

化学物質の初期リスク評価書

**Ver. 1.0**

**No. 142**

**2,6-キシレノール**

**2,6-Xylenol**

化学物質排出把握管理促進法政令号番号：1-62

**CAS 登録番号：576-26-1**

**2008年10月**

独立行政法人 製品評価技術基盤機構

財団法人 化学物質評価研究機構

委託元 独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構

## 序 文

### 目的

「化学物質の初期リスク評価書」は、独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構から委託された化学物質総合評価管理プログラムの一環である「化学物質のリスク評価及びリスク評価手法の開発」プロジェクトの成果である。このプロジェクトは、「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）の対象化学物質を中心に有害性情報、排出量等の暴露情報など、リスク評価のための基礎データを収集・整備するとともに、これらを利用したリスク評価手法を開発し、評価するものである。

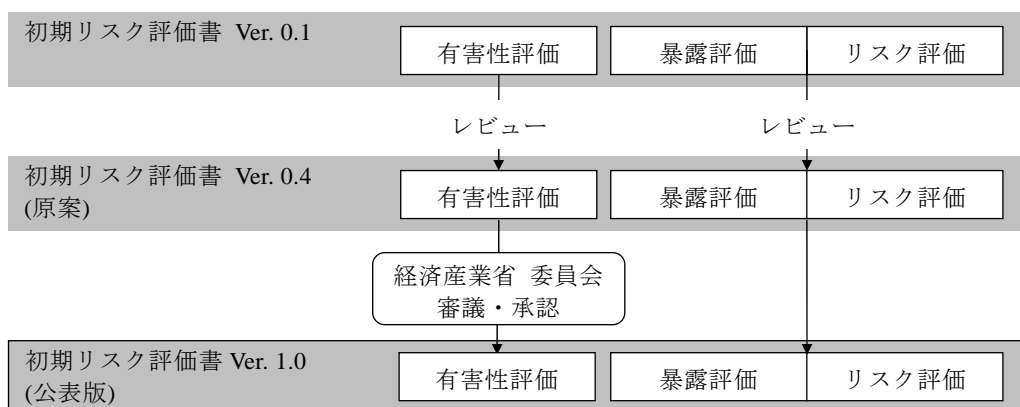
「化学物質の初期リスク評価書」では、環境中の生物及びヒト健康に対する化学物質のリスクについてスクリーニング評価を行い、その結果、環境中の生物あるいはヒト健康に悪影響を及ぼすことが示唆されると判断された場合は、その化学物質に対して更に詳細な調査、解析及び評価等の必要とされる行動の提案を行うことを目的とする。

### 初期リスク評価の対象

化学物質排出把握管理促進法第一種指定化学物質のうち、生産量、環境への排出量及び有害性情報などを基に選択した化学物質を初期リスク評価の対象とする。環境中の生物への影響については、有害性評価手法が国際的に整えられている水生生物を対象とする。ヒト健康への影響については、我が国の住民を対象とし、職業上の暴露は考慮しない。

### 公表までの過程

財団法人 化学物質評価研究機構及び独立行政法人 製品評価技術基盤機構が共同して評価書案を作成し、有害性評価（環境中の生物への影響及びヒト健康への影響）については外部の有識者によるレビューを受け、その後、経済産業省化学物質審議会管理部会・審査部会安全評価管理小委員会の審議、承認を得ている。また、暴露評価及びリスク評価については独立行政法人 産業技術総合研究所によるレビューを受けている。本評価書は、これらの過程を経て公表している。



なお、本評価書の作成に関する手法及び基準は「化学物質の初期リスク評価指針 Ver. 2.0」及び「作成マニュアル Ver. 2.0」として、ホームページ (<http://www.nite.go.jp/>) にて公開されている。

## 要 約

2,6-キシレノールは針状結晶の固体であり、水溶解度は 6.05 g/L (25°C) である。

主な用途は、耐熱性樹脂 (変性 PPE (ポリフェニレンエーテル) 樹脂)、難燃剤やエポキシ樹脂の合成原料であり、また、抗酸化剤、殺菌剤、除草剤、防汚剤、接着剤、防カビ剤の合成原料としても使用される。2002 年の国内供給量は約 25,700 トンであった。2004 年度の PRTR データによると、2,6-キシレノールは 1 年間に全国合計で、大気へ 1.1 トン、公共用水域へ 4 kg 排出され、土壌への排出はない。また、主な環境への排出経路は、化学工業における使用段階での大気への排出であると考えられる。

2,6-キシレノールは水中において、ペルオキシラジカルと速やかに反応し、分解するものと推定される。また生分解され難いと推定されるものの、好氣的条件下では馴化などの条件がととのえば生分解されると推定される。水生生物に対する生物濃縮性は低いと考えられる。

2,6-キシレノールの環境中の濃度として、公共用水域 (河川、湖沼、海域) 及び食物中の濃度が測定されている。2001 年度における河川での測定値の 95 パーセンタイルは  $0.0025 \mu\text{g/L}$  であった。また、2005 年度 of 食物中濃度の調査では、2,6-キシレノールは測定値の 95 パーセンタイルは  $0.50 \mu\text{g/kg}$  であった。

一方、PRTR 排出量データと数理モデルを用いて大気中濃度の推定及び河川水中濃度の推定を行った。その結果、大気中濃度の推定結果の最大値は、 $0.018 \mu\text{g/m}^3$  であった。河川水中濃度は、PRTR 排出量データから、河川への排出がないため、 $0 \mu\text{g/L}$  と推定した。

2,6-キシレノールの水生生物に対するリスク評価を行うための推定環境濃度 (EEC) として、公共用水域中の測定値と、推定値を比較し、より大きい値である  $0.0025 \mu\text{g/L}$  とした。

また、ヒトが 2,6-キシレノールに暴露する経路としては、呼吸による大気からの吸入暴露、飲料水及び食物を摂取することによる経口暴露が主として考えられる。2,6-キシレノールの大気中濃度 ( $0.018 \mu\text{g/m}^3$ : 推定値)、飲料水中濃度 ( $0.0025 \mu\text{g/L}$ : 河川水中濃度で代用) 及び食物中濃度 ( $0.50 \mu\text{g/kg}$ : 測定値) から、ヒトの体重 1kg あたりの 1 日推定摂取量を  $7.2 \times 10^{-3} \mu\text{g/kg/日}$  (吸入経路)、 $0.020 \mu\text{g/kg/日}$  (経口経路) と推定した。

2,6-キシレノールの環境中の水生生物への有害性に関しては、藻類、甲殻類、魚類のいずれについても、急性毒性試験結果のみが得られている。急性毒性試験の最小値は、甲殻類であるブラインシュリンプの 7 日間  $\text{LC}_{50}$  が  $0.5 \text{ mg/L}$  であり、得られた水生生物に対する毒性データのうち最小値である。この値と EEC  $0.0025 \mu\text{g/L}$  を用いて暴露マージン (MOE) を算出した結果、MOE 200,000 はリスク評価に用いた毒性試験データに関する不確実係数積 1,000 より大きく、現時点では 2,6-キシレノールが環境中の水生生物に悪影響を及ぼすことはないと判断する。

2,6-キシレノールの反復投与毒性に関する試験報告はいくつか報告されているが、これらの試験報告は詳細が不明の個所が多く、吸入経路及び経口経路におけるリスク評価に必要な無毒性量 (NOAEL) 等は得られなかった。

2,6-キシレノールの生殖・発生毒性に関する試験報告は得られていない。

2,6-キシレノールの遺伝毒性については、*in vitro* では陰性であったが、*in vivo* でのデータがないため、遺伝毒性の有無は判断できない。また、発がん性については、試験報告はなく、IARC は2,6-キシレノールの発がん性に関する評価を行っていない。

2,6-キシレノールは、ヒトに対して主に吸入と経口の暴露経路からの摂取が推定されるが、吸入経路、経口経路ともに評価できる試験データが無く、MOEを算出できなかった。

以上のことから、2,6-キシレノールは現時点では環境中の水生生物に対し、悪影響を及ぼすことはないと判断する。また、ヒト健康については、リスク評価を行うのに適切な毒性試験報告が得られなかったため、リスク評価を行うことができなかった。今後、毒性試験報告が得られた時点で、再度リスク評価を行うことが望ましい。

## 目 次

1. 化学物質の同定情報.....	1
1.1 物質名 .....	1
1.2 化学物質審査規制法官報公示整理番号 .....	1
1.3 化学物質排出把握管理促進法政令号番号 .....	1
1.4 CAS登録番号.....	1
1.5 構造式 .....	1
1.6 分子式 .....	1
1.7 分子量 .....	1
2. 一般情報 .....	1
2.1 別 名 .....	1
2.2 純 度 .....	1
2.3 不純物 .....	1
2.4 添加剤または安定剤.....	1
2.5 現在の我が国における法規制 .....	1
3. 物理化学的性状 .....	2
4. 発生源情報 .....	3
4.1 製造・輸入量等 .....	3
4.2 用途情報 .....	3
4.3 排出源情報 .....	3
4.3.1 化学物質排出把握管理促進法に基づく排出源.....	3
4.3.2 その他の排出源.....	4
4.4 環境媒体別排出量の推定.....	4
4.5 排出シナリオ .....	5
5. 環境中運命 .....	5
5.1 大気中での安定性.....	5
5.2 水中での安定性 .....	6
5.2.1 非生物的分解性.....	6
5.2.2 生分解性 .....	6
5.2.3 下水処理による除去.....	6
5.3 環境中分布推定 .....	6
5.4 環境水中での動態.....	7
5.5 生物濃縮性 .....	7

6.	暴露評価 .....	7
6.1	環境中濃度 .....	8
6.1.1	環境中濃度の測定結果 .....	8
6.1.2	環境中濃度の推定 .....	9
6.2	水生生物生息環境における推定環境濃度 .....	10
6.3	ヒトへの暴露シナリオ .....	11
6.3.1	環境経由の暴露 .....	11
6.3.2	消費者製品経由の暴露 .....	11
6.4	ヒトの推定摂取量 .....	11
7.	環境中の生物への影響 .....	11
7.1	水生生物に対する影響 .....	11
7.1.1	微生物に対する毒性 .....	11
7.1.2	藻類及び水生植物に対する毒性 .....	12
7.1.3	無脊椎動物に対する毒性 .....	12
7.1.4	魚類に対する毒性 .....	13
7.1.5	その他の水生生物に対する毒性 .....	14
7.2	陸生生物に対する影響 .....	14
7.2.1	微生物に対する毒性 .....	14
7.2.2	植物に対する毒性 .....	14
7.2.3	動物に対する毒性 .....	14
7.3	環境中の生物への影響 (まとめ) .....	14
8.	ヒト健康への影響 .....	15
8.1	生体内運命 .....	15
8.2	疫学調査及び事例 .....	15
8.3	実験動物に対する毒性 .....	15
8.3.1	急性毒性 .....	15
8.3.2	刺激性及び腐食性 .....	16
8.3.3	感作性 .....	16
8.3.4	反復投与毒性 .....	16
8.3.5	生殖・発生毒性 .....	18
8.3.6	遺伝毒性 .....	18
8.3.7	発がん性 .....	19
8.4	ヒト健康への影響 (まとめ) .....	19
9.	リスク評価 .....	20
9.1	環境中の生物に対するリスク評価 .....	20
9.1.1	リスク評価に用いる推定環境濃度 .....	20

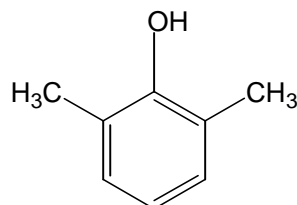
9.1.2	リスク評価に用いる無影響濃度 .....	20
9.1.3	暴露マージンと不確実係数積の算出 .....	21
9.1.4	環境中の生物に対するリスク評価結果 .....	21
9.2	ヒト健康に対するリスク評価 .....	21
9.2.1	リスク評価に用いるヒトの推定摂取量 .....	21
9.2.2	リスク評価に用いる無毒性量 .....	22
9.2.3	暴露マージンと不確実係数積の算出 .....	22
9.2.4	ヒト健康に対するリスク評価結果 .....	22
9.3	まとめ .....	23
文 献	.....	24

## 1. 化学物質の同定情報

キシレノールには 5 種の異性体が存在している。化学物質排出把握管理促進法では、2,6-体 (政令号番号：1-62) 及び 2,4-体 (政令号番号：2-17) は指定されているが、その他の異性体は指定されていない。本評価書では、2,6-キシレノールについて評価を行う。

- 1.1 物質名 : 2,6-キシレノール
- 1.2 化学物質審査規制法官報公示整理番号 : 3-521、4-57
- 1.3 化学物質排出把握管理促進法政令号番号 : 1-62
- 1.4 CAS登録番号 : 576-26-1 (2,6-体)<sup>注)</sup>  
注：キシレノールは、2つのメチル基の位置の違いにより 5 種の異性体が存在し、それぞれ CAS 登録番号が異なる。  
526-75-0 (2,3-体)  
105-67-9 (2,4-体)  
95-87-4 (2,5-体)  
95-65-8 (3,4-体)  
108-68-9 (3,5-体)  
1300-71-6 (異性体混合物)

## 1.5 構造式



- 1.6 分子式 : C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>O
- 1.7 分子量 : 122.17

## 2. 一般情報

### 2.1 別名

2,6-ジメチルフェノール、2-ヒドロキシ-*m*-キシレン、1-ヒドロキシ-2,6-ジメチルベンゼン

### 2.2 純度

99%以上 (一般的な製品) (化学物質評価研究機構, 2002)

### 2.3 不純物

2,4-キシレノール (一般的な製品) (化学物質評価研究機構, 2002)

### 2.4 添加剤または安定剤

無添加 (一般的な製品) (化学物質評価研究機構, 2002)

### 2.5 現在の我が国における法規制

化学物質排出把握管理促進法: 第一種指定化学物質



化学物質審査規制法: 第三種監視化学物質  
 消防法: 指定可燃物可燃性固体類  
 下水道法: 水質基準 5 mg/L (フェノールとして<sup>注1)</sup>)  
 水質汚濁防止法: 排水基準 5 mg/L (フェノールとして<sup>注1)</sup>)  
 海洋汚染防止法: 有害液体物質Y類 (キシレノール、溶融状のもの)  
 船舶安全法: 毒物類 (キシレノール、液体・固体)  
 航空法: 毒物 (キシレノール、液体・固体)  
 港則法: 毒物類 (キシレノール類、溶融状のもの)  
 食品衛生法: 指定添加物 (フェノール類<sup>注2)</sup>)

注 1: 下水道法及び水質汚濁防止法では、JIS K0102 で規定されている方法でフェノール類を検定する。フェノール類には、フェノールの他に*o*-、*m*-位置に置換基を持つキシレノールなどのフェノール誘導体が該当する。

注 2: 食品衛生法では、指定添加物として、毒性が強いと一般に認められるものを除くフェノール類が認められており、2,6-キシレノールは具体的品目に該当している。

参考: 下水道法の水質基準では、フェノール類が規定されており、フェノールとして 0.005 mg/L 以下とされている。フェノール及び 5 種のフェノール誘導体が該当し、キシレノール類 (2,6-キシレノールも含まれる) は該当しない。

### 3. 物理化学的性状

外 観 : 針状結晶 (Merck, 2001)  
 融 点 : 49°C (Merck, 2001)  
 沸 点 : 203°C (Merck, 2001)  
 引 火 点 : 86°C (密閉式) (化学物質評価研究機構, 2006)  
 発 火 点 : データなし  
 爆 発 限 界 : 1.04 vol % (空气中、下限界値) (化学物質評価研究機構, 2006)  
 比 重 : 1.132 (25°C/25°C) (浅原ら, 2004)  
 蒸 気 密 度 : 4.21 (空気=1、計算値)  
 蒸 気 圧 : 21 Pa (20°C、外挿値) (Howard and Meylan, 1991)  
 分 配 係 数 : オクタノール/水分配係数  $\log Kow = 2.36$  (測定値)、2.61 (推定値) (SRC:KowWin, 2006)  
 解 離 定 数 :  $pKa = 10.22$  (Howard and Meylan, 1991)  
 スペクトル : 主要マススペクトルフラグメント  
                    $m/z$  122 (基準ピーク = 1.0)、107 (0.92)、77 (0.42) (NIST, 1998)  
 吸 脱 着 性 : 土壌吸着係数  $Koc = 730$  (推定値、pH 依存性あり) (SRC: PcKocWin, 2006)  
 溶 解 性 : 水 : 6.05 g/L (25°C) (Howard and Meylan, 1991)  
                   アルコール : クロロホルム、ベンゼン : 混和 (Merck, 2001)  
 ハンリー定数:  $0.674 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$  ( $6.65 \times 10^{-6} \text{ atm} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$ ) (25°C、測定値) (SRC: HenryWin, 2006)  
 換 算 係 数 : (気相、20°C)  $1 \text{ ppm} = 5.08 \text{ mg}/\text{m}^3$ 、 $1 \text{ mg}/\text{m}^3 = 0.197 \text{ ppm}$  (計算値)

## 4. 発生源情報

### 4.1 製造・輸入量等

2,6-キシレノールの2000年から2002年までの3年間の製造量及び国内供給量を表4-1に示す(製造量: SRI international, 2001; 国内供給量: 製品評価技術基盤機構, 2004)。2003年以降の情報は得られていない。

表 4-1 2,6-キシレノールの製造・国内供給量 (トン)

年	2000	2001	2002
製造量	—	35,000	—
国内供給量	39,500	25,900	25,700

(製造量: SRI international, 2001; 国内供給量: 製品評価技術基盤機構, 2004)

—: 情報なし

また、クレオソート油中に0.4%以下の2,6-キシレノールが含まれているという情報がある(東京都, 2002)。クレオソート油の9割以上はカーボンブラックの製造用、残りが木材防腐剤として使用されており、2005年におけるクレオソート油の年間生産量は90万トン、輸入量は6万8千トンと報告されている(日本芳香族工業会, 2006)。

### 4.2 用途情報

2,6-キシレノールの用途及びその使用割合を表4-2に示す(製品評価技術基盤機構, 2004)。

2,6-キシレノールは耐熱性樹脂(変性PPE(ポリフェニレンエーテル)樹脂)、難燃剤やエポキシ樹脂の合成原料として使用される。

表 4-2 2,6-キシレノールの用途別使用量の割合

用途		割合 (%)
合成原料	耐熱性樹脂 (変性PPE樹脂)	95
	難燃剤、エポキシ樹脂	5
合計		100

(製品評価技術基盤機構, 2004)

また、抗酸化剤、殺菌剤、除草剤、防汚剤、接着剤、防カビ剤の合成原料としても使用されている(化学物質評価研究機構, 2002)。

### 4.3 排出源情報

#### 4.3.1 化学物質排出把握管理促進法に基づく排出源

化学物質排出把握管理促進法に基づく「平成16年度届出排出量及び移動量並びに届出外排

出量の集計結果」(経済産業省・環境省, 2006) (以下、「2004 年度 PRTR データ」と言う。) によると、2,6-キシレノールは1年間に全国合計で届出事業者から大気へ1.1 トン、公共用水域へ4 kg 排出され、廃棄物として162 トン、下水道に99 kg 移動している。土壌への排出はない。また届出外排出量としては対象業種の届出外事業者、非対象業種、家庭、移動体からの排出量は推計されていない。

#### a. 届出対象業種からの排出量と移動量

2004 年度 PRTR データに基づき、2,6-キシレノールの届出対象業種別の排出量と移動量を表 4-3 に示す (経済産業省・環境省, 2006)。

届出対象業種からの2,6-キシレノールの排出量は、化学工業からのみで、大気へ1.1 トン、公共用水域4 kg 排出され、廃棄物として162 トン、下水道へ99 kg 移動している。土壌への排出はない。また、環境への排出量より、むしろ廃棄物としての移動量のほうが多い。

表 4-3 2,6-キシレノールの届出対象業種別の排出量及び移動量 (2004 年度実績) (トン/年)

業種名	届出					排出量合計	
	排出量			移動量		排出計	割合 (%)
	大気	公共用水域	土壌	廃棄物	下水道		
化学工業	1.1	0.004	0	162	0.099	1.1	100

(経済産業省・環境省, 2006)

#### 4.3.2 その他の排出源

2,6-キシレノールを含むクレオソート油が木材防腐剤等として使用されることで環境中へ排出される可能性が考えられる。

なお、クレオソート油中の2,6-キシレノールの含有率は0.4%以下と低く、クレオソート油の使用による2,6-キシレノールの排出はPRTRの推定の対象となっていない。

#### 4.4 環境媒体別排出量の推定

各排出源における2,6-キシレノールの環境媒体別排出量を表 4-4 に示す (経済産業省・環境省, 2006)。

2,6-キシレノールの環境媒体別排出量は、対象業種の届出外事業者、非対象業種、家庭、移動体のいずれからも排出が推計されていないことから、届出業種の環境媒体別の排出量とする。

以上のことから2,6-キシレノールは大気へ1.1 トン、公共用水域へ4 kg 排出され、土壌への排出はない (経済産業省・環境省, 2006)。

ただし、廃棄物としての移動量及び下水道への移動量については、各処理施設における処理後の環境への排出を考慮していない。

表 4-4 2,6-キシレノールの環境媒体別排出量 (2004 年度実績) (トン/年)

排出区分	大気	公共用水域	土壌
対象業種届出	1.1	0.004	0

(経済産業省・環境省, 2006)

また、公共用水域への排出量 4 kg については、すべて海域への排出として届け出られている (経済産業省, 2006)。

#### 4.5 排出シナリオ

2002 年度の 2,6-キシレノールの製造量及び 2003 年度の製造段階における排出原単位 (日本化学工業協会, 2005) から、2,6-キシレノールの製造段階での排出はないものと推定される (製品評価技術基盤機構, 2007)。

また、2,6-キシレノールの使用段階では、用途情報及び 2004 年度 PRTR データから判断して、化学工業における大気への排出が主であると考えられる。

なお、2,6-キシレノールを含むクレオソート油が木材防腐剤等として使用されることで環境中へ排出される可能性が考えられる。

### 5. 環境中運命

#### 5.1 大気中での安定性

##### a. OH ラジカルとの反応性

対流圏大気中では、2,6-キシレノールと OH ラジカルとの反応速度定数は  $6.60 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{分子}/\text{秒}$  (25°C、測定値) である (SRC:AopWin, 2006)。OH ラジカル濃度を  $5 \times 10^5 \sim 1 \times 10^6 \text{ 分子}/\text{cm}^3$  とした時の半減期は 3~6 時間と計算される。

##### b. オゾンとの反応性

調査した範囲内では、2,6-キシレノールとオゾンとの反応性に関する報告は得られていない。

##### c. 硝酸ラジカルとの反応性

調査した範囲内では、2,6-キシレノールと硝酸ラジカルとの反応性に関する報告は得られていない。しかし、フェノール類の硝酸ラジカルとの反応速度定数は他の芳香族化合物と比較して大きいことが示されている (Carter et al., 1981)。構造が類似している *m*-クレゾールの硝酸ラジカルとの反応速度定数は  $2 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{分子}/\text{秒}$  (25°C、測定値) であり (SRC:AopWin, 2006)、硝酸ラジカル濃度を  $2.4 \times 10^8 \sim 2.4 \times 10^9 \text{ 分子}/\text{cm}^3$  (10~100 ppt) とした時の半減期は 0.2~2 分と計算される。したがって、2,6-キシレノールについても、対流圏大気中では、硝酸ラジカルと速やかに反応すると推定される。

#### d. 直接光分解性

2,6-キシレノールは 290 nm以上の光を吸収すると推定され、対流圏大気中では、直接光分解する可能性がある (U.S. NLM:HSDB, 2006)。

### 5.2 水中での安定性

#### 5.2.1 非生物的分解性

2,6-キシレノールは、加水分解を受けやすい化学結合がないので、水環境中では加水分解されない (U.S. NLM:HSDB, 2006)。構造が類似しているフェノールのペルオキシラジカルとの反応速度定数は  $1 \times 10^4 \text{ L/mol/秒}$  (30°C) であり、環境水中に存在しているペルオキシラジカル濃度を  $1 \times 10^{-9} \text{ mol/L}$ とした時の半減期は 0.8 日と計算されており (Mill, 1982)、2,6-キシレノールについても、環境水中のペルオキシラジカルと速やかに反応し、分解すると推定される。

#### 5.2.2 生分解性

2,6-キシレノールは、化学物質審査規制法に基づく好氣的生分解性試験では、被験物質濃度 100 mg/L、活性汚泥濃度 30 mg/L、試験期間 4 週間の条件において、生物化学的酸素消費量 (BOD) 測定での分解率は 2%であり、難分解性と判定されている。なお、高速液体クロマトグラフ (HPLC) 測定での分解率は 1%であった (経済産業省, 2002)。

馴化した活性汚泥を用いたスクリーニング試験では、2,6-キシレノールは、5 日間の化学的酸素消費量 (COD) 測定での分解率は 94.3%であった (Pitter, 1976)。

一方、コールタールで汚染された地下水を用いた嫌氣的な条件下での試験では、初期濃度 5.44 mg/Lの場合、分解率は 8 週間で 7%であった (Godsy et al., 1983)。

以上のことから、2,6-キシレノールは、生分解され難いが、好氣的条件下では馴化などの条件がととのえば生分解されると推定される。

#### 5.2.3 下水処理による除去

調査した範囲内では、2,6-キシレノールとしての下水処理による除去に関する報告は得られていない。

しかし、フェノール類については、東京都に 20 か所ある下水処理場における下水処理の状況に関する報告 (2002~2004 年度) があり、流入水の濃度は数か所の下水処理場で 0.01 mg/L (フェノールとして 24 時間平均値、下水道法の水質基準値は 5 mg/L) となったことがあったが、処理水中の 2,6-キシレノール濃度はすべて 0.01 mg/L未満 (フェノールとして 24 時間平均値) であった (東京都下水道局, 2006)。

### 5.3 環境中分布推定

2,6-キシレノールが、大気、水域または土壌のいずれかに定常的に排出されて定常状態に到達した状態、すなわち、大気、水域、土壌及び底質間の移動、系外への移動・分解などによる減少が釣り合った後に残存している 2,6-キシレノールの環境中での分布をフガシティブモデル・レベルIII (Mackay et al., 1992) により推定した (表 5-1)。なお、環境への排出は、大気、水域及び土壌の各々に個別に排出される 3 つのシナリオを設定した (化学物質評価研究機構,

2001)。

2,6-キシレノールが大気に排出された場合は土壤に約5割、大気及び水域に2割強分布し、水域に排出された場合は主に水域に分布し、また、土壤に排出された場合は主に土壤に分布するものと推定される。

表5-1 2,6-キシレノールのフガシティモデル・レベルIIIによる環境中分布推定結果

シナリオ	分布 (%)			
	大気	水域	土壤	底質
シナリオ1 (大気中に100%排出)	26.1	24.1	49.3	0.4
シナリオ2 (水域中に100%排出)	0.0	98.3	0.1	1.7
シナリオ3 (土壤中に100%排出)	0.0	3.9	96.0	0.1

(化学物質評価研究機構, 2001)

#### 5.4 環境水中での動態

2,6-キシレノールは、蒸気圧が 21 Pa (20°C)、水に対する溶解度が 6.05 g/L (25°C)、ヘンリー定数が  $0.674 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$  (25°C) である (3章参照)。ヘンリー定数を基にした水中から大気中への2,6-キシレノールの揮散性に関する報告があり、水深1 m、流速1 m/秒、風速3 m/秒のモデル河川での半減期は6日、水深1 m、流速0.05 m/秒、風速0.5 m/秒のモデル湖水での半減期は49日と推算されている (Lyman et al., 1990)。

土壤吸着係数 ( $K_{oc}$ ) の値は、非解離の状態では730 (3章参照) であり、水中の懸濁物質及び底質には吸着されやすいと推定される。一方、解離定数 ( $pK_a = 10.22$ ) (3章参照) から、塩基性の環境水中では2,6-キシレノールの水酸基の一部はプロトンが取れた状態で存在し、腐植物質 (フミン物質) のアミノ基などと結合する可能性がある。

以上のこと及び5.2の結果より、環境水中に2,6-キシレノールが排出された場合は、生分解され難く、水中の懸濁物質に吸着されたものは底質に移行するが、好氣的条件下では馴化などの条件がととのえば生分解されると推定される。

#### 5.5 生物濃縮性

調査した範囲内では、2,6-キシレノールの生物濃縮係数 (BCF) の測定値に関する報告は得られていない。しかし、2,6-キシレノールのオクタノール/水分配係数 ( $\log K_{ow}$ ) は2.36 (3章参照) であることから、化学物質審査規制法に基づく濃縮性試験では、濃縮性がない、または低いと判定されている (経済産業省, 2003)。なお、2,6-キシレノールのBCFは $\log K_{ow}$  の値2.36 (3章参照) から12と計算される (SRC: BcfWin, 2006)。

## 6. 暴露評価

この章では、大気、公共用水域、飲料水、食物中濃度の測定データの収集、整理と、PRTR

排出量データから大気、河川水中濃度の推定を行い、水生生物のリスク評価を行うための推定環境濃度 (EEC) と、ヒト健康のリスク評価を行うための吸入経路及び経口経路の推定摂取量を決定する。

## 6.1 環境中濃度

### 6.1.1 環境中濃度の測定結果

ここでは、環境中濃度に関する既存の測定報告についての調査を行い、その結果の概要を示すとともに、暴露評価に用いる濃度の採用候補を選定する。

#### a. 大気中の濃度

2,6-キシレノールの大気中濃度に関する報告は、調査した範囲内では得られなかった。

#### b. 公共用水域中の濃度

2,6-キシレノールの公共用水域中の濃度として、環境省による 2001 年度の水環境中の要調査項目存在状況調査結果を表 6-1 に示す (環境省, 2002)。この調査は、環境省が水環境中で一定の検出率を超えて検出されている物質、水環境を経由して人の健康や生態系に有害な影響を与える可能性がある物質等を要調査項目に選定し、その水環境中の存在状況を全国的に測定したものである。この調査について、2001 年度における河川での測定値の 95 パーセンタイルを求めると 0.0025  $\mu\text{g/L}$  となる。

表 6-1 2,6-キシレノールの公共用水域中の濃度

調査年度	水域	検出地点数 /調査地点数	検出数 /検体数	検出範囲 ( $\mu\text{g/L}$ )	95 パーセンタイル ( $\mu\text{g/L}$ )	検出限界 ( $\mu\text{g/L}$ )
2001	河川	1/44	1/44	nd-0.029	0.0025	0.005
	湖沼	1/3	1/3	nd-0.093		
	海域	0/3	0/3	nd		

(環境省, 2002)

nd: 不検出

不検出検体は検出限界の 1/2 の値として 95 パーセンタイルを算出

以上の報告より、環境省の 2001 年度の測定結果から算出した 95 パーセンタイルの 0.0025  $\mu\text{g/L}$  を暴露評価に用いる河川水中濃度の採用候補とした。

#### c. 飲料水中の濃度

2,6-キシレノールの水道水中濃度及び地下水中濃度に関する報告は、調査した範囲内では得られなかった。

#### d. 食物中の濃度

2,6-キシレノールの食物中濃度として、日本食品分析センターによる 2005 年度の食事からの化学物質暴露量に関する調査結果を表 6-2 に示す (日本食品分析センター, 2006)。この調

査は、食物中の化学物質の含有状況を把握することを目的としており、全国 10 地域の各 5 世帯の任意の連続 3 日間の朝食、昼食、夕食等を陰膳方式で採取し、分析したものである。

この調査について 2005 年度の測定値の 95 パーセンタイルを求めると  $0.50 \mu\text{g/kg}$  となる。

表 6-2 2,6-キシレノールの食物中の濃度

調査 年度	検出地域数 /調査地域数	検出世帯数 /調査世帯数	検出範囲 ( $\mu\text{g/kg}$ )	95 パーセンタイル ( $\mu\text{g/kg}$ )	検出限界 ( $\mu\text{g/kg}$ )
2005	1/10	1/50	nd-1	0.50	1

(日本食品分析センター, 2006)

nd:不検出

不検出検体は検出限界の 1/2 の値として 95 パーセンタイルを算出

以上の報告より、暴露評価に用いる食物中濃度の測定結果は、日本食品分析センターの 2005 年度の測定結果から算出した 95 パーセンタイルである  $0.50 \mu\text{g/kg}$  とした。

### 6.1.2 環境中濃度の推定

ここでは、数理モデルを用いて大気及び河川の濃度推定を行う。

#### a. 大気中濃度の推定

2,6-キシレノールの2004年度PRTR排出量データと広域大気拡散モデルAIST-ADMER Ver. 1.5 (産業技術総合研究所, 2006; 東野ら, 2003) を用いて、全国11地域 (北海道、東北、北陸、関東、中部、東海、近畿、中国、四国、九州、沖縄) の大気中濃度を推定した。

#### 大気への排出量分布の推定

届出データについては、事業所所在地を排出地点とし、メッシュデータとして排出量分布の推定を行った (製品評価技術基盤機構, 2007)。

#### 計算条件

2,6-キシレノールは、大気環境中ではガス状で存在すると考えられ (U.S. NLM: HSDB, 2006)、以下のように計算条件を設定した。

数理モデル : AIST-ADMER Ver.1.5

計算対象地域 : 全国 (11地域) 5 km×5 kmメッシュ

年間排出量 : 1.1トン (4. 参照)

計算対象期間 : 1年

気象データ : アメダス気象年報 2004 年 (気象業務支援センター, 2006)

パラメータ : 雨による洗浄比<sup>1)</sup> 3,700

<sup>1)</sup> (雨による洗浄比) = 気体定数: $8.314 (\text{Pa} \cdot \text{m}^3/(\text{mol} \cdot \text{K})) \times$  絶対温度: $298 (\text{K}) \div$  ヘンリー定数: $0.674 (\text{Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol})$



大気中での分解係数<sup>2)</sup>  $3.3 \times 10^{-5}$  (1/s)  
 大気からの乾性沈着速度<sup>3)</sup> 0 (m/s)  
 バックグラウンド濃度<sup>3)</sup>  $0 (\mu\text{g}/\text{m}^3)$

## 推定結果

各地域での推定値を表 6-3に示す (製品評価技術基盤機構, 2007)。全国の年平均の最大値は、東海地域における $0.018 \mu\text{g}/\text{m}^3$ であった。

表 6-3 2,6-キシレノールの年平均大気中濃度推定結果

計算対象地域	最小 ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )	最大 ( $\mu\text{g}/\text{m}^3$ )
北海道	$< 10^{-9}$	$< 10^{-9}$
東北	$< 10^{-9}$	$< 10^{-9}$
北陸	$< 10^{-9}$	$1.0 \times 10^{-7}$
関東	$< 10^{-9}$	$< 10^{-9}$
中部	$< 10^{-9}$	$3.6 \times 10^{-5}$
東海	$< 10^{-9}$	0.018
近畿	$< 10^{-9}$	$1.9 \times 10^{-4}$
中国	$< 10^{-9}$	$< 10^{-9}$
四国	$< 10^{-9}$	$< 10^{-9}$
九州	$< 10^{-9}$	$< 10^{-9}$
沖縄	$< 10^{-9}$	$< 10^{-9}$

(製品評価技術基盤機構, 2007)

$10^{-9} \mu\text{g}/\text{m}^3$ 未満の推定結果はすべて「 $< 10^{-9}$ 」と表記した

## b. 河川水中濃度の推定

2,6-キシレノールは2004年度PRTR排出量データによると、河川への排出がないため、河川水中濃度を  $0 \mu\text{g}/\text{L}$  と推定した。なお、4.5で示したクレオソート油中の2,6-キシレノールの排出分は使用量の地域的な分布、排出係数等の情報が調査した範囲では得られなかったため、ここでは考慮していない。また、本評価書では大気、土壌または海域から河川への移動は考慮しない。

## 6.2 水生生物生息環境における推定環境濃度

水生生物が生息する環境における EEC として、河川水中濃度の測定結果の採用候補  $0.0025 \mu\text{g}/\text{L}$  と推定結果  $0 \mu\text{g}/\text{L}$  を比較し、より大きい値である  $0.0025 \mu\text{g}/\text{L}$  とした (6.1.1 b、6.1.2 b 参照)。

= 3,700 (ヘンリー定数は 3、参照)

<sup>2)</sup> (大気中での分解係数) = OHラジカルとの反応速度定数: $6.6 \times 10^{-11} (\text{cm}^3/\text{分子}/\text{s})$  × OHラジカル濃度: $5 \times 10^5 (\text{分子}/\text{cm}^3)$   
 =  $3.3 \times 10^{-5}$  (1/s) (反応速度定数及び濃度は 5.1 参照)

<sup>3)</sup> 乾性沈着速度及びバックグラウンド濃度に関する情報が得られなかったので 0 とした。

## 6.3 ヒトへの暴露シナリオ

### 6.3.1 環境経由の暴露

2,6-キシレノールの環境経由のヒトへの暴露経路は、呼吸による吸入暴露と飲料水及び食物からの経口暴露が主として考えられる。

### 6.3.2 消費者製品経由の暴露

用途情報から、2,6-キシレノールの消費者製品からの暴露の可能性はある(4. 参照)。しかし、2,6-キシレノールの含有率や使用量等に関する定量的な情報が得られていないため、本評価書では考慮しない。

## 6.4 ヒトの推定摂取量

本評価書において各経路からの摂取量を推定する際、成人の大気吸入量を  $20 \text{ m}^3/\text{人/日}$ 、飲料水摂取量を  $2 \text{ L/人/日}$ 、食物の摂取量を  $2,000 \text{ g/人/日}$  とした。

推定摂取量の算出は、以下の仮定に従って求めた。

大気からの摂取量推定に用いる大気中濃度は、大気中濃度の推定結果から最大値  $0.018 \mu \text{ g}/\text{m}^3$  を採用した(6.1.1 a、6.1.2 a 参照)。

飲料水からの摂取量推定に用いる飲料水中濃度は、飲料水に関する測定結果が入手できなかったため、河川水中濃度で代用することとし、河川水中濃度の測定結果から、 $0.0025 \mu \text{ g}/\text{L}$  を採用した(6.1.1 c、6.2 参照)。

食物からの摂取量推定に用いる食物中濃度は、測定結果から  $0.50 \mu \text{ g}/\text{kg}$  を採用した(6.1.1 d 参照)。

これらの仮定のもとに推定したヒトでの摂取量は、以下のとおりである。

$$\text{大気からの摂取量} : 0.018 (\mu \text{ g}/\text{m}^3) \times 20 (\text{m}^3/\text{人/日}) = 0.36 (\mu \text{ g}/\text{人/日})$$

$$\text{飲料水からの摂取量} : 0.0025 (\mu \text{ g}/\text{L}) \times 2 (\text{L}/\text{人/日}) = 0.0050 (\mu \text{ g}/\text{人/日})$$

$$\text{食物からの摂取量} : 0.50 (\mu \text{ g}/\text{kg}) \times 2 (\text{kg}/\text{人/日}) = 1.0 (\mu \text{ g}/\text{人/日})$$

成人の体重を平均  $50 \text{ kg}$  と仮定して、体重  $1 \text{ kg}$  あたりの摂取量を求めると次のようになる。

$$\text{吸入摂取量} : 0.36 (\mu \text{ g}/\text{人/日}) / 50 (\text{kg}/\text{人}) = 7.2 \times 10^{-3} (\mu \text{ g}/\text{kg}/\text{日})$$

$$\text{経口摂取量} : (0.0050 + 1.0) (\mu \text{ g}/\text{人/日}) / 50 (\text{kg}/\text{人}) = 0.020 (\mu \text{ g}/\text{kg}/\text{日})$$

$$\text{合計摂取量} : 7.2 \times 10^{-3} (\mu \text{ g}/\text{kg}/\text{日}) + 0.020 (\mu \text{ g}/\text{kg}/\text{日}) = 0.027 (\mu \text{ g}/\text{kg}/\text{日})$$

## 7. 環境中の生物への影響

### 7.1 水生生物に対する影響

#### 7.1.1 微生物に対する毒性

2,6-キシレノールの微生物に対する毒性試験結果を表 7-1 に示す。

原生動物に対する毒性影響について報告されており、繊毛虫類 (*Tetrahymena pyriformis*) の増殖阻害を指標とした 24 時間  $\text{EC}_{100}$  は  $2.66 \text{ mg}/\text{L}$  であった (Schultz et al., 1978)。

表 7-1 2,6-キシレノールの微生物に対する毒性試験結果

生物種	温度 (°C)	エンドポイント		濃度 (mg/L)	文献
原生動物 <i>Tetrahymena pyriformis</i> (繊毛虫類)	30	24 時間EC <sub>100</sub>	増殖阻害	2.66 (n)	Schultz et al., 1978

(n): 設定濃度

### 7.1.2 藻類及び水生植物に対する毒性

2,6-キシレノールの藻類及び水生植物に対する毒性試験結果を表 7-2 に示す。

淡水緑藻のクロレラ及び水生植物のコウキクサを用いた生長阻害試験について報告されている。クロレラを用いた試験で、バイオマスによって算出された 72 時間EC<sub>50</sub>は 50 mg/Lであった (Huang and Gloyna, 1968)。また、コウキクサに対する 72 時間EC<sub>50</sub>は 460 mg/Lであった (Blackman et al., 1955)。

海産種についての試験報告は得られていない。

表 7-2 2,6-キシレノールの藻類及び水生植物に対する毒性試験結果

生物種	試験法/方式	温度 (°C)	エンドポイント		濃度 (mg/L)	文献
淡水						
<i>Chlorella vulgaris</i> (緑藻、クロレラ)	止水	25	72 時間EC <sub>50</sub>	生長阻害 バイオマス	50 (n)	Huang & Gloyna, 1968
<i>Lemna minor</i> (水生植物、コウキクサ)	止水	25	72 時間EC <sub>50</sub>	生長阻害 バイオマス	460 (n)	Blackman et al., 1955

(n): 設定濃度

太字はリスク評価に用いたデータを示す

### 7.1.3 無脊椎動物に対する毒性

2,6-キシレノールの無脊椎動物に対する毒性試験結果を表 7-3 に示す。

淡水種では、オオミジンコの遊泳阻害を指標とした 24 時間EC<sub>50</sub>は 14.3 mg/Lであった (Devillers, 1988)。海産甲殻類として、ブラインシュリンプに対する 48 時間LC<sub>50</sub>は 2.2 mg/L、7 日間LC<sub>50</sub>は 0.5 mg/L、ベイシュリンプに対する 96 時間LC<sub>50</sub>は 16.5 mg/Lであった (Barahona and Sanchez-Fortun, 1996; McLeese et al., 1979)。また、ムラサキウニの一種 (*Strongylocentrotus droebachiensis*) の受精卵の致死、卵割阻害、色素胞の障害を毒性影響とした試験で、96 時間EC<sub>50</sub>は 1.5 mg/Lであったという報告もあるが (Falk-Petersen et al., 1985)、いずれのエンドポイントを用いたのか不明である。

長期毒性についての試験報告は得られていない。

表 7-3 2,6-キシレノールの無脊椎動物に対する毒性試験結果

生物種	大きさ/ 成長段階	試験法/ 方式	温度 (°C)	硬度 (mg CaCO <sub>3</sub> /L)	pH	エンドポイント	濃度 (mg/L)	文献
<b>淡水</b>								
<i>Daphnia magna</i> (甲殻類、 マダニゴ)	生後 72 時間 以内	止水 助剤 <sup>1)</sup>	20	200	7.8- 8.2	24 時間EC <sub>50</sub> 遊泳阻害	14.3 (n)	Devillers, 1988
	生後 1 時間 以内	止水	18	ND	ND	48 時間LC <sub>50</sub>	11.2 (n)	Kopperman et al., 1974
<b>海水</b>								
<i>Artemia salina</i> (甲殻類、フライ シムシム)	24 時間 幼生	止水 助剤 <sup>2)</sup>	25	塩分濃度: 35‰	8.6	48 時間LC <sub>50</sub> 7 日間LC <sub>50</sub>	2.2 0.5 (n)	Barahona & Sanchez- Fortun, 1996
<i>Crangon septemspinosa</i> (甲殻類、ヘイ シムシム、エビシ ムシム科)	3.8 cm 0.6 g	半止水	10	ND	ND	96 時間LC <sub>50</sub>	16.5 (m)	McLeese et al., 1979
<i>Strongylocen- trotus droebachiensis</i> (ウニ類、ムラサキ ウニの一種)	受精卵	止水	5	ND	ND	96 時間EC <sub>50</sub> 致死、卵割阻害、 色素胞阻害	1.5 (m)	Falk- Petersen et al., 1985

ND: データなし、(m): 測定濃度、(n): 設定濃度

1) アセトン、2) ジメチルスルホキシド

太字はリスク評価に用いたデータを示す

#### 7.1.4 魚類に対する毒性

2,6-キシレノールの魚類に対する毒性試験結果を表 7-4 に示す。

魚類の急性毒性について、淡水魚ではファットヘッドミノーに対する 96 時間LC<sub>50</sub>は 27 mg/L超、8 日間LC<sub>50</sub>は 21 mg/Lであった (Phipps et al., 1981)。また、海水魚では大西洋タラの受精卵の致死、卵割阻害、色素胞の障害を毒性影響とした試験で、96 時間EC<sub>50</sub>は 4 mg/Lであったという報告もあるが (Falk-Petersen et al., 1985)、いずれのエンドポイントを用いたのか不明である。

長期毒性についての試験報告は得られていない。

表 7-4 2,6-キシレノールの魚類に対する毒性試験結果

生物種	大きさ/ 成長段階	試験法/ 方式	温度 (°C)	硬度 (mg CaCO <sub>3</sub> /L)	pH	エンドポイント	濃度 (mg/L)	文献
<b>淡水</b>								
<i>Pimephales promelas</i> (ファットヘッド ミノー)	30-35 日 齢	APHA <sup>1)</sup> 流水	25	43.3-48.5	7.3- 8.6	96 時間LC <sub>50</sub> 8 日間LC <sub>50</sub>	> 27 21 (m)	Phipps et al., 1981
<b>海水</b>								

生物種	大きさ/ 成長段階	試験法/ 方式	温度 (°C)	硬度 (mg CaCO <sub>3</sub> /L)	pH	エンドポイント	濃度 (mg/L)	文献
<i>Gadus morhua</i> (大西洋鱈)	受精卵	止水	5	ND	ND	96時間EC <sub>50</sub> 致死、卵割阻害、 色素胞阻害	4 (m)	Falk- Petersen et al., 1985

ND: データなし、(m): 測定濃度

1) 米国公衆衛生協会 (the American Public Health Association) テストガイドライン

太字はリスク評価に用いたデータを示す

### 7.1.5 その他の水生生物に対する毒性

調査した範囲内では、2,6-キシレノールのその他の水生生物 (両生類等) に関する試験報告は得られていない。

## 7.2 陸生生物に対する影響

### 7.2.1 微生物に対する毒性

調査した範囲内では、2,6-キシレノールの微生物 (土壌中の細菌や菌類) に関する試験報告は得られていない。

### 7.2.2 植物に対する毒性

調査した範囲内では、2,6-キシレノールの植物に関する試験報告は得られていない。

### 7.2.3 動物に対する毒性

調査した範囲内では、2,6-キシレノールの動物に関する試験報告は得られていない。

## 7.3 環境中の生物への影響 (まとめ)

2,6-キシレノールの環境中の生物に対する毒性影響については、致死、遊泳阻害、生長阻害などを指標に検討が行われている。長期毒性や陸生生物に関する試験報告は得られていない。

藻類に対する生長阻害試験では、クロレラを用いた 72 時間EC<sub>50</sub>は 50 mg/Lであり、この値はGHS急性毒性有害性区分IIIに相当し、有害性を示す。

無脊椎動物に対する急性毒性として、淡水種では甲殻類のオオミジンコの遊泳阻害を指標とした 24 時間EC<sub>50</sub>は 14.3 mg/L、海産種では甲殻類のブラインシュリンプに対する 48 時間LC<sub>50</sub>は 2.2 mg/Lであり、ブラインシュリンプの値はGHS急性毒性有害性区分IIに相当し、強い有害性を示す。また、同じ試験での 7 日間LC<sub>50</sub>は 0.5 mg/Lであった。

魚類に対する急性毒性として、ファットヘッドミノアの 96 時間LC<sub>50</sub>は 27 mg/L超であるが、確定値でないためGHS急性毒性有害性区分には分類できない。また、同じ試験での 8 日間LC<sub>50</sub>は 21 mg/Lであった。

以上から、2,6-キシレノールの水生生物に対する急性毒性は、甲殻類に対して GHS 急性毒性有害性区分 II に相当し、強い有害性を示す。長期毒性についての NOEC 等は得られていな

い。

得られた毒性データのうち水生生物に対する最小値は、甲殻類であるブラインシュリンプに対する7日間LC<sub>50</sub>の0.5 mg/Lである。

## 8. ヒト健康への影響

### 8.1 生体内運命

調査した範囲内では、2,6-キシレノールの吸収・分布に関する試験報告は得られていない。

代謝に関する報告としては、ウサギ (体重: 2~3 kg) に 2,6-キシレノール 1,000 mg/kg を経口投与した試験で、尿中への排泄は、未変化体 (2,6-キシレノール)、2,6-キシレノールのグルクロン酸抱合体及び硫酸抱合体として、投与量のそれぞれ 1~3%、50~72%、8~16%が検出され、その他に 2,5-ジヒドロキシ-1,3-ジメチルベンゼンが検出された (Bray et al., 1950a,b,1952)。

### 8.2 疫学調査及び事例

調査した範囲内では、2,6-キシレノールの疫学調査に関する報告は得られていない。

6種のキシレノール異性体及びアルコールの混合物を含む陰イオン界面活性剤を基剤にした病院用殺菌剤 (成分組成比率記載なし) 約250 mL を誤飲した59歳の男性は、吐気、嘔吐、代謝性アシドーシス、乏尿、低血圧、心臓及び腎臓障害を示し、その後死亡した (Watson, 1986)。

なお、U.S.NLM: HSDB (2005) によると、2,6-キシレノールは、ヒトに対して皮膚暴露、吸入暴露により、いずれもフェノールと類似の毒性を示すと報告されており、フェノールから推定される毒性は、皮膚暴露では接触部位の皮膚や粘膜に化学熱傷が生じ、腐食性を示し、臨床症状として、頭痛、めまい、吐気、嘔吐、筋肉のれん縮、中枢神経抑制、精神錯乱、意識喪失などが生じると考えられ、吸入暴露では、頭痛、咳、衰弱、疲労、食欲不振、吐気、嘔吐、不眠症、感覚異常、アルブミン尿症を生じると考えられている。

### 8.3 実験動物に対する毒性

#### 8.3.1 急性毒性

2,6-キシレノールの実験動物に対する急性毒性試験結果を表 8-1 に示す (Larionov, 1976; Maazik, 1968; Reinhart et al., 1967; U.S. NTP, 1986)。

2,6-キシレノールの急性毒性試験の経口投与のLD<sub>50</sub>は、マウスでは450~980 mg/kg、ラットでは296~406 mg/kg、ウサギでは700 mg/kg、モルモットでは2,115 mg/kg超であった。

また吸入暴露のLC<sub>50</sub>は、マウスでは2時間暴露で270 mg/m<sup>3</sup>超、ラットでは4時間暴露で270 mg/m<sup>3</sup>超であり、経皮投与のLD<sub>50</sub>は、マウスでは920 mg/kg、ラットでは2,322 mg/kg、ウサギでは1,000 mg/kgであったという報告がある。

死に至るまでの症状は、マウス及びラットの経口投与のLD<sub>50</sub>値付近の死亡例で、チアノーゼ、胃と腹膜の循環血液量過多 (hypervolemia)、肺の出血がみられ、吸入暴露では、270 mg/m<sup>3</sup>の濃度でマウスに2時間、ラットに4時間暴露したときの症状として、呼吸の阻害、れん縮性振戦、興奮状態がみられたとの記載がある (U.S. NLM: HSDB, 2005)。

表 8-1 2,6-キシレノールの急性毒性試験結果

	マウス	ラット	ウサギ	モルモット
経口 LD <sub>50</sub> (mg/kg)	450-980	296-406	700	>2,115
吸入 LC <sub>50</sub> (mg/m <sup>3</sup> )	>270 (2 時間)	>270 (4 時間)	ND	ND
経皮 LD <sub>50</sub> (mg/kg)	920	2,322	1,000	ND
腹腔内 LD <sub>50</sub> (mg/kg)	150	ND	ND	ND
静脈内 LD <sub>50</sub> (mg/kg)	80	ND	ND	ND

ND: データなし

### 8.3.2 刺激性及び腐食性

2,6-キシレノールをラット、ウサギ、モルモットの皮膚 (20 cm<sup>2</sup>) に局所適用すると適用部位に刺激性を示し、潰瘍を生じる (詳細不明、Larionov, 1976)。また、2,6-キシレノールはウサギの皮膚への適用で腐食性を有する (Reinhart et al., 1967)。ウサギの眼に対して刺激性を有するとした報告がある (EC: IUCLID, 2000)。

これらのデータはいずれも詳細は不明であるが、フェノールとの化学構造の類似性から 2,6-キシレノールはウサギの皮膚及び眼に対し刺激性または腐食性を有すると考えられる。

### 8.3.3 感作性

調査した範囲内では、2,6-キシレノールの感作性に関する試験報告は得られていない。

### 8.3.4 反復投与毒性

2,6-キシレノールの実験動物に対する反復投与毒性試験結果を表 8-2 に示す。

#### a. 経口投与

ラットに2,6-キシレノール0、0.6、6 mg/kg/日を8か月間強制経口投与した反復投与毒性試験で、6 mg/kg/日群で体重への影響 (詳細不明)、血圧低下、血清タンパク質性スルフヒドリル (SH) 基量の減少、内臓器官の変化 (詳細不明) がみられたとする記載があり、NOAELを0.6 mg/kg/日としている (Veldre and Janes, 1979) が、試験の詳細の記載がないことから、本評価書は著者によるNOAELの判断を採用しない。

雄ラットに 2,6-キシレノール 0、0.06、6 mg/kg/日を 8 か月間強制経口投与した反復投与毒性試験で、6 mg/kg/日群で血清中 SH 基量の減少、血圧の低下、肝細胞の脂肪変性、腎臓の硝子滴変性、脾臓の骨髓性細胞及び網内系細胞の増加、脾臓リンパ濾胞の萎縮、心筋細胞の変性がみられ、NOAEL を 0.06 mg/kg/日としている (Maazik, 1968) が、本評価書は、用量の公比が大きいなど、用量の設定が不十分であると考え、著者による NOAEL の判断を採用しない。

#### b. 吸入暴露

ラットに2,6-キシレノール0、1.8、6.1、22 mg/m<sup>3</sup> (0、0.35、1.2、4.3 ppm) を4.5か月間 (4 時間/日、5日/週) 吸入暴露させた結果、6.1 mg/m<sup>3</sup>以上の群で血清中SH基量の減少、尿中フェノール量の増加がみられ、22 mg/m<sup>3</sup>群で血液中のコリンエステラーゼ活性の低下、肝臓の解

毒及び排泄機能の障害がみられた。したがって、著者はNOAELを1.8 mg/m<sup>3</sup>としている (Larionov, 1976)。しかし、試験の詳細の記載がないことから、本評価書は著者によるNOAELの判断を採用しない。

雌雄F344 ラットに2,6-キシレノール0、67、200、670 mg/m<sup>3</sup>を2週間(10回、6時間/日、5日/週)吸入暴露させた結果、670 mg/m<sup>3</sup>で体重増加の抑制(対照群の約90%)がみられ、各回の暴露終了直後の鼻からの赤色分泌物、嗅上皮の壊死/変性、炎症、扁平上皮化生、鼻中隔の癒着(癒着状況不明)がみられ、著者はNOAELを200 mg/m<sup>3</sup>としている(Battelle Memorial Institute, 1991)が、暴露期間が短いため著者によるNOAELの判断を採用しない。

以上、2,6-キシレノールの反復投与毒性に関する試験報告は少なく、入手できた試験報告も、記載が不十分で不明の個所が多いものや、用量の公比が大きいなど用量の設定が不十分であるものがある。そのため、本評価書では経口投与、吸入暴露におけるNOAEL等を設定しない。また、調査した範囲内では、2,6-キシレノールの経皮投与に関する試験報告は得られていない。

表 8-2 2,6-キシレノールの反復投与毒性試験結果

動物種等	投与方法	投与期間	投与量	結 果	文献
ラット	経口投与 (強制)	8 か月間	0、0.6、6 mg/kg/日	6 mg/kg/日:体重への影響(詳細不明)、血圧の低下、血清中SH <sup>1)</sup> 基量の減少、内臓器官の変化(詳細不明) NOAEL: 0.6 mg/kg/日	Veldre & Janes, 1979
ラット 雄 13 匹/群	経口投与 (強制)	8 か月間	0、0.06、6 mg/kg/日	6 mg/kg/日:血圧の低下、血清中SH基量の減少、肝細胞の脂肪変性、腎臓の硝子滴変性、脾臓の骨髓性細胞及び網内系細胞の増加、脾臓のリンパ濾胞の萎縮、心筋細胞の変性(いずれも詳細不明) NOAEL: 0.06 mg/kg/日	Maazik, 1968
ラット	吸入	4.5 か月間 4 時間/日 5 日/週	0、1.8、6.1、22 mg/m <sup>3</sup> (0、0.35、1.2、4.3 ppm)	6.1 mg/m <sup>3</sup> 以上:血清中SH基量の減少、尿中フェノール量の増加 22 mg/m <sup>3</sup> :血液中のコリンエステラーゼ活性の低下、肝臓の解毒及び排泄機能の障害 NOAEL: 1.8 mg/m <sup>3</sup>	Larionov, 1976



動物種等	投与方法	投与期間	投与量	結 果	文献
ラット F344 雌雄 10 匹/群	吸入 (蒸気、ミ ストの混 合物)	2 週間(10 回) 6 時間/日 5 日/週	0、67、200、670 mg/ m <sup>3</sup> (各暴露濃度のミスト 粒子の空気動力的 粒 径 (MMAD) は 0.64-0.90 μ m であり、 2,6-キシレノールの吸 入量は設定用量を反 映していたと考えら れ、各濃度群の 10 回 暴露の変動係数は 6% 以内で、実測濃度と設 定濃度の乖離は 5%以 内であり、いずれの用 量でも設定濃度に添 って吸入が行われた と判断した (著者))	670 mg/ m <sup>3</sup> 群: 体重増加の抑制 (対 照群の約 90%)、各回の暴露終了 直後の鼻からの赤色分泌物 (詳 細不明)、嗅上皮の壊死/変性、炎 症、扁平上皮化生、鼻中隔の癒着 (癒着状況不明) NOAEL: 200 mg/ m <sup>3</sup>	Battelle Memorial Institute, 1991

1) SH: スルフヒドリル

### 8.3.5 生殖・発生毒性

調査した範囲では、2,6-キシレノールの生殖・発生毒性試験に関する試験報告は得られていない。

### 8.3.6 遺伝毒性

2,6-キシレノールの遺伝毒性試験結果を表 8-3 に示す。

#### a. *in vitro* 試験結果

2,6-キシレノールはネズミチフス菌を用いた復帰突然変異試験で、S9 の添加の有無にかかわらず陰性であった (Epler, 1979; Florin et al., 1980; Microbiological Associates, 1980)。

ヒトリンパ球を用いた姉妹染色分体交換試験で、S9 の添加の有無にかかわらず陰性であった (Jansson et al., 1988)。

#### b. *in vivo* 試験結果

調査した範囲内では、2,6-キシレノールの *in vivo* 試験系での遺伝毒性に関する試験報告は得られていない。

以上、ネズミチフス菌を用いた復帰突然変異試験及びヒトリンパ球を用いた姉妹染色分体交換試験と少数の *in vitro* 試験では陰性であったが、*in vivo* での試験データがないため、遺伝毒性の有無は判断できない。

表 8-3 2,6-キシレノールの遺伝毒性試験結果

	試験系	試験材料	処理条件	用量	結果		文献
					-S9	+S9	
<i>in vitro</i>	復帰突然変異	ネズミチフス菌 TA 98、100	ND	ND	-	-	Epler, 1979

	試験系	試験材料	処理条件	用量	結果		文献
					-S9	+S9	
		ネズミチフス菌 TA 98、100、1535、 1537	スポット試験	367 $\mu$ g/plate (3 $\mu$ mol) 精製した被験 物質使用 (詳細 不明、NTP)	-	-	Florin et al., 1980
		ネズミチフス菌 TA 98、100、1535、 1537、1538、	プレート法	50、150、500、 1,500、5,000 $\mu$ g /plate (T1537は5,000 $\mu$ g/plateで生育 阻害を示した)	-	-	Microbiological Associates, 1980
	姉妹染色分体 交換	ヒトリンパ球	ND	0-0.25 mM (0-30.5 $\mu$ g/mL)	-	-	Jansson et al., 1988

+: 陽性、-: 陰性、ND: データなし

### 8.3.7 発がん性

調査した範囲内では、2,6-キシレノールの発がん性に関する試験報告は得られていない。

なお、雌Sutterマウス (2~3か月齢、30匹/群) に、ジメチルベンズアントラセン (DMBA、イニシエーター) の0.3%ベンゼン溶液75  $\mu$ g/匹を剪毛した背部皮膚に単回適用し、その1週間後、2,6-キシレノールの20%ベンゼン溶液の1滴 (約25  $\mu$ L、約10 mg/匹相当) を2回/週の割合で、14週間背部皮膚に適用したプロモーター試験で、乳頭腫の発生がみられたが、対照群 (DMBAのベンゼン溶液のみ投与) と比較して、1匹あたりの対照群と2,6-キシレノール投与群の生存動物に発生した乳頭腫の平均発生数はそれぞれ13%、30%であった。著者らは2,6-キシレノールのプロモーター活性に関しては疑問であるとしている (Boutwell and Bosch, 1959)。

国際機関等では2,6-キシレノールの発がん性を評価していない (ACGIH, 2006; IARC, 2006; U.S. EPA, 2006, U.S. NTP, 2005; 日本産業衛生学会, 2006)。

### 8.4 ヒト健康への影響 (まとめ)

2,6-キシレノールの生体内での吸収、分布に関する試験報告は得られていない。

ウサギに2,6-キシレノールを経口投与し、代謝物として尿中に、未変化体、2,6-キシレノールのグルクロン酸抱合体及び硫酸抱合体、2,5-ジヒドロキシ-1,3-ジメチルベンゼンが検出された。

2,6-キシレノールはヒトに対して、暴露部位の皮膚や粘膜に化学熱傷を起こし、腐食性を示し、フェノールに類似した毒性を示すと考えられる。毒性症状は、頭痛、めまい、吐き気、嘔吐、筋肉のれん縮、中枢神経抑制などを生じる。実験動物に対する2,6-キシレノールの急性毒性試験の経口投与LD<sub>50</sub>は、マウスで450~980 mg/kg、ラットで296~406 mg/kgの範囲、吸入暴露のLC<sub>50</sub>は、マウスでは2時間暴露で270 mg/m<sup>3</sup>超、ラットでは4時間暴露で270 mg/m<sup>3</sup>超である。マウス及びラットの急性症状として、経口投与で、チアノーゼ、胃の循環血液量の過多、肺の出血、吸入暴露で、呼吸の阻害、れん縮性振戦、興奮状態がみられている。2,6-キシレノールはラット、ウサギ、モルモットの皮膚適用で刺激性を示し、潰瘍を生じる。感作性に関する試験報告はない。

2,6-キシレノールの経口及び吸入反復投与毒性に関する試験報告は少なく、入手された試験報告も、記載が不十分であるまたは試験方法が不十分であると判断し、NOAEL 等を設定しない。また、2,6-キシレノールの経皮投与に関する報告は得られていない。

2,6-キシレノールによる実験動物を用いた生殖・発生毒性試験に関する試験報告は得られていない。

遺伝毒性の試験に関する報告の数は少なく、ネズミチフス菌を用いた復帰突然変異試験及びヒトリンパ球を用いた姉妹染色分体交換試験の *in vitro* 試験はいずれも陰性を示したが、*in vivo* での試験データがないため、遺伝毒性の有無に関しては判断できない。

2,6-キシレノールの発がん性試験に関する試験報告はなく、また、IARC は 2,6-キシレノールの発がん性を評価していない。

## 9. リスク評価

### 9.1 環境中の生物に対するリスク評価

環境中の生物に対するリスク評価は、水生生物を対象とし、その影響を 3 つの栄養段階（藻類、甲殻類、魚類）で評価する。リスク評価は、無影響濃度等（NOEC、LC、EC）を推定環境濃度（EEC）で除した値である暴露マージン（MOE）と、無影響濃度等として採用した試験データに関する不確実係数積を比較することにより行う。

#### 9.1.1 リスク評価に用いる推定環境濃度

本評価書では、2,6-キシレノールの EEC として、河川水中濃度の測定結果と推定結果を比較し、より大きい値である測定結果の  $0.0025 \mu\text{g/L}$  を採用した（6.2 参照）。

#### 9.1.2 リスク評価に用いる無影響濃度

リスク評価に用いる 2,6-キシレノールの水生生物に対する無影響濃度等を表 9-1 に示す。藻類、甲殻類及び魚類については、いずれも急性毒性試験結果（Huang and Gloyna, 1968; ; Barahona and Sanchez-Fortun, 1996; Phipps et al., 1981）のみ得られている（7.参照）。

これらの結果から、2,6-キシレノールの環境中の水生生物に対するリスク評価に用いる無影響濃度等として、最小値である甲殻類のブラインシュリンプに対する 7 日間LC<sub>50</sub> の 0.5 mg/Lを採用した（表 9-1 参照）。

表9-1 2,6-キシレノールの水生生物に対する無影響濃度等

生物レベル	生物種	エンドポイント	濃度 (mg/L)	文献
藻類	<i>Chlorella vulgaris</i> (クロレラ)	72 時間EC <sub>50</sub> 生長阻害 バイオマス	50	Huang & Gloyna, 1968
甲殻類	<i>Artemia salina</i> (ブラインシュリンプ)	7 日間LC <sub>50</sub>	0.5	Barahona & Sanchez-Fortun, 1996
魚類	<i>Pimephales promelas</i> (フットヘッドミノー)	8 日間LC <sub>50</sub>	21	Phipps et al., 1981

太字はリスク評価に用いたデータを示す

### 9.1.3 暴露マージンと不確実係数積の算出

2,6-キシレノールの環境中の水生生物に対するMOEを、甲殻類の7日間LC<sub>50</sub>の0.5 mg/LとEEC 0.0025 μg/Lを用いて、以下のように算出した。また、3つの栄養段階からそれぞれ採用した毒性試験データに関する不確実係数積を求めた。

$$\begin{aligned} \text{MOE} &= \text{LC}_{50} / \text{EEC} \\ &= 500 (\mu \text{g/L}) / 0.0025 (\mu \text{g/L}) \\ &= 200,000 \end{aligned}$$

不確実係数: 室内試験の結果から野外での影響を評価するための不確実係数 (10)

急性毒性試験結果から長期毒性試験結果を評価するための不確実係数  
(100)

不確実係数積: 1,000

### 9.1.4 環境中の生物に対するリスク評価結果

表 9-2 に示すように、MOE 200,000 は不確実係数積 1,000 より大きく、2,6-キシレノールは現時点では環境中の水生生物に悪影響を及ぼすことはないと判断する。

表9-2 2,6-キシレノールの環境中の生物に対するリスク評価結果

EEC (μg/L)		NOEC (mg/L)	MOE	不確実係数積
測定値	0.0025	0.5 <sup>1)</sup>	200,000	1,000 <sup>2)</sup>

1) LC<sub>50</sub>

2) 室内試験 (10) × 急性毒性試験 (100)

## 9.2 ヒト健康に対するリスク評価

2,6-キシレノールのヒトにおける定量的な健康影響データは得られていないため、ヒト健康に対するリスク評価には動物試験データを用いることとする (8.参照)。リスク評価は、実験動物に対する無毒性量等 (NOAEL、LOAEL) を推定摂取量で除した値である MOE と、評価に用いた毒性試験データに関する不確実係数積を比較することにより行う。

### 9.2.1 リスク評価に用いるヒトの推定摂取量

2,6-キシレノールは、主に大気、飲料水及び食物を通じてヒトに摂取されると推定され、それぞれの経路からの1日推定摂取量を表 9-3 に示す (6.4 参照)。

吸入経路、経口経路のヒトの体重 1 kgあたりの1日推定摂取量  $7.2 \times 10^{-3}$ 、 $0.020 \mu \text{g/kg/日}$  をヒト健康に対するリスク評価に用いる。

表9-3 2,6-キシレノールの1日推定摂取量

摂取経路		摂取量推定に用いた採用濃度の種類	1日推定摂取量 ( $\mu\text{g}/\text{人}/\text{日}$ )	体重1kgあたりの 1日推定摂取量 ( $\mu\text{g}/\text{kg}/\text{日}$ )
吸入	大気	モデル推定値 (AIST-ADMER)	0.36	$7.2 \times 10^{-3}$
経口	飲料水	河川水中濃度 (測定値)	0.0050	0.020
	食物	食物中濃度 (測定値)	1.0	

### 9.2.2 リスク評価に用いる無毒性量

2,6-キシレノールの反復投与毒性に関する試験報告はいくつか報告されているが、これらの試験報告は詳細が不明の個所が多く、吸入経路及び経口経路におけるリスク評価に必要な無毒性量 (NOAEL) 等は得られなかった。

2,6-キシレノールの生殖・発生毒性に関する試験報告は得られていない。

2,6-キシレノールの遺伝毒性については、*in vitro* では陰性であったが、*in vivo* でのデータがないため、遺伝毒性の有無は判断できない。また、発がん性に関する試験報告はなく、IARC等の国際機関は2,6-キシレノールの発がん性に関する評価を行っていない。

なお、米国 EPA では、ラットに強制経口投与した試験 (Veldre and Janes, 1979) から、体重の変化、肝臓、脾臓、腎臓の病理組織学的変化を指標とした NOEL 0.6 mg/kg/日を採用している (U.S.EPA, 2006)。また、我が国の環境省では、経口経路においてラットの8か月間強制経口投与した試験 (Veldre and Janes, 1979) から、体重、血圧、血清及び内臓のタンパク質性 SH 基量、肝臓、腎臓、脾臓の組織変性を指標とした NOAEL 0.6 mg/kg/日を採用している (環境省, 2006)

### 9.2.3 暴露マージンと不確実係数積の算出

2,6-キシレノールは、ヒトに対して主に吸入と経口の暴露経路からの摂取が推定されるが、吸入暴露、経口暴露ともに評価に採用できる試験データが無く、MOE を算出できない。

### 9.2.4 ヒト健康に対するリスク評価結果

2,6-キシレノールは、リスク評価に用いるのに適した毒性試験報告が得られていないため、現時点でヒト健康に対する影響について MOE は算出できない。

表9-4 2,6-キシレノールのヒト健康に対するリスク評価結果

摂取経路	体重1kgあたりの 1日推定摂取量 ( $\mu\text{g}/\text{kg}/\text{日}$ )	NOAEL (mg/kg/日)	MOE	不確実係数積
吸入	$7.2 \times 10^{-3}$	— <sup>1)</sup>	— <sup>2)</sup>	— <sup>2)</sup>
経口	0.020	— <sup>1)</sup>	— <sup>2)</sup>	— <sup>2)</sup>

- 1) 調査した範囲では影響を適切に評価できる試験は得られていない
- 2) 算出せず

### 9.3 まとめ

2,6-キシレノールは現時点では環境中の水生生物に対し悪影響を及ぼすことはないと判断する。

なお、2,6-キシレノールはヒト健康に対するリスク評価を行うのに適切な毒性試験報告が得られなかったため、リスク評価を行うことができなかった。今後、毒性試験報告が得られた時点で、再度リスク評価を行うことが望ましい。

文 献 (文献検索時期 : 2006 年 4 月<sup>1)</sup>)

- ACGIH, American Conference of Governmental Industrial Hygienists (2006) TLVs and BEIs.
- Barahona, M.V. and Sanchez-Fortun, S. (1996) Comparative sensitivity of three age classes of *artemia salina* larvae to several phenolic compounds. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.*, **56**, 271-278.
- Battelle Memorial Institute (1991) 10-Day repeated-exposure inhalation toxicity study of 2,6-xylenol in rats. U.S. EPA/OPTS Public files with cover letter, Fiche #:OTS0527745, Doc#: 88-900000197.
- Blackman, G.E., Parke, M.H. and Garton, G. (1955) The physiological activity of substituted phenols. I. Relationships between chemical structure and physiological activity. *Arch. Biochem. Biophys.*, **54**, 45-54.
- Boutwell, R. K. and Bosch, D.K.(1959) The tumor-promoting action of phenol and related compounds for mouse skin. *Cancer Res.*, **19**, 413-427.
- Bray, H.G., Thorpe, W.V. and White, K. (1950a) Metabolism of derivatives of toluene. 4. Cresols. *Biochem. J.*, **46**, 275-278.
- Bray, H.G., Thorpe, W.V. and White, K. (1950b) Metabolism of derivatives of toluene. 5. The fate of xylenols in the rabbit with further observations on the metabolism of the xylenes. *Biochem. J.*, **47**, 395-399.
- Bray, H.G., Thorpe, W.V. and White, K. (1952) Kinetic studies of the metabolism of foreign organic compounds. 4. The conjugation of phenols with sulfuric acid. *Biochem. J.*, **52**, 419-423.
- Carter, W.P.L., Winer, A.M. and Pitts, J.N., Jr. (1981) Major atmospheric sink for phenol and the cresols. Reaction with the nitrate radical. *Environ. Sci. Tech.*, **15**, 829-831.
- Devillers, J. (1988) Acute toxicity of cresols, xylenols, and trimethylphenols to *Daphnia magna* Straus 1820. *Sci. Total Environ.*, **76**, 79-83.
- EC, European Commission (2000) IUCLID Dataset, Substance ID: 576-26-1: 2,6-Xylenol, European Chemicals Bureau.
- Epler, J. L. (1979) Evaluation of feasibility of mutagenic testing of shale oil products and effluents. *Environ. Health Perspect.*, **30**, 179-184.
- Falk-Petersen, I.B., Kjorsvik, E., Lonning, S., Naley, A.M. and Sydnes, L.K. (1985) Toxic effects of hydroxylated aromatic hydrocarbons on marine embryos. *Sarsia*, **70**, 11-16.
- Florin, I. Rutberg, L. Curvall, M. and Enzell, C. R. (1980) Screening of tobacco smoke constituents for mutagenicity using the Ames' test. *Toxicology*, **18**, 219-232.
- Godsy, E.M., Goerlitz, D.F. and Ehrlich, G.G. (1983) Methanogenesis of phenolic compounds by a bacterial consortium from a contaminated aquifer in St. Louis Park, Minnesota. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.*, **30**, 261-268.
- Hazardous Substances Data Bank (HSDB), U.S. National Library of Medicine (2005)

<sup>1)</sup> データベースの検索を 2006 年 4 月に実施し、発生源情報等で新たなデータを入手した際には文献を更新した。

- Howard, P.H. and Meylan, W.M. (1991) Handbook of physical properties of organic chemicals, Lewis Publishers, Inc., Chelsea, MI.
- Huang, J.C. and Gloyna, E.F. (1968) Effect of organic compounds on photosynthetic oxygenation-I. Chlorophyll destruction and suppression of photosynthetic oxygen production. *Water Res.*, 2, 347-366.
- IARC, International Agency for Research on Cancer (2006) IARC Monograph on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans. (<http://www.iarc.fr> から引用)
- Jansson, T, Curvall, M., Hedin, H. and Enzell, C.R. (1988) In vitro studies of the biological effects of cigarette smoke condensate III. Induction of SCE by some phenolic and related constituents derived from cigarette smoke: A study of structure-activity relationships. *Mutat. Res.*, 206, 17-24.
- Kopperman, H.L., Carlson, R.M. and Caple, R. (1974) Aqueous chlorination and ozonation studies. I. Structure-toxicity correlations of phenolic compounds to *Daphnia magna*. *Chem. Biol. Interact.*, 9, 245-251.
- Larionov, A.G. (1976) Experimental data on evaluating the toxicity of 2,6-dimethylphenol. *Gig. Tr. Prof. Zabol.*, Apr (4), 43-46.
- Lyman, W.J. et al. (1990) Handbook of chemical property estimation methods. Amer. Chem. Soc., Washington, DC. (U.S. NLM: HSDB, 2006 から引用).
- Maazik, I.K. (1968) Standards for dimethylphenol isomers in water bodies (English translation of the Russian) *Gig. Sanit.*, 33, 329.
- Mackay, D., Paterson, S. and Shiu, W.Y. (1992) Generic models for evaluating the regional fate of chemicals. *Chemosphere*, 24, 695-717.
- McLeese, D.W., Zitko, V. and Peterson, M.R. (1979) Structure-lethality relationships for phenols, anilines and other aromatic compounds in shrimp and clams. *Chemosphere*, 8, 53-57.
- Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.
- Microbiological Associates (1980) Activity of T 1570 in the Salmonella/microsomal assay for bacterial mutagenicity. Report, USA NTIS/OTS 0534388.
- Mill, T. (1982) Hydrolysis and oxidation processes in the environment. *Environ. Toxicol. Chem.*, 1, 135-141.
- NIST, National Institute of Standards and Technology (1998) NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library, Gaithersburg, MD.
- Phipps, G.L., Holcombe, G.W. and Fiandt, J.T. (1981) Acute toxicity of phenol and substituted phenols to the fathead minnow. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.*, 26, 585-593.
- Pitter, P. (1976) Determination of biological degradability of organic substances. *Water Res.*, 10, 231-235.
- Reinhart, W.E., Kaschak, M. and Pfitzer, E.A. (1967) Range finding toxicity data for 43 compounds. *Am. Chem. Tox. Ser. Bull.*, 6, 1
- SRC, Syracuse Research Corporation (2006) AopWin Estimation Software, ver. 1.90, North Syracuse, NY.



- SRC, Syracuse Research Corporation (2006) BcfWin Estimation Software, ver. 2.14, North Syracuse, NY.
- SRC, Syracuse Research Corporation (2006) HenryWin Estimation Software, ver. 3.10, North Syracuse, NY.
- SRC, Syracuse Research Corporation (2006) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.
- SRC, Syracuse Research Corporation (2006) PcKocWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.
- SRI international (2001) SRI International chemical economics handbook, Chemical Product Groups, Plastics, 580.1421B-C
- Schultz, T.M., Kyte, M.K. and Dumont, J.N. (1978) Structure-toxicity correlations of organic contaminants in aqueous coal conversion effluents. Arch. Environ. Contam. Toxicol., 457-463.
- U.S. EPA, Environmental Protection Agency (2006) Integrated Risk Information System, National Library of Medicine. (<http://www.epa.gov/ncea/iris/subst/0230.htm> から引用)
- U.S. NLM, U.S. National Library of Medicine (2005) HSDB, Hazardous Substances Data Bank, Bethesda, MD. (<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB> から引用)
- U.S. NLM, U.S. National Library of Medicine (2006) HSDB, Hazardous Substances Data Bank, Bethesda, MD. (<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB> から引用)
- U.S. NTP (1986) Health and environmental effects profile for dimethylphenols. EPA/600/X-86/256, PB88-220744
- U.S. NTP, National Toxicology Program (2005) U.S. Department of Health and Human Services Public Health Service, National Toxicology Program, 11th Report on Carcinogens.
- Veldre, I.A. and Janes, H.J. (1979) Toxicological studies of shale oils, some of their components and commercial products. Environ. Health Perspect., 30, 141-146.
- Watson, I.D., McBride, D. and Paterson, K.R. (1986) Fatal xylenol self-poisoning. Postgrad. Med. J., 62, 411-412.
- 浅原照三, 戸倉仁一郎, 大河原信, 熊野谿従, 妹尾学 編 (2004) 溶剤ハンドブック, 講談社サイエンティフィック, 東京.
- 化学物質評価研究機構 (2001) 化学物質有害性・リスク調査等報告書—PRTR 法指定化学物質の環境挙動・生態影響・健康影響—, 平成 12 年度通商産業省委託研究.
- 化学物質評価研究機構 (2002) 化学物質ハザード・データ集, 経済産業省化学物質管理課. 監修, 第一法規出版, 東京. ([http://www.cerij.or.jp/cerij\\_jp/koukai/sheet/sheet\\_idx4.htm](http://www.cerij.or.jp/cerij_jp/koukai/sheet/sheet_idx4.htm); <http://www.safe.nite.go.jp/pdf/2001-48.pdf> に記載あり).
- 化学物質評価研究機構 (2006) 調査資料 (未公表).
- 環境省 (2002) 水環境中の要調査項目存在状況調査結果 (平成 13 年度調査)
- 環境省, (2006) 化学物質の健康影響に関する暫定的有害性評価書 [http://www.env.go.jp/chemi/report/h16-01/pdf/chap02/02\\_2\\_11.pdf](http://www.env.go.jp/chemi/report/h16-01/pdf/chap02/02_2_11.pdf) から引用
- 気象業務支援センター (2005) アメダス年報 (平成 15 年)

気象業務支援センター (2006) アメダス年報 (平成 16 年)

経済産業省 (2002) 経済商産業公報 (2002 年 3 月 26 日), 3 省共同化学物質データベース.  
(<http://www.safe.nite.go.jp/tmdb/Init.do> から引用).

経済産業省 (2006) 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第 11 条に基づく開示 (排出年度 : 平成 16 年度、平成 15 年度(修正版)).

産業技術総合研究所 (2006) 産総研-曝露・リスク評価大気拡散モデル (AIST-ADMER)  
(<http://unit.aist.go.jp/crm/admer/>).

製品評価技術基盤機構 (2004) 化学物質のリスク評価及びリスク評価手法の開発プロジェクト/平成 15 年度研究報告書 (新エネルギー・産業技術総合開発機構 委託事業).

製品評価技術基盤機構 (2007) 化学物質のリスク評価及びリスク評価手法の開発プロジェクト/平成 18 年度研究報告書 (新エネルギー・産業技術総合開発機構 委託事業).

東京都下水道局 (2006) 数字で見る東京の下水道 平成 14 年度、平成 15 年度、平成 16 年度  
の下水処理状況. (<http://www.gesui.metro.tokyo.jp> から引用).

統計情報研究開発センター (2004a) 平成 13 年事業所・企業統計調査地域メッシュ統計

統計情報研究開発センター (2004b) 平成 12 年国勢調査に関する地域メッシュ統計

経済産業調査会 (2004) 工業統計メッシュデータ (平成 12 年)

日本化学工業協会 (2005) (社) 日本化学工業協会のレスポンシブル・ケアによる PRTR の実施  
について-2004 年度化学物質排出量調査結果- (2003 年度実績).

日本産業衛生学会 (2006) 許容濃度等の勧告 (2006 年度), 産衛誌, 48, 98-123.

日本食品分析センター (2006) 平成 17 年度食事からの化学物質暴露量に関する調査報告書  
(環境省委託報告書)

日本地図センター (2004) 国土数値情報土地利用面積 (平成 1 年)

日本芳香族工業会 (2006) (社) 日本芳香族工業会データ集 (<http://www.jaia-aroma.com/>から引用)

東野晴行, 北林興二, 井上和也, 三田和哲, 米澤義堯 (2003) 曝露・リスク評価大気拡散モデル(ADMER) の開発- 大気環境学会誌, **38** (2), 100~115.

## 化学物質の初期リスク評価書

No.142 2,6-キシレノール

---

### 作成経緯

2007年3月 初期リスク評価指針 ver.2.0 に基づき原案作成  
2007年12月 経済産業省 化学物質審議会管理部会・審査部会  
第32回安全評価管理小委員会審議了承  
2008年10月 Ver.1.0 公表

---

### 初期リスク評価責任者

プロジェクトリーダー

中西準子

---

### 有害性評価外部レビュー

環境中の生物への影響 (7章)

九州大学 農学研究院生物機能科学部門

大嶋雄治

ヒト健康への影響 (8章)

東京都健康安全研究センター

中江大

---

### 初期リスク評価実施機関, リスク評価担当者

財団法人 化学物質評価研究機構

林浩次

野坂俊樹

清水康資

独立行政法人 製品評価技術基盤機構

常見知広

---

### 連絡先

財団法人 化学物質評価研究機構 安全性評価技術研究所

〒112-0004 東京都文京区後楽 1-4-25 日教販ビル 7F

tel. 03-5804-6136 fax. 03-5804-6149

独立行政法人 製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター リスク評価課

〒151-0066 東京都渋谷区西原 2-49-10

tel. 03-3468-4096 fax. 03-3481-1959

---