

(参考8) 各物質の物性等について

1. 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩 (LAS)

直鎖アルキルベンゼンスルホン酸は、ベンゼン環に直鎖のアルキル基(-C<sub>n</sub>H<sub>2n+1</sub>)が結合した直鎖アルキルベンゼンにスルホ基(-SO<sub>3</sub>H)が結合した化合物である。上市されている商用の直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩(LAS)はアルキル基の炭素数が10~14(平均鎖長11.8程度)で、アルキル基のベンゼン環への結合位置は定まっていない。スルホン酸体は強酸であり、製品として用いられることはなく、通常は、ナトリウムなどのアルカリ金属又はアンモニウムとの塩が、直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩として流通している。商用の直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩(LAS)はアルキル基の炭素数や結合位置の違いなど20以上の混合物からなる。なお、本報告の文中及び表中の( )内の数字は出典番号を示している。

(1) 物理化学的特性等について

本物質の構造を図1、物理化学的特性等を表1に取りまとめた。

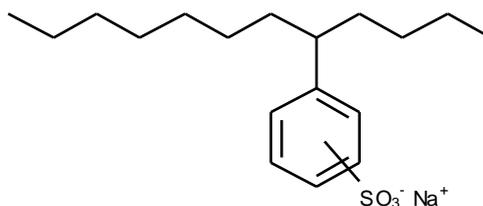


図1 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩の構造図の代表例

表1 物理化学的特性等

融点	198.5 <sup>*1</sup> (1)、>300 <sup>*2</sup> (2)、144 <sup>*3</sup> (3)	
沸点	444 (分解) <sup>*1</sup> (1)	
密度	1.0(20、60%スラリー) <sup>*2</sup> (4)	
蒸気圧	2.3 × 10 <sup>-15</sup> mmHg(25) <sup>*2</sup> (MPBPWIN(5)により計算)	
解離定数(pKa)	現時点では得られていない	
オクタノール/水分配係数 (log K <sub>ow</sub> )	0.45 <sup>*2</sup> (2)、1.96 <sup>*2</sup> (6)、3.32 <sup>*4</sup> (7)	
水溶解度	2.0 × 10 <sup>5</sup> mg/L(25) <sup>*2</sup> (2)、2.5 × 10 <sup>5</sup> mg/L(20) <sup>*4</sup> (7)	
ヘンリー定数	6.38 × 10 <sup>-3</sup> Pa · m <sup>3</sup> /mol(25) <sup>*2</sup> (HENRYWIN(8)により計算)	
生物分解性	好氣的	良分解性 BOD73%、HPLC98%(試験期間:4週間、被験物質濃度:100 mg/L、活性汚泥濃度:30 mg/L) <sup>*3</sup> (9)
	嫌氣的	分解され難い <sup>*5</sup> (10)
化学分解性	加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合はないので、水環境中では加水分解されない <sup>*5</sup> (10)
光分解性	水面では紫外線によって光分解される <sup>*2</sup> (11)	

生物濃縮性 <sup>6</sup> (12)	試験生物：ファットヘッドミノー					
	expt.	ばく露期間 [時間]	流水速度 [L/d/g-fish]	comp	BCF <sub>ss</sub> [L/kg]	n <sub>c</sub> , A <sub>v</sub>
A	48	0.5	C <sub>10-2</sub>	1.7	10.8	
			C <sub>11-2</sub>	5.8		
			C <sub>12-2</sub>	47.6		
			C <sub>13-2</sub>	353.8		
B	168 ~ 192	1	C <sub>11-5</sub>	6.1	11.7	
			C <sub>12-2</sub>	99.1		
			C <sub>12-5</sub>	10.0		
			C <sub>13-5</sub>	34.0		
C	168 ~ 192	1	C <sub>11-5</sub>	9.8	11.4	
			C <sub>12-2</sub>	168.4		
			C <sub>12-3</sub>	42.1		
			C <sub>12-6</sub>	31.9		
D	168 ~ 192	1	C <sub>10-2</sub>	6.0	10.6	
			C <sub>11-2</sub>	31.9		
			C <sub>12-2</sub>	211.5		
			C <sub>13-2</sub>	987.2		
			C <sub>10-in</sub>	3.0		
			C <sub>11-in</sub>	9.1		
			C <sub>12-in</sub>	29.9		
			C <sub>13-in</sub>	112.4		

Comp:同族体での炭素数と異性体位置 n<sub>c</sub>, A<sub>v</sub>:平均アルキル鎖長

- 脚注) \*1: CAS 85117-50-6 C<sub>10-14</sub> Sodiumalkyl benzene sulfonate  
 \*2: CAS 25155-30-0 ドデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム  
 \*3: CAS 2211-98-5 p-ドデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム  
 \*4: CAS 68411-30-3 Benzenesulfonic acid, C<sub>10-13</sub> Alkylderivs., Sodium salts (混合物)  
 \*5: 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩 (アルキル基の炭素数が 10 から 14 までのもの及びその混合物に限る。)  
 \*6: 商用 LAS (C<sub>10-13</sub>)

直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩(LAS) は、2 段階の反応を経て合成される。まず、ベンゼンに n-パラフィン又は塩化パラフィンを加え、フッ化水素又は塩化アルミニウム等を触媒として反応させ、ベンゼンをアルキル化することにより直鎖アルキルベンゼンを合成する。次いで、この直鎖アルキルベンゼンを三酸化硫黄と反応させて LAS を合成する。(10)

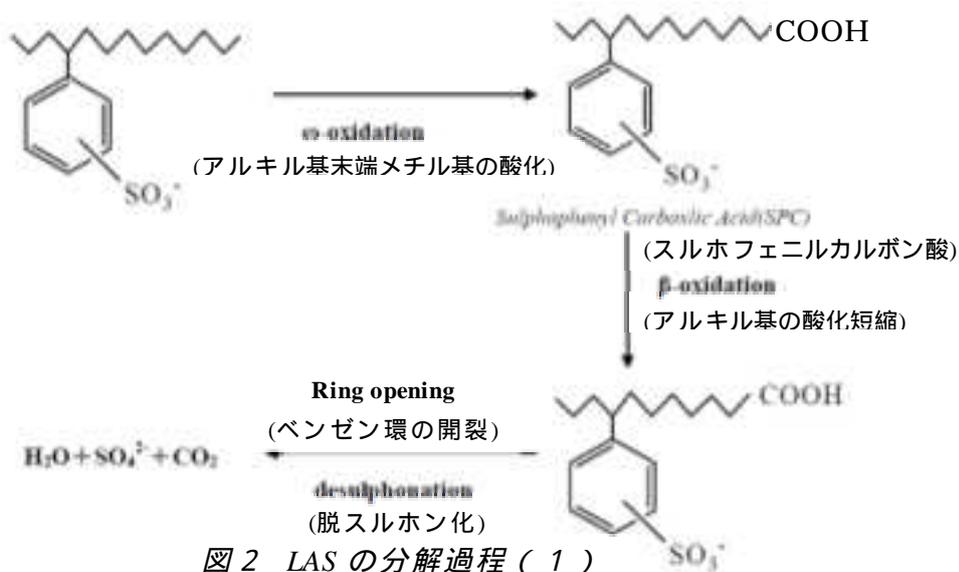
本物質の主な用途は、約 8 割が家庭の洗濯用洗剤、2 割弱がクリーニング、厨房や車両の洗浄などに使用される業務用洗浄剤であり、わずかではあるが繊維を染色加工する際の分散剤や農薬などの乳化剤に使用されている。家庭の台所用洗剤にはほとんど使われなくなっている。(13)

## (2) 水環境中での挙動

平成 19 (2007) 年度から平成 23 (2011) 年度に調べられた我が国の淡水域からは、各年度の最大値として、70 ~ 19,000µg/L の LAS が検出され、検出下限値 0.01 ~ 100µg/L の範囲の中での検出率は、各年度ともに 30% を超える。

環境中からは、アルキル基の炭素数が 10 から 13 の LAS 同族体が検出されている。

好氣的条件下では、LASのアルキル基末端のメチル基が酸化（ $\omega$ -酸化）されてカルボキシル基を生じ、スルホフェニルカルボン酸（Sulphophenyl Carboxylic Acid (SPC)）となり、さらにアルキル基の酸化短縮（ $\beta$ -酸化）が炭素数 4~5 まで続いた後にベンゼン環の開裂を経て、最終的には二酸化炭素、水及び硫酸イオンに分解される<sup>(1)</sup>。分解過程で生成した有機物の一部は、低級脂肪酸などに変換され、微生物に同化される<sup>(2)</sup>。



$C_{10}$ 、 $C_{11}$  及び  $C_{12}$  成分を含有する市販の LAS の河川水中での生分解特性としては、8 日後には  $C_{10}$ -LAS の 5-スルホフェニル異性体(炭素数 10 のアルキル基の末端から 5 番目の位置の炭素でベンゼン環に結合した構造の LAS)及び  $C_{11}$ -LAS の 5-及び 6-スルホフェニル異性体のみが残存し、末端メチル基がスルホフェニル基から最も離れて存在する異性体が最も分解しやすい<sup>(3)</sup>。生分解はアルキル基の炭素数が多い長鎖同族体 ( $C_{13}$ 、 $C_{14}$ )、アルキル基がより外側の炭素でベンゼン環へ結合している外部位置異性体ほど分解されやすい<sup>(4)</sup>。

LAS の河川・湖沼水中の懸濁物質（吸着媒体）への吸着は、有機炭素含有率が高い吸着媒体ほど吸着量が多いという実験結果が得られている<sup>(5)</sup>。河川水中の LAS は、10~45% が懸濁物質に吸着して存在し<sup>(5)</sup>、炭素数別では  $C_{10}$  から  $C_{12}$  の大部分が溶存態、 $C_{13}$  の 40~60% が懸濁態として存在している<sup>(6)</sup>。底質中では全 LAS 量の 99% 以上が吸着態として存していた<sup>(7)</sup>。底質中における LAS の分解速度は、水中よりも 2 桁以上遅いと報告されている<sup>(8)</sup>。

### ( 3 ) 化学物質排出把握管理促進法（化管法）による全国の排出量、化学物質審査規制法（化審法）による生産量

直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩（アルキル基の炭素数が 10 から 14 までのもの及びその混合物に限る。）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 100t 以上である。（ 1 ）

表1 2005年度～2010年度における化管法での排出量(2、3)  
(直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩)

排出年 度	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 埋 環 立	下水道	当該事 業所外	対象業 種	非対象業 種	家庭	移 動 体				
2010	694	18,722	-	-	34,597	250,830	2,791,236	1,813,431	10,443,562		19,415	15,048,229	15,067,644
2009	1,030	17,282	-	-	21,803	361,839	3,061,477	1,693,168	10,888,793		18,312	15,643,438	15,661,750
2008	889	21,429	-	-	19,496	326,648	2,927,294	673,271	13,581,457		22,318	17,182,022	17,204,340
2007	1,336	34,019	-	-	15,877	352,039	3,237,350	472,997	9,377,409		35,355	13,087,756	13,123,111
2006	1,478	41,459	-	-	11,602	272,378	249,155	670,740	10,641,568		42,937	11,561,463	11,604,400
2005	1,553	39,648	-	-	17,045	288,622	118,632	1,251,325	12,676,743		41,201	14,046,700	14,087,901

本物質の生産量、輸入量、輸出量の推移を表2に示す。(4)

表2 国内生産量・輸出量・輸入量の推移

平成(年)	13	14	15	16	17
生産量(t) <sup>a)</sup>	106,578	72,078	85,749	87,026	62,088
輸出量(t) <sup>a)</sup>	4,521	2,507	2,245	3,266	386
輸入量(t) <sup>a)</sup>	0	971	3,272	3,573	5,472

注：a) LAS塩純分換算トン

「化学物質の製造・輸入量に関する実態調査」によると、直鎖アルキル(C=6~14)ベンゼンスルホン酸及びその塩(K, Na, Li, Ca)として、2001年度、2004年度及び2007年度における製造(出荷)及び輸入量は10,000~100,000t/年未満である。(5)

## 出典)

### 物理化学的特性等について

- (1) OECD High Production Volume Chemicals REPrAm (2006): SIDS (Screening Information Data Set) Initial Assessment Report. LINEAR ALKYL BENZENE SULFONATE.
- (2) International Programme on Chemical Safety (IPCS)(1997): International Chemical Safety Cards. 1189. SODIUM DODECYLBENZENE SULPHONATE
- (3) Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- (4) U.S. Coast Guard, Department of Transportation (1984-5): CHRIS - Hazardous Chemical Data. Volume II. Washington, D.C., U.S. Government Printing Office. [Hazardous Substances Data Bank (<http://toxnet.nlm.nih.gov/>, 2006.10.13 現在)]
- (5) U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v.3.20
- (6) U.S. Environmental Protection Agency, EPI Suite™ v.4.0.
- (7) International Programme on Chemical Safety (IPCS)(2005): International Chemical Safety Cards. 1602. C10-13 ALKYL BENZENESULFONIC ACID, SODIUM SALT.
- (8) U.S. Environmental Protection Agency, HENRYWIN™ v.3.20.
- (9) 厚生労働省, 経済産業省, 環境省: 化審法データベース (J-CHECK)., (<http://www.safe.nite.go.jp/jcheck>).
- (10) 財団法人化学物質評価研究機構, 独立行政法人製品評価技術基盤機構 (2005) 化学物質の初期リスク評価書 No.5 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩(アルキル基の炭素数が 10 から 14 までのもの及びその混合物に限る。). (独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 委託事業).
- (11) Matsuura, T. and Smith, J.M. (1970): Kinetics of photodecomposition of dodecyl benzene sulfonate. Ing. Eng. Chem. Fund. 9:252-260.
- (12) Tolls, J. et al. (1997): Bioconcentration of LAS: Experimental Determination and Extrapolation to Environmental, Environmental Science & Technology, 31(12): 3426-3431.
- (13) 環境省 (2012): 化学物質ファクトシート 2011 年版

### 水環境中での挙動

- (1) Schröder, R.D. (1989): Basic principles of LAS biodegradation, Tenside Detergents, 26, 86-94.
- (2) Swisher, R.D. (1987): Surfactant Biodegradation, Marcel Dekker Inc., New York. [財団法人化学物質評価研究機構, 独立行政法人製品評価技術基盤機構 (2005) 化学物質の初期リスク評価書 No.5 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸及びその塩(アルキル基の炭素数が 10 から 14 までのもの及びその混合物に限る。). (独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構 委託事業)から]
- (3) Perales J. A., M. A. Manzano, D. Sales, J. M. Quiroga (1999): Linear Alkylbenzene Sulphonates: Biodegradability and Isomeric Composition. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 63:94-100.
- (4) 天野耕二、福島武彦、中杉修身 (1990): 湖沼河口域における直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩(LAS)の収支モデル. 水質汚濁研究. 13(9): 577-585.
- (5) 天野耕二、福島武彦、稲葉一穂、中杉修身 (1989): 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩(LAS)の河川・湖沼水中懸濁物への吸着特性の変化とその要因について. 水質汚濁研究. 12(8): 506-515.
- (6) 日本石鹼洗剤工業会 (1997): 日本における LAS の環境動態と生態影響評価. 環境年報. Vol.22(1996~1997 年度版): 1-7.

- (7) 平山南見子、高橋篤、松尾清孝、小塩英世、黒沢康弘、大嶋道孝 (1984) : ODS カラム吸着法を用いた河川水中の LAS および蛍光増白剤の調査研究 - 主として LAS の存在状況 - . 川崎市公害研究所年報. 10:67-74.
- (8) 天野耕二、福島武彦、中杉修身 (1989) : 湖沼底質中の直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩(LAS)の鉛直分布と季節変動について. 水質汚濁研究. 12(11): 724-735.

## 化管法による全国の排出量、化審法による生産量

- (1) 薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会 PRTR 対象物質調査会、化学物質審議会管理部会、中央環境審議会環境保健部会 PRTR 対象物質等専門委員会合同会合(第 4 回)(2008) : 参考資料 1 現行化管法対象物質の有害性・暴露情報, (<http://www.env.go.jp/council/05hoken/y056-04.html>).
- (2) 経済産業省製造産業局化学物質管理課、環境省環境保健部環境安全課 : 平成 17 年度～平成 22 年度特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律(化学物質排出把握管理促進法)第 11 条に基づき開示する個別事業所データ.
- (3) (独)製品評価技術基盤機構 : 届出外排出量の推計値の対象化学物質別集計結果 算出事項 (対象業種・非対象業種・家庭・移動体) 別の集計 表 3-1 全国.
- (4) (社)環境情報科学センター編集(2006) : 2006 年度界面活性剤流通状況調査報告書(修正版). [環境省 (2008) : 化学物質の環境リスク評価 第 6 巻.から].
- (5) 経済産業省(2003) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 13 年度実績)の確報値, ([http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/new\\_page/10/2.htm](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/new_page/10/2.htm), 2005.10.2 現在). 経済産業省(2007) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 16 年度実績)の確報値, ([http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/kasinhou/jittaichousa/kakuhou18.html](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/jittaichousa/kakuhou18.html), 2007.4.6 現在). ; 経済産業省(2009) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成 19 年度実績) の確報値, ([http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/kasinhou/kakuhou19.html](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/kakuhou19.html), 2009.12.28 現在).

## 2. 4-t-オクチルフェノール (4(1,1,3,3-テトラメチルブチル)フェノール)

オクチルフェノールは、示性式  $C_6H_4(OH)C_8H_{17}$  で示され、直鎖のオクチル基、または分岐オクチル基がフェノール環に結合した環式有機化合物であり、オクチル基の分枝の違い及び置換位置の違いにより複数の異性体が存在する。

オクチルフェノールの中で、パラ位にアルキル基が付いた4(又はP)-オクチルフェノールには、オクチル基の構造の違いから、本報告の検討物質である1,1,3,3-テトラメチルブチル基が結合した4-(1,1,3,3-テトラメチルブチル)フェノール(4-t-オクチルフェノール)(CAS番号140-66-9)や直鎖のオクチル基が結合した4-n-オクチルフェノール(CAS番号1806-26-4)など複数の異性体がある。なお、本報告の文中及び表中の( )内の数字は出典番号を示している。

### (1) 物理化学的特性等について

本物質の構造を図1、物理化学的特性等を表1に取りまとめた。

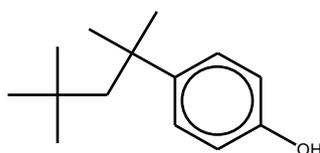


図1 4-t-オクチルフェノールの構造図

表1 4-t-オクチルフェノールの物理化学的特性等

融点	85 (1)、84~85 (2)、80 (3)	
沸点	279 (1)、277 (3)	
密度	0.95(20 ) (3)	
蒸気圧	$4.78 \times 10^{-4}$ mmHg(25 ) (2)、 $<0.075$ mmHg (20 ) (3)	
解離定数(pKa)	10.33 (25 ) (計算値) (4)	
オクタノール/水分配係数 (log $K_{ow}$ )	5.3(計算値)(3)	
水溶解度	$<100$ mg/L(20 ) (3)	
ヘンリー定数	$<1.3 \times 10^{-6}$ Pa·m <sup>3</sup> /mol (水溶解度 $<100$ mg/L、蒸気圧 $4.78 \times 10^{-4}$ mmHg による計算結果)	
生物分解性	好氣的	BOD 0%、GC(-)% (5) (試験期間:2 週間、被験物質濃度:100mg/L、活性汚泥濃度:30mg/L)
	嫌氣的	-
化学分解性	加水分解性	加水分解しない(6)
生物濃縮性 (BCF)	濃縮性がない又は低いと判断される物質(7) 113~469 (試験生物:コイ、試験期間:8 週間、試験濃度:100μg/L), 12~135 (試験生物:コイ、試験期間:8 週間、試験濃度:10μg/L) (5)	
土壌吸着性 (Koc)	10,000 (計算値)(8)	

4-t-オクチルフェノールはフェノールとジイソブチレンを反応させて製造される。(9)

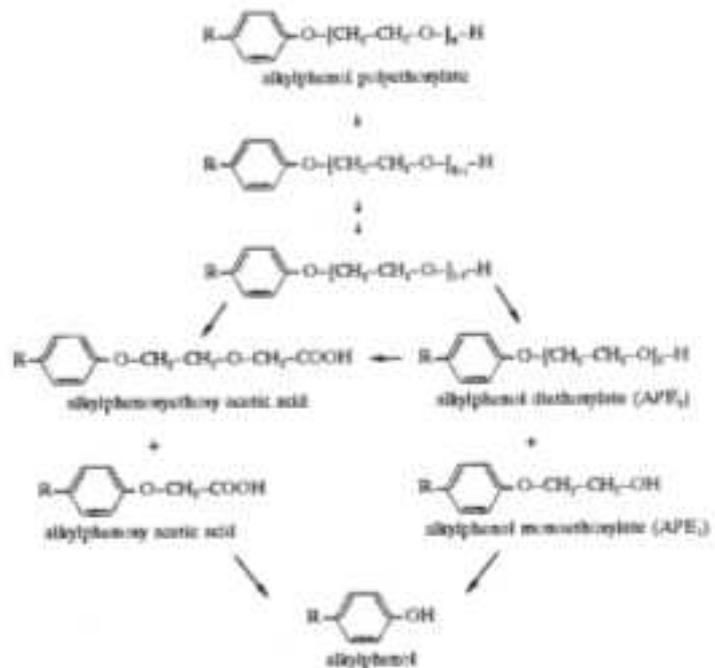
4-オクチルフェノールの主な用途は、接着剤、印刷インクやワニスに用いられる油性フェノール樹脂の原料並びに工業用の界面活性剤として用いられるポリ(オキシエチレン)オクチルフェニルエーテル(以下、「オクチルフェノールエトキシレート」という。)の原料である(10)。

オクチルフェノールエトキシレートは、オクチルフェノールにエチレンオキシドを圧力下で付加して生産される。(11)

## (2) 水環境中での挙動

平成 19(2007)年度から平成 23(2011)年度に調べられた我が国の淡水域からは、最大で 0.96 $\mu\text{g/L}$  の 4-t-オクチルフェノールが検出され、検出下限値 0.00001 ~ 0.5 $\mu\text{g/L}$  の範囲の中での検出率は、各年度ともに 30%を超える。

環境中で検出される 4-t-オクチルフェノールは、4-t-オクチルフェノールエトキシレートとして排出されたものが図 2 の分解過程を経て副生成したものが多くと推定される。また、水環境中では馴化した微生物により徐々に生分解されると考えられる。なお、水面に存在するオクチルフェノールの 30% は 1 日で光分解され、日当たりのよい浅瀬(水深 20~25cm)の半減期は 13.9 時間とされている。(1)



4-t-オクチルフェノール; R の部分が 1,1,3,3-テトラメチルブチル基 (-C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-C(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>)

図 2 アルキルフェノールエトキシレートの分解過程(2)

## (3) 化学物質排出把握管理促進法(化管法)による全国の排出量、化学物質審査規制法(化審法)による生産量

本物質は化学物質排出把握管理促進法(化管法)の第一種指定化学物質である p-オクチルフェノールの異性体の一つである。

表1 2005年度～2010年度における化管法での排出量(1、2)

(p-オクチルフェノール)

排出年度	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		当該事業所外	対象業種	非対象業種	家庭			
2010	308.6	-	-	-	0.1	48,201					308.6	-	308.6
2009	174.0	-	-	-	0.1	35,263					174	-	174
2008	170.6	-	-	-	0.2	37,868					170.6	-	170.6
2007	358.1	-	-	-	96.1	172,125					358.1	-	358.1
2006	295.1	-	-	-	130.2	199,091					295.1	-	295.1
2005	188.9	-	-	-	0.2	259,689					188.9	-	188.9

参考) 2005年度～2010年度における化管法での排出量(1、2)

(オクチルフェノールエトキシレート)

排出年度	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		当該事業所外	対象業種	非対象業種	家庭			
2010	22.3	1,120	-	-	13,731	62,982	180,341	5,529	15,684		1,142	201,554	202,696
2009	12.4	944	-	-	5,661	85,850	394,383	1,275	15,638		957	411,296	412,253
2008	49.3	1,370	-	-	4,047	83,311	216,137	2,350	16,989		1,420	235,476	236,896
2007	65.9	1,328	-	-	6,818	82,103	177,620	39,805	12,429		1,393	229,854	231,247
2006	900.3	2,245	-	-	7,032	91,574	147,634	35,922	13,504		3,146	197,060	200,206
2005	52.2	2,214	-	-	10,333	109,138	95,599	2,804	17,134		2,267	115,537	117,804

化審法の旧第三種監視化学物質(通し番号:14)として届出された製造・輸入数量の推移を表2に示す<sup>(3)</sup>。

表2 製造・輸入数量の推移

平成(年度)	2007	2008	2009
製造・輸入数量(t)	27,192	17,970	20,876

注: 製造数量は出荷量を意味し、同一事業所内での自家消費分を含んでいない値を示す

「化学物質の製造・輸入量に関する実態調査」によると、モノアルキル(C=3-9)フェノールの2004年度における製造(出荷)及び輸入量は10,000~100,000t/年未満<sup>(4)</sup>、2007年度は100,000~1,000,000t/年未満<sup>(5)</sup>である。本物質の生産量、輸出入量の推移を表3に示す。

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100t以上である<sup>(6)</sup>。

表3 生産量<sup>(7)</sup>、輸出入量<sup>(8)</sup>の推移

年	2002	2003	2004	2005	2006
生産量 (t) <sup>a)</sup>	10,000	15,000	15,000	18,000	18,000
輸入量 (t) <sup>b)</sup>	1,373	609	1,802	3,043	3,564
輸出量 (t) <sup>b)</sup>	8,032	8,852	9,292	9,317	10,416
年	2007	2008	2009	2010	2011
生産量 (t) <sup>a)</sup>	15,000	15,000	15,000	15,000	- <sup>c)</sup>
輸入量 (t) <sup>b)</sup>	3,275	4,018	3,909	4,117	6,431
輸出量 (t) <sup>b)</sup>	11,683	9,358	9,030	10,492	2,960

注：a) 推定値

b) オクチルフェノール及びニルフェノール並びにこれらの異性体並びにこれらの塩

c) 公表されていない

## 出典)

### 物理化学的特性等

- (1) Lide, D.R. ed. (2012): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2012), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- (2) 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: 269.
- (3) Verschueren, K. ed. (2009): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 5th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).
- (4) OECD (2005) : OECD SIDS Initial Assessment Report PHENOL, 4-(1,1,3,3,-TETRAMETHYLBUTYL)-:pp.54.
- (5) 厚生労働省, 経済産業省, 環境省 : 化審法データベース (J-CHECK)., (<http://www.safe.nite.go.jp/jcheck>, 2012.06.22 現在).
- (6) 財団法人化学物質評価研究機構 (2002): 既存化学物質安全性 (ハザード) 評価シート.
- (7) 通産省公報(1978.12.12).
- (8) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.00.
- (9) 化学工業日報社(2012) : 16112 の化学商品.
- (10) 環境省(2012) : 化学物質ファクトシート - 2011 年度版 - .
- (11) OECD ( 1995 ) : SIDS Initial Assessment Report PHENOL, 4-(1,1,3,3-TETRAMETHYLBUTYL)-

## 水環境中での挙動

- (1) OECD (1995) : SIDS Initial Assessment Report PHENOL, 4-(1,1,3,3-TETRAMETHYLBUTYL)-
- (2) 環境省 (2001) : 平成 13 年度第 2 回内分泌攪乱化学物質問題検討会 資料 5

## 化管法による全国の排出量、化審法による生産量

- (1) 経済産業省製造産業局化学物質管理課、環境省環境保健部環境安全課 : 平成 17 年度 ~ 平成 22 年度特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律(化学物質排出把握管理促進法)第 11 条に基づき開示する個別事業所データ.
- (2) 製品評価技術基盤機構 : 届出外排出量の推計値の対象化学物質別集計結果 算出事項(対象業種・非対象業種・家庭・移動体)別の集計 表 3-1 全国.
- (3) 経済産業省(通商産業省) 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律(化審法)第二十五条の二第二項の規定に基づき、同条第一項の届出に係る製造数量及び輸入数量を合計した数量として公表された値.
- (4) 経済産業省(2007) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 16 年度実績)の確報値,[http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/kasinhou/jittachousa/kakuhou18.html](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/jittachousa/kakuhou18.html), 2007.4.6 現在).
- (5) 経済産業省(2009) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 19 年度実績)の確報値,[http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/kasinhou/kakuhou19.html](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/kakuhou19.html), 2009.12.28 現在).
- (6) 薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会 PRTR 対象物質調査会、化学物質審議会管理部会、中央環境審議会環境保健部会 PRTR 対象物質等専門委員会合同会合(第 4 回)(2008) : 参考資料 1 現行化管法対象物質の有害性・暴露情報, <http://www.env.go.jp/council/05hoken/y056-04.html>, 2008.11.6 現在).
- (7) 化学工業日報社(2004) : 14504 の化学商品; 化学工業日報社(2005) : 14705 の化学商品; 化学工業日報社(2006) : 14906 の化学商品; 化学工業日報社(2007) : 15107 の化学商品; 化学工業日報社(2008) : 15308 の化学商品; 化学工業日報社(2009) : 15509 の化学商品; 化学工業日報社(2010) : 15710 の化学商品; 化学工業日報社(2011) : 15911 の化学商品; 化学工業日報社(2012) : 16112 の化学商品.
- (8) 財務省 : 貿易統計(<http://www.customs.go.jp/toukei/info/>), 2012.6.20 現在)

### 3. アニリン

アニリンは、ベンゼンの1つの水素原子をアミノ基で置換した芳香族化合物であり、示性式  $C_6H_5NH_2$  で示される。なお、本報告の文中及び表中の( )内の数字は出典番号を示している。

#### (1) 物理化学的特性等について

本物質の構造を図1、物理化学的特性等を表1に取りまとめた。

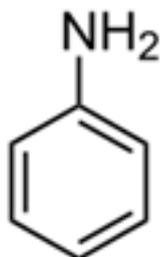


図1 アニリンの構造式

表1 アニリンの物理化学的特性等

融点	-6 (1)、-5.98 (3)	
沸点	184.1 (1)、184~186 (2)、184.4 (3)	
密度	1.0217 (20 ) (1)	
蒸気圧	0.68mmHg(25 )(=90 Pa) (1)、0.49mmHg(25 )(3)	
解離定数(pKa)	4.87 (25 ) (1)、4.60 (25 ) (3)	
オクタノール/水分配係数 (log K <sub>ow</sub> )	0.90 (1), (3)、0.84(4)	
水溶解度	3.6 × 10 <sup>4</sup> mg/L (25 ) (3)	
ヘンリー定数	2.3 × 10 <sup>-6</sup> atm・m <sup>3</sup> /mol (水溶解度 3.6 × 10 <sup>4</sup> mg/L、蒸気圧 0.68mmHg による計算結果)	
生物分解性	好氣的	良分解性(5)、BOD(NH <sub>3</sub> ) 85%、TOC 99%、HPLC 100% (6)
	嫌氣的	生分解しない(7)
化学分解性	加水分解性	水環境中では加水分解されない(7)
生物濃縮性(BCF)	3.2(計算値)(8)	
土壌吸着性(K <sub>oc</sub> )	70(計算値)(9)	

アニリンの製造方法には、ニトロベンゼンを鑄鉄の微粉と塩酸で還元蒸留する、水素気流中で銅、ニッケル、白金触媒の存在下で還元する接触反応による、クロロベンゼンを銅触媒の存在下でアンモニアと加圧下に加熱する製法が知られている。(10)

アニリンは、特有の臭いがある無色透明または淡黄色の液体で、揮発性物質である。空气中に放置すると、徐々に酸化されて赤褐色になる。(11)

アニリンは、他の化学物質の原料として用いられ、主に硬質ウレタンフォームや接着剤・塗料などの原料であるジフェニルメタンジイソシアネート（MDI）の原料として使用されている。この他、染料、医薬品、農薬やゴム製品をつくる化学物質の原料に使われているほか、化審法の分解度試験において微生物による分解性を判断する標準物質とされている。（11）

## （2）水環境中での挙動

平成 14（2002）年度から平成 20（2008）年度に調べられた我が国の淡水域からは、最大で、180 $\mu$ g/L のアニリンが検出され、検出下限値 0.02～0.06 $\mu$ g/L の範囲の中での検出率は、13～46% の範囲である。

ヘンリー定数を基にした水中から大気中へのアニリンの揮散について、モデル河川（水深 1 m、流速 1 m/秒、風速 3 m/秒）での半減期は 12 日、また、モデル湖水（水深 1 m、流速 0.05 m/秒、風速 0.5 m/秒）での半減期は 131 日と見積もられている。（1）

アニリンの非解離状態での土壌吸着係数  $K_{oc}$  の値は 45 であるが、解離定数  $pK_a$  が 4.60 であることから、酸性に傾いた環境水中では部分的にプロトン付加体の状態で存在するので、懸濁物質及び底質汚泥に吸着されやすいと推定される。（1）

水環境中に排出されたアニリンは、主に生分解により水中から除去されると推定される。なお、日射量が多い場合には、表層水中での光分解による除去の可能性もある。（1）

## （3）化学物質排出把握管理促進法（化管法）による全国の排出量、化学物質審査規制法（化審法）による生産量

表 1 2005 年度～2010 年度における化管法での排出量（1、2）  
（アニリン）

排出年度	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	当該事業所外	対象業種	非対象業種	家庭	移動体			
2010	3,124	7,590			1,047	554,798		1,035			10,715	1,035	11,750
2009	2,698	10,014			975	456,972		1,731			12,712	1,731	14,443
2008	2,912	10,128			1,728	581,462		1,750			13,040	1,750	14,790
2007	3,064	27,017			1,747	827,564		2,284			30,081	2,284	32,365
2006	3,130	28,437			2,277	871,824		2			31,567	2	31,569
2005	2,959	28,184			2,495	556,845		3			31,143	3	31,146

「化学物質の製造・輸入量に関する実態調査」によると、本物質の 2001 年度、2004 年度及び 2007 年度における製造（出荷）及び輸入量はそれぞれ 100,000～1,000,000t/年未満である<sup>(3)</sup>。本物質の化審法に基づき公表された 2009 年度における製造・輸入数量は 294,943t であり<sup>(4)</sup>、2010 年度は 321,138t である<sup>(5)</sup>。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 100t 以上である<sup>(6)</sup>。

本物質の生産量、輸出入量の推移を表2に示す。

表2 生産量<sup>(7)</sup>、輸出入量<sup>(8)</sup>の推移

年	2002	2003	2004	2005	2006
生産量 (t)	237,436	259,842	261,854	324,383	377,584
輸入量 (t) <sup>a)</sup>	16,198	16,378	21,239	11,658	96
輸出量 (t) <sup>a)</sup>	-	-	-	-	-
年	2007	2008	2009	2010	2011
生産量 (t)	333,126	349,253	293,332	362,445	334,986
輸入量 (t) <sup>a)</sup>	16	32	220	1,392	1,570
輸出量 (t) <sup>a)</sup>	-	-	-	-	-

注：a) 普通貿易統計[少額貨物(1品目が20万円以下)、見本品等を除く]品別国別表より

## 出典)

### 物理化学的特性等

- (1) Lide, D.R. ed. (2012): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2012), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- (2) O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM).
- (3) 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: 35.
- (4) Hansch, C. et al. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book: 20.
- (5) 通産省公報(1993.12.28).
- (6) 厚生労働省, 経済産業省, 環境省: 化審法データベース (J-CHECK). (<http://www.safè.nite.go.jp/jcheck>, 2012.06.20 現在).
- (7) European Commission (2004): European Union Risk Assessment Report 1st Priority List Volume 50, Aniline.
- (8) U.S. Environmental Protection Agency, BCFBAF™ v.3.01.
- (9) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.00.
- (10) 化学工業日報社(2012): 16112 の化学商品.
- (11) 環境省(2012): 化学物質ファクトシート - 2011 年度版 - .

### 水環境中での挙動

- (1) 財団法人 化学物質評価研究機構, 独立行政法人 製品評価技術基盤機構 (2007) 化学物質の初期リスク評価書 No.63 アニリン). (独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構 委託事業)

## 化管法による全国の排出量、化審法による生産量

- (1) 経済産業省製造産業局化学物質管理課、環境省環境保健部環境安全課：平成 17 年度～平成 22 年度特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律(化学物質排出把握管理促進法)第 11 条に基づき開示する個別事業所データ。
- (2) 製品評価技術基盤機構：届出外排出量の推計値の対象化学物質別集計結果 算出事項(対象業種・非対象業種・家庭・移動体)別の集計 表 3-1 全国。
- (3) 経済産業省(2003)：化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 13 年度実績)の確報値,  
([http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/new\\_page/10/2.htm](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/new_page/10/2.htm), 2005.10.2 現在).経済産業省(2007)：化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 16 年度実績)の確報値,  
([http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/kasinhou/jittaichousa/kakuhou18.html](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/jittaichousa/kakuhou18.html), 2007.4.6 現在). ; 経済産業省(2009)：化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 19 年度実績)の確報値,  
([http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/kasinhou/kakuhou19.html](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/kakuhou19.html), 2009.12.28 現在).
- (4) 経済産業省(通商産業省) 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律(化審法)第二十五条の二第二項の規定に基づき、同条第一項の届出に係る製造数量及び輸入数量を合計した数量として公表された値。
- (5) 経済産業省(2012)：一般化学物質等の製造・輸入数量(22 年度実績)について,  
([http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/kasinhou/information/H22jisiseki-matome-ver2.html](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/H22jisiseki-matome-ver2.html), 2012.3.30 現在).
- (6) 薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会 PRTR 対象物質調査会、化学物質審議会管理部会、中央環境審議会環境保健部会 PRTR 対象物質等専門委員会合同会合(第 4 回)(2008)：参考資料 1 現行化管法対象物質の有害性・暴露情報, (<http://www.env.go.jp/council/05hoken/y056-04.html>).
- (7) 経済産業省経済産業政策局調査統計部(編)(2003)：平成 14 年化学工業統計年報、(財)経済産業調査会；経済産業省経済産業政策局調査統計部(編)(2012)：平成 23 年化学工業統計年報、(財)経済産業調査会。
- (8) 財務省：貿易統計,  
(<http://www.customs.go.jp/toukei/info/>), 2012.06.21 現在).

#### 4. 2,4-ジクロロフェノール

2,4-ジクロロフェノールは、フェノールの2つの水素原子が塩素原子で置換されたフェノール化合物であり、示性式  $\text{Cl}_2\text{C}_6\text{H}_3(\text{OH})$  で示される。また、塩素原子の位置により異性体が存在する。なお、本報告の文中及び表中の( )内の数字は出典番号を示している。

##### (1) 物理化学的特性等について

本物質の構造を図1、物理化学的特性等を表1に取りまとめた。

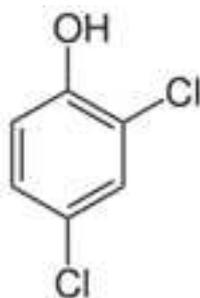


図1 2,4-ジクロロフェノールの構造図

表1 2,4-ジクロロフェノールの物理化学的特性等

融点	43 (1)、45 (2)、42~43 (3)	
沸点	210 (1)、209~210 (2)、209~210 (3)	
密度	1.38(60 ) (4)	
蒸気圧	0.067mmHg(25 ) (3)	
解離定数(pKa)	7.89(3)	
オクタノール/水分配係数 (log K <sub>OW</sub> )	3.23 (1)、3.06(3)、(5)	
水溶解度	5.5 × 10 <sup>3</sup> mg/1000g (25 ) (1)、4.5 × 10 <sup>3</sup> mg/L (20 ) (3)	
ヘンリー定数	3.2 × 10 <sup>-6</sup> atm・m <sup>3</sup> /mol (水溶解度 4.5 × 10 <sup>3</sup> mg/L、蒸気圧 0.067mmHg による計算結果)	
生物分解性	好氣的	BOD 0%、TOC 2%、HPLC 9% (6) (試験期間：4 週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L)
	嫌氣的	馴化した微生物では分解し、4-クロロフェノールが主に生成する。(4)
化学分解性	加水分解性	加水分解しないと予想される(4)
生物濃縮性(BCF)	濃縮性がない又は低い(7) 7.1~69 (試験生物：コイ、試験期間：8 週間、試験濃度：30μg/L)、 10~55 (試験生物：コイ、試験期間：8 週間、試験濃度：3μg/L) (6)	
土壌吸着性(K <sub>oc</sub> )	490(計算値)(8)	

2,4-ジクロロフェノールは、塩素ガスあるいは塩化スルフリル ( $\text{SO}_2\text{Cl}_2$ ) によりフェノールを塩素化することで合成される。(4)

本物質の主な用途は、一般分析(試薬)(9)、除草剤の合成中間体(10)、農薬(殺虫剤、除草剤)・染料原料(11)とされている。

## (2) 水環境中での挙動

平成14(2002)年度から平成23(2011)年度に調べられた我が国の淡水域からは、最大で、 $0.88\mu\text{g/L}$ の2,4-ジクロロフェノールが検出され、検出下限値  $0.001\sim 1\mu\text{g/L}$  の範囲の中での検出率は  $0\sim 7\%$  の範囲である。

大気に放出された場合には、光化学反応により生じる水酸基(OH)ラジカルと反応し、半減期5日程度で分解する。2,4-ジクロロフェノールは酸性物質( $\text{pK}_a$ 、7.8)であり、その化学形態(解離したイオンと中性分子の割合)は、環境媒体のpHによって異なる。(1)

本物質の環境中への発生源の可能性として、除草剤の2,4-D(2,4-Dichlorophenoxyacetic acid; 2,4-ジクロロフェノキシ酢酸)、その塩類及びそのエステル類の分解やフェノール含有水の塩素化が挙げられている。(2)

底質への吸着の割合もpHに依存する。多くの生物分解の試験により、嫌氣的にも好氣的にも微生物により分解することが知られている。(1)

水中では、光反応により生じる酸化剤(一重項酸素、水酸基ラジカル)との反応のほか、直接的に光分解される。(1)

## (3) 化学物質排出把握管理促進法(化管法)による全国の排出量、化学物質審査規制法(化審法)による生産量

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。

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以上100t未満である<sup>(1)</sup>。1998年における生産量、輸入品は、それぞれ200t、20~30tとされており、1997年においても生産量、輸入品ともに同数量とされている<sup>(2)</sup>。

本物質の環境中への発生源の可能性として、除草剤の2,4-D(2,4-Dichlorophenoxyacetic acid; 2,4-ジクロロフェノキシ酢酸)の分解やフェノール含有水の塩素化が挙げられている<sup>(3)</sup>。

## 出典)

### 物理化学的特性等

- (1) Lide, D.R. ed. (2012): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2012), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- (2) O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM).
- (3) 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: 235.
- (4) OECD High Production Volume Chemicals Program(2006) : SIDS(Screening Information Data Set) Initial Assessment Report,2,4-Dichlorophenol.
- (5) Hansch, C. et al. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book: 17.
- (6) 厚生労働省, 経済産業省, 環境省: 化審法データベース (J-CHECK)., (<http://www.safe.nite.go.jp/jcheck>, 2012.06.20 現在).
- (7) 通産省公報(1982.12.28).
- (8) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.00.
- (9) 化学工業日報社(2012) : 16112 の化学商品.
- (10) 小池順一、千室麻由子、千田千代子、西村和彦 (2004) : 川崎市内の河川、海域における化学物質濃度分布調査結果 (7) - SPEED'98 関連物質を中心にして - . 川崎市公害研究所年報. 31:48-56.
- (11) 独立行政法人 製品評価技術基盤機構: 化学物質総合情報提供システム  
( [http://www.safe.nite.go.jp/japan/sougou/view/TotalSrchInput\\_jp.faces](http://www.safe.nite.go.jp/japan/sougou/view/TotalSrchInput_jp.faces) )

### 水環境中での挙動

- (1) 環境省 (2003) : 水生生物の保全に係る水質環境基準の設定について (第一次報告).
- (2) 小池順一、千室麻由子、千田千代子、西村和彦 (2004) : 川崎市内の河川、海域における化学物質濃度分布調査結果 (7) - SPEED'98 関連物質を中心にして - . 川崎市公害研究所年報. 31:48-56.

### 化管法による全国の排出量、化審法による生産量

- (1) 薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会 P R T R 対象物質調査会、化学物質審議会管理部会、中央環境審議会環境保健部会 P R T R 対象物質等専門委員会合同会合 (第4回) (2008) : 参考資料 2 追加候補物質の有害性・暴露情報, (<http://www.env.go.jp/council/05hoken/y056-04.html>).
- (2) シーエムシー出版 (1999) : ファインケミカルマーケットデータ '99(上巻) : 76.
- (3) OECD(2006) : SIDS INITIAL ASSESSMENT PROFILE, 2,4-Dichlorophenol.