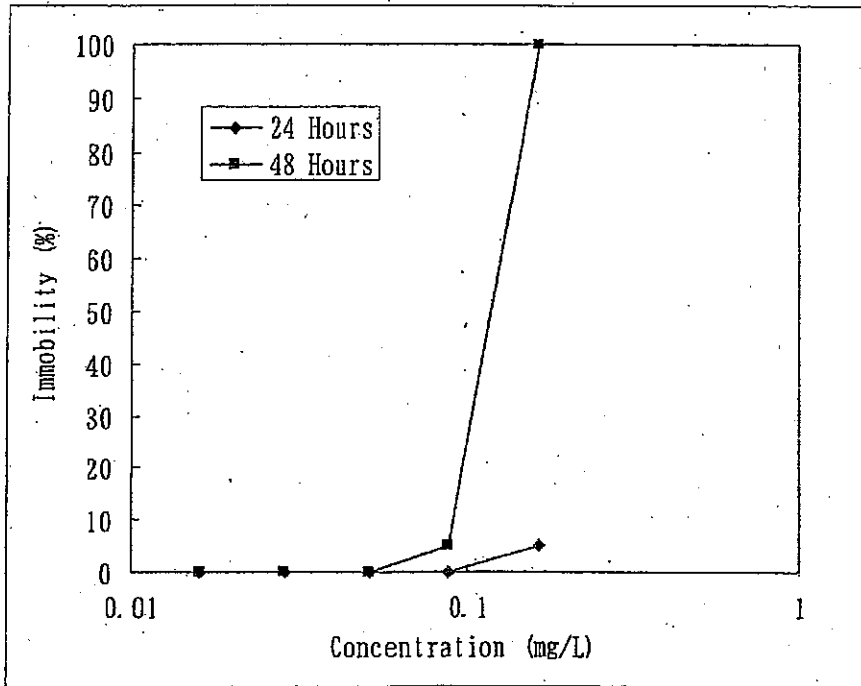
2) 24時間暴露後の結果

	(mg/L)	95%信頼区間 (mg/L)
半数遊泳阻害濃度 (EiC50)	> 0.165	算出不可
0%阻害最高濃度	0.0881	—
100%阻害最低濃度	> 0.165	—

3) 48時間暴露後の結果

	(mg/L)	95%信頼区間 (mg/L)
半数遊泳阻害濃度 (EiC50)	0.116	0.0881 ~ 0.165
0%阻害最高濃度	0.0521	—
100%阻害最低濃度	0.165	—

Figure 1 Concentration-Immobility Curve



要 約

試験委託者：環境省

表 題：イソチオシアン酸メチルのヒメダカ (*Oryzias latipes*) に対する急性毒性試験

試験番号：A030423-4

試験方法：

- 1) 適用ガイドライン：OECD 化学品テストガイドライン No. 203 「魚類急性毒性試験」
(1992年)
- 2) 暴露方式：半止水式 (24時間毎に試験液の全量を交換)
水面をテフロンシートで被覆
- 3) 供試生物：ヒメダカ (*Oryzias latipes*)
- 4) 暴露期間：96時間
- 5) 試験濃度：対照区, 0.0125, 0.0250, 0.0500, 0.100, 0.200 mg/L
(設定値) 公比：2.0
- 6) 試験液量：5.0 L/容器
- 7) 連 数：1 容器/試験区
- 8) 供試生物数：10尾/試験区
- 9) 試験温度：24±1℃
- 10) 照 明：室内光, 16時間明 (1000 lux以下) / 8時間暗
- 11) 分 析 法：ガスクロマトグラフィー質量分析 (GC/MS)

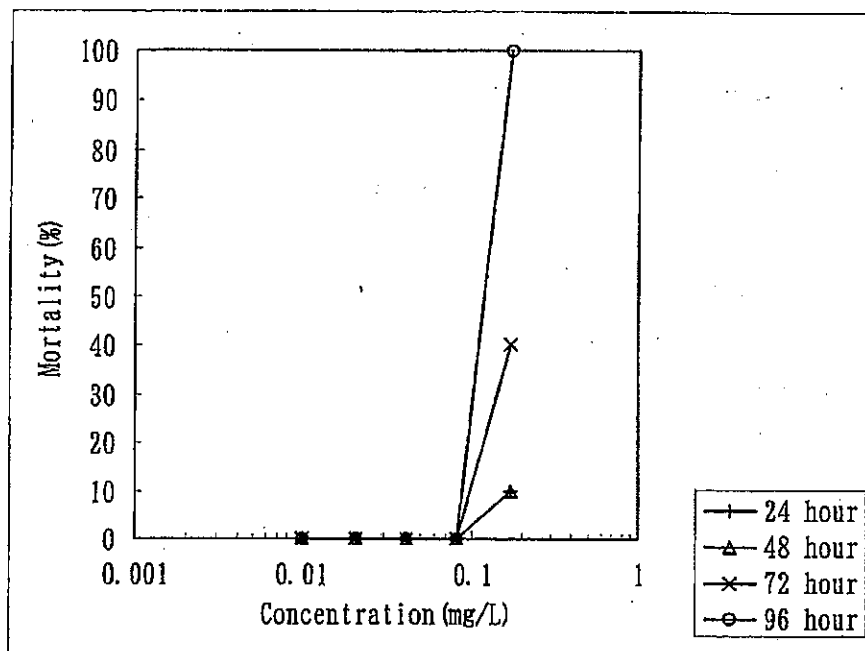
試験結果：

1) 試験液中の被験物質濃度

試験液の分析の結果、測定値の設定値に対する割合は、暴露開始時において84~91%、24時間後において71~81%であった。

2) 96時間暴露後の半数致死濃度 (LC50) : 0.118 mg/L (95%信頼区間 : 0.0818 ~ 0.169 mg/L)

Figure 1 Concentration-Mortality Curve



要 旨

試験委託者

環境庁

表 題4-(1-メチルエテニル)フェノールの藻類 (*Selenastrum capricornutum*) に対する生長阻害試験試験番号

NMMP/E99/1210

試験方法

本試験は、OECD化学品テストガイドラインNo.201「藻類生長阻害試験」(1984年)に準拠して実施した。

- 1) 被験物質 : 4-(1-メチルエテニル)フェノール
- 2) 培養方式 : 振とう培養 (100rpm)
- 3) 供試生物種 : *Selenastrum capricornutum* (ATCC-22662)
- 4) 温度 : 23±2 °C
- 5) 暴露期間 : 72 時間
- 6) 試験液量 : 100 mL (OECD培地)
- 7) 照明 : 4000 ~ 5000 lux (連続照明)
- 8) 初期細胞濃度 : 1×10^4 cells/mL
- 9) 試験濃度(設定) : 対照区、助剤対照区、0.4mg/L、0.7mg/L、1.2mg/L、2.2mg/L
4.0mg/Lおよび 7.2mg/L (公比 1.8)
- 10) 試験液中の被験物質の分析
: HPLC法(暴露開始時、終了時)

結 果

- 1) 生長曲線下の面積の比較による生長阻害濃度
EbC50(0-72) = 2.83 mg/L (95%信頼区間: 2.59 mg/L ~ 3.11 mg/L)
無影響濃度 (NOEC(面積法 0-72)) = 1.56 mg/L

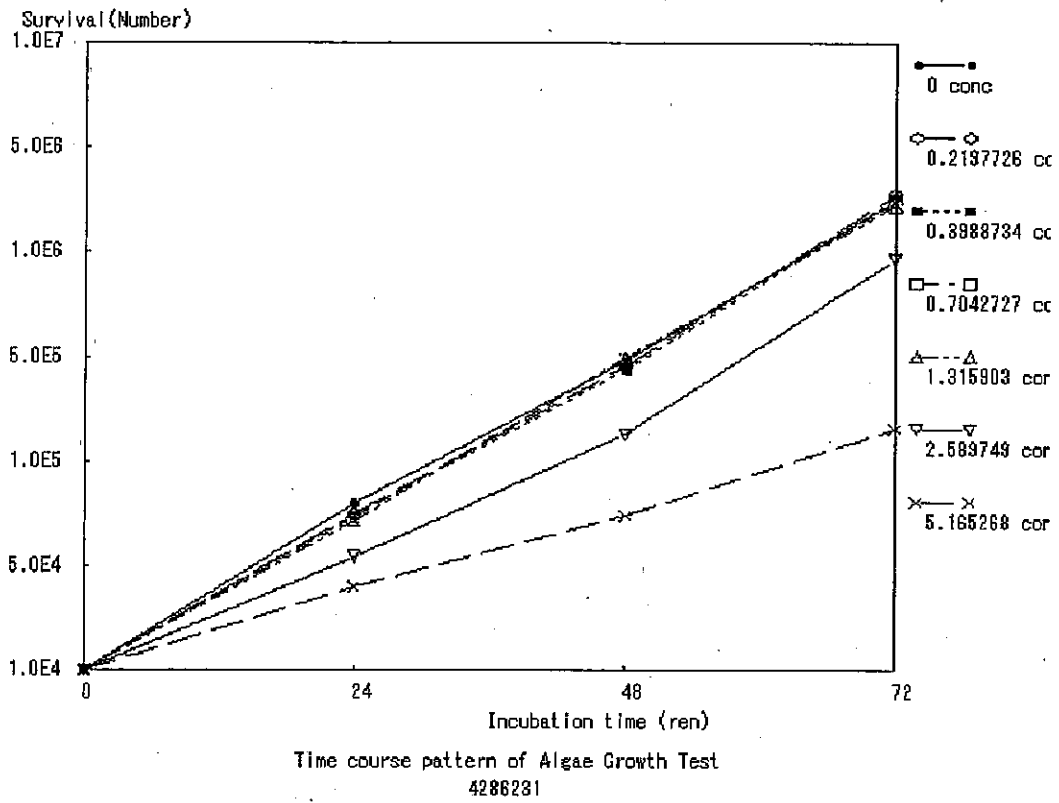
2) 生長速度の比較による生長阻害濃度

$$\text{ErC50}(24-48) = 5.67 \text{ mg/L} \text{ (95\%信頼区間: } 5.22 \text{ mg/L} \sim 6.30 \text{ mg/L)}$$
$$\text{無影響濃度 (NOEC(速度法 24-48))} = 3.24 \text{ mg/L}$$
$$\text{ErC50}(24-72) = 5.95 \text{ mg/L} \text{ (95\%信頼区間: } 5.59 \text{ mg/L} \sim 6.44 \text{ mg/L)}$$
$$\text{無影響濃度 (NOEC(速度法 24-72))} = 3.24 \text{ mg/L}$$

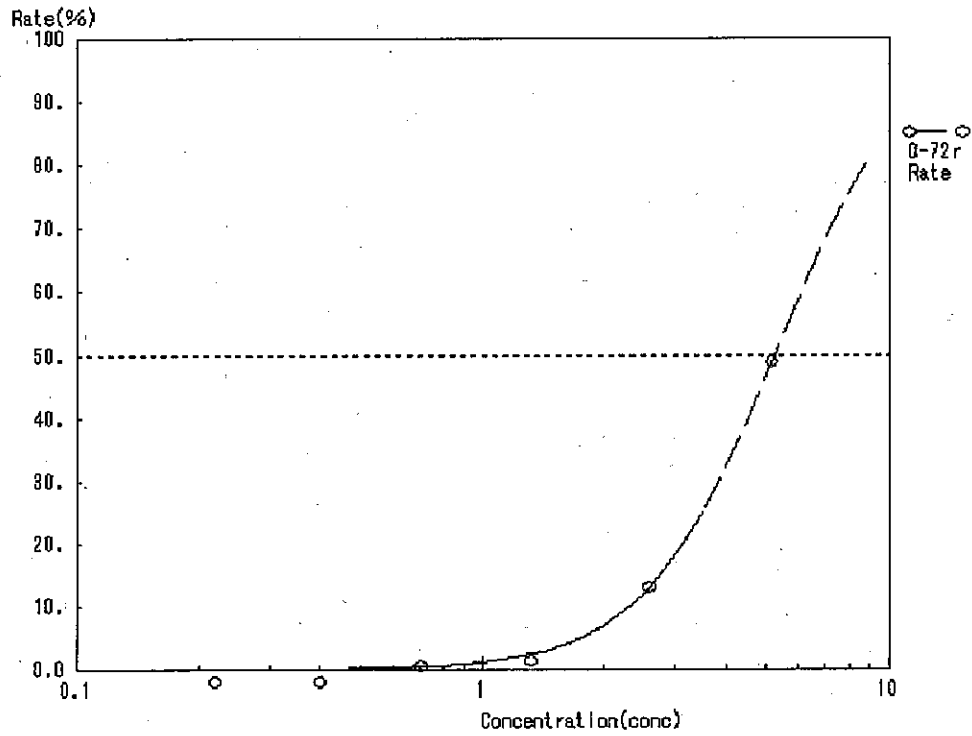
(上記濃度は、全て暴露開始時の実測濃度に基づく値)

4-(1-メチルエチニル)フェノール(CAS.4286-23-1)

①生長曲線



②阻害率曲線



Dose-response curve for EC50 of Algae Growth Test (Logit method)
4286231

③毒性値

72hErC50 (実測値に基づく) = 5.4mg/L
72hNOECr (実測値に基づく) = 1.3mg/L

要 旨

試験委託者

環境庁

表 題4-(1-メチルエテニル)フェノールのオオミジンコ (*Daphnia magna*)に対する急性遊泳阻害試験試験番号

NMMP/E99/2210

試験方法

本試験は、OECD 化学品テストガイドライン No.202「ミジンコ類、急性遊泳阻害試験および繁殖試験」(1984年)に準拠して実施した。

- 1)被験物質 :4-(1-メチルエテニル)フェノール
- 2)暴露方法 :止水式
- 3)供試生物 :オオミジンコ (*Daphnia magna*)
- 4)暴露期間 :48時間
- 5)連数 :1濃度区につき4連
- 6)生物数 :20頭/1濃度区(1連につき5頭で1濃度区20頭)
- 7)試験濃度 :対照区、助剤対照区、0.53mg/L、0.95mg/L、1.71mg/L、3.09mg/L、5.56mg/L
および10.0mg/L(公比1.8)(設定濃度)
- 8)試験液量 :100 mL
- 9)照明 :室内光、16時間明/8時間暗
- 10)試験水温 :20±1°C

結 果

1)24時間暴露後の結果

24時間半数遊泳阻害濃度(EiC50)=5.17mg/L(95%信頼区間:2.47mg/L~9.06mg/L)

2)48時間暴露後の結果

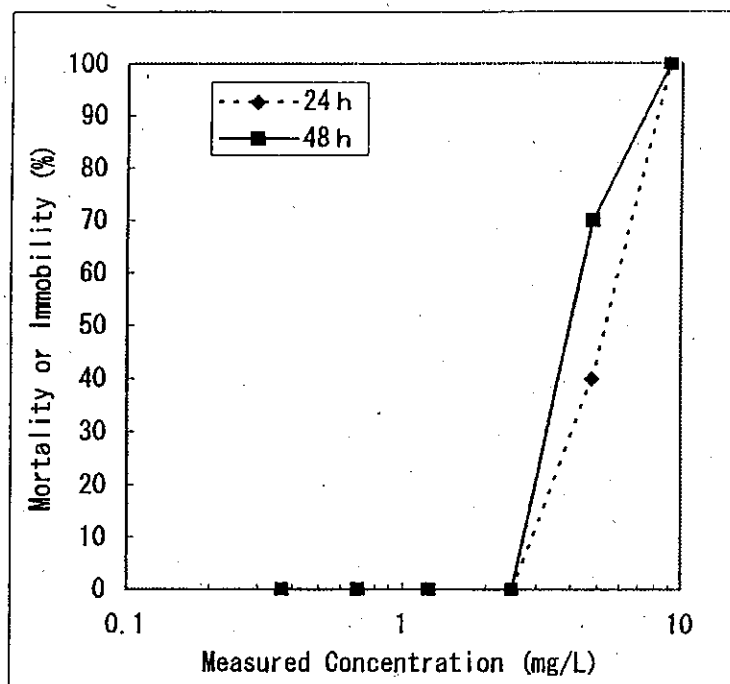
48時間半数遊泳阻害濃度(EiC50)=4.12mg/L(95%信頼区間:2.47mg/L~4.78mg/L)

最大無作用濃度(NOECi)=2.47mg/L

100%阻害最低濃度=9.06mg/L

(上記濃度は、全て実測濃度の幾何平均値に基づく値)

Figure 1 Concentration-Response Curve of 4-(1-Methylethenyl)phenol

Mortality or Immobility in *Daphnia magna*

要 旨

試験委託者

環境庁

表 題4-(1-メチルエテニル)フェノールのオオミジンコ (*Daphnia magna*)に対する繁殖阻害試験試験番号

NMMP/E99/3210

試験方法

本試験は、OECD 化学品テストガイドライン No.211「オオミジンコ繁殖試験」(1998年)に準拠して実施した。

- 1) 被験物質 : 4-(1-メチルエテニル)フェノール
- 2) 暴露方法 : 半止水式(週に3回、試験液の全量を交換)
- 3) 供試生物 : オオミジンコ (*Daphnia magna*)
- 4) 暴露期間 : 21 日間
- 5) 試験濃度 : 対照区、助剤対照区、0.24mg/L、0.43mg/L、0.77mg/L、1.39mg/L、
2.50mg/Lおよび4.50mg/L(設定濃度)
(公比1.8、助剤 HCO-50、100mg/L)
- 6) 試験液量 : 1容器(連)につき 80 mL
- 7) 連数 : 10 容器(連)/濃度区
- 8) 供試生物数 : 10 頭/濃度区(1連につき 1 頭)
- 9) 試験水温 : 20±1°C
- 10) 照明 : 室内光、16 時間明/8 時間暗
- 11) 被験物質の分析 : 高速液体クロマトグラフ分析

結 果

1) 試験液中の被験物質濃度

実測濃度が設定濃度の±20%を外れたので結果の算出には実測濃度の時間加重平均値を用いた。

2) 21日間の親ミジンコの半数致死濃度(LC50)

= 0.98mg/L (95%信頼区間 : 0.56mg/L~3.33mg/L)

3) 21日間の50%繁殖阻害濃度(ErC50)

= 0.79mg/L (95%信頼区間 : 0.71mg/L~0.91mg/L)

4) 21日間の最大無作用濃度(NOECr) = 0.53mg/L

5) 21日間の最小作用濃度(LOECr) = 1.01mg/L

(上記濃度は、実測濃度の時間加重平均値に基づく値)

Figure 1 Cumulative Numbers of Dead Parental *Daphnia*

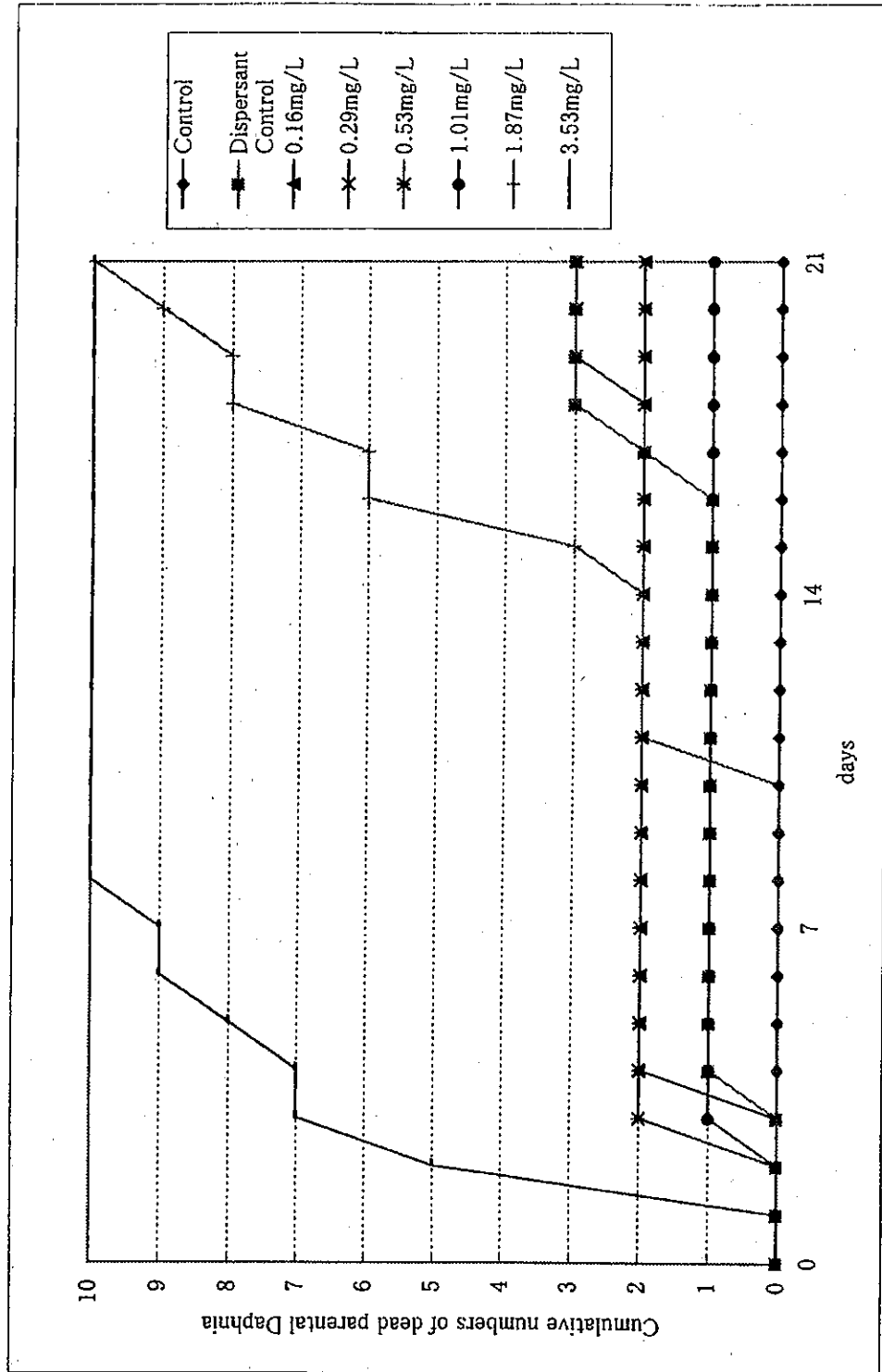
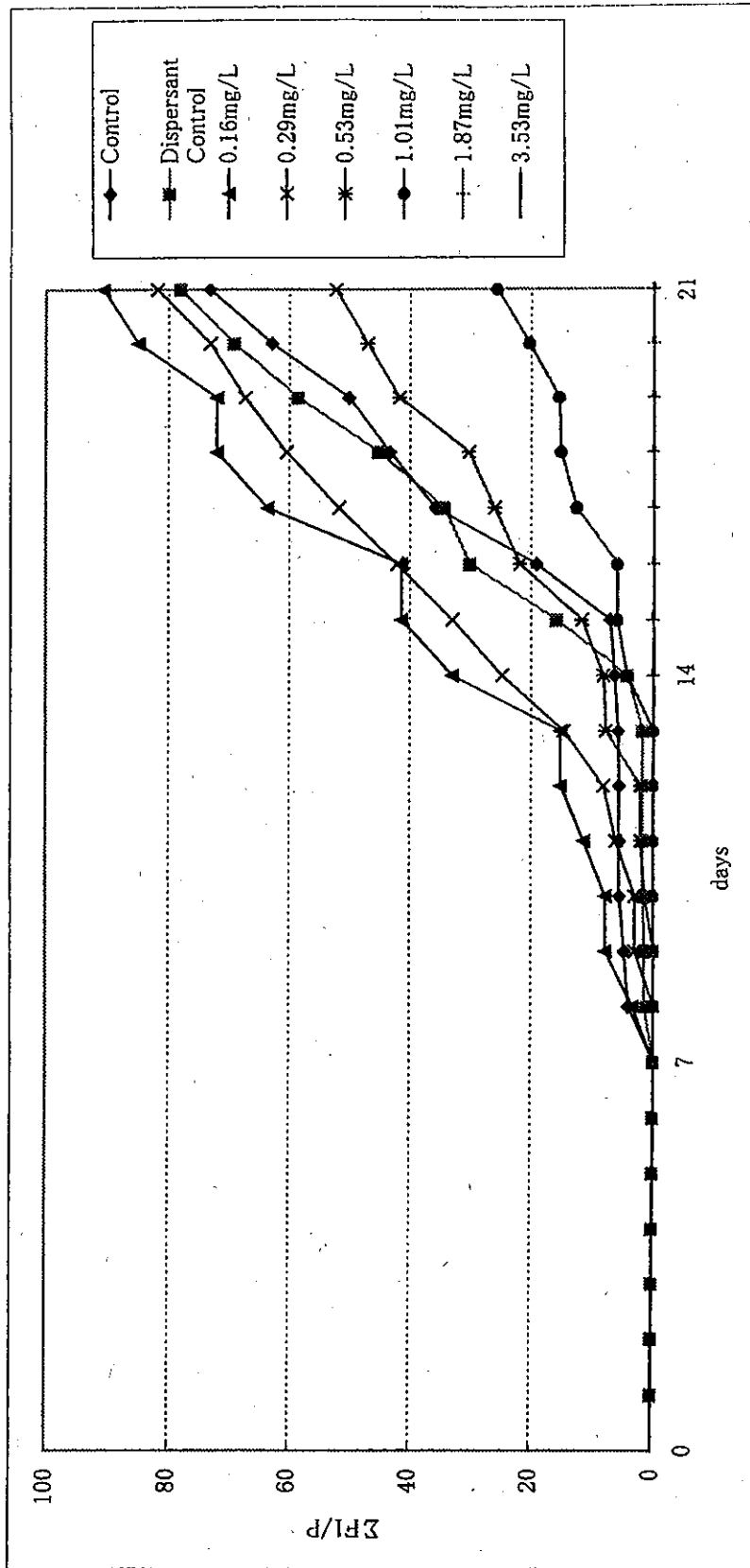


Figure 2 Mean Cumulative Numbers of Juveniles Produced per Adult ($\Sigma F1/P$) during 21 days



要 旨

試験委託者

環境庁

表 題4-(1-メチルエテニル)フェノールのヒメダカ (*Oryzias latipes*) に対する急性毒性試験試験番号

NMMP/E99/4210

試験方法

本試験は、OECD 化学品テストガイドライン No.203「魚類毒性試験」(1992年)に準拠して実施した。

被験物質	:4-(1-メチルエテニル)フェノール
方式	:半止水式(24時間換水)
供試生物	:ヒメダカ (<i>Oryzias latipes</i>)
試験濃度	:対照区、助剤対照区および1.9mg/L、3.4mg/L、6.2mg/L、11.1mg/L および 20.0mg/L(設定濃度)
曝露期間	:96 時間
試験液量	:3.0L
生物数	:10 尾/濃度区
照明	:室内光、16 時間明/8 時間暗
エアレーション	:なし
温度	:24±1°C

結 果

試験の結果、4-(1-メチルエテニル)フェノールの実測濃度の幾何平均値に基づく96時間の半数致死濃度(LC50)は9.2mg/Lであり、その95%信頼区間は6.2mg/L~16.7mg/Lであった。

Figure 1. Concentration-Response Curve of 4-(1-Methylethenyl)phenol

Mortality in Medaka

