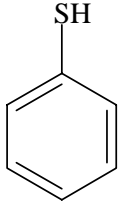


既存化学物質安全性(ハザード)評価シート

整理番号	99 - 2	官報公示 整理番号	3 - 1092	CAS 番号	108 - 98 - 5
名 称	チオフェノール 別名：ベンゼンチオール フェニルメルカプタ ン メルカプトベンゼン		構 造 式		
分 子 式	C ₆ H ₆ S		分 子 量	110.18	
市場で流通している商品(代表例) ¹⁾ 純 度 : 98%以上 不純物 : モノクロロベンゼン(1%以下)、ジフェニルジスルフィド 添加剤又は安定剤：無添加					
1. 物理・化学的性状データ 外 観：無色液体 融 点：-15 ²⁾ 沸 点：168.3 ³⁾ 引 火 点：56.1 ⁴⁾ 発 火 点：文献なし 爆発限界：文献なし 比 重：d ₄ ²⁰ 1.0766 ⁵⁾ 蒸気密度：3.80(空気 = 1) 蒸 気 圧：133 Pa(1 mmHg)(18.6 ²⁾ 分配係数：log Pow；2.52(実測値) ⁶⁾ 、2.53(計算値) ⁶⁾ 加水分解性：加水分解を受けやすい化学結合なし 解離定数：pKa = 6.43(25 ⁵⁾ スペクトル：主要マススペクトルフラグメント m/z 110(基準ピーク, 1.0)、66(0.28)、77(0.14) ⁷⁾ 吸脱着性：土壌吸着係数 Koc = 108-560 ⁸⁾ 粒度分布：該当せず 溶解性：チオフェノール/水；470 mg/ℓ (15 ²⁾ アルコール、エーテル、ベンゼンなどの有機溶媒に混和。 換算係数：1 ppm = 4.58 mg/m ³ (気体, 20 ²⁾) 1 mg/m ³ = 0.218 ppm そ の 他：水中では重合し、ジフェニルジスルフィドを形成する。 加熱又は酸との接触により分解し、硫黄酸化物を生じる ⁴⁾ 。					

2. 発生源・暴露レベル

製造量等：平成 8 年度 1,616 t (製造 1,616 t 輸入 0 t)⁹⁾

放出・暴露量：文献なし

用途：農薬原料(約 55%)、医薬原料(約 25%)、染料その他原料(約 20%)¹⁾

3. 環境運命

1) 分解性

好氣的

難分解¹⁰⁾(化審法)

試験期間	被験物質	活性汚泥
4 週間	100 mg/ℓ	30 mg/ℓ
BOD から算出した分解度		
0%		

嫌氣的

報告なし。

非生物的

OH ラジカルとの反応性

対流圏大気中では、速度定数 = 4.4×10^{-11} cm³/分子・sec(25)で⁸⁾、OH ラジカル濃度を $5 \times 10^5 \sim 1 \times 10^6$ 分子/cm³ とした時の半減期は 4~9 日と計算される。

2) 濃縮性

水中で重合するため、データなし。

3) 環境分布・モニタリングデータ

報告なし。

4. 生態毒性データ

報告なし。

5. ほ乳動物毒性データ

1) 急性毒性^{4, 8, 11, 12, 13, 14)}

	マウス	ラット	ウサギ
経口 LD ₅₀		46 mg/kg	
吸入 LC ₅₀	28 ppm(4h)	33 ppm(4h)	
経皮 LD ₅₀		300 mg/kg	134 mg/kg
腹腔内 LD ₅₀	25 mg/kg	9.8-25.2 mg/kg	

マウス又はラットに致死量及び致死量に近い用量を吸入暴露又は経口投与した実験で、粘膜及び呼吸器の刺激、呼吸数増加、努力呼吸、不穏、協調運動失調、よろめき歩行、筋力低下、麻痺、軽度から強度のチアノーゼ、さらには嗜眠、軽度の鎮静、呼吸数減少、昏睡がみられている^{13, 14)}。剖検では、肝臓と腎臓への影響がみられ、吸入暴露ではさらに肺の重度の障害がみられている¹³⁾。

2) 刺激性・腐食性

ウサギ⁴⁾及びモルモット¹³⁾の皮膚に重度の刺激性を示す。

ウサギの眼に 0.1 ml を適用した実験で重度の刺激性を示す^{11, 13)}。

3) 感作性

報告なし。

4) 反復投与毒性

(1) 経口投与

ラットに 9、18、35 mg/kg/day を強制経口投与した実験で(投与期間不明)、9 mg/kg/day 以上で肝臓、腎臓の相対重量の増加、腎臓の尿細管の変性、小葉中心性肝細胞肥大、18 mg/kg/day 以上で精子の運動性の低下、35 mg/kg/day で体重増加抑制がみられている¹⁵⁾。

(2) 吸入暴露

マウスを反復吸入暴露した実験(試験条件不明)で、腎障害、肝細胞の脂肪変性及び壊死、肺の水腫、毛細血管の拡張、出血がみられている⁸⁾。

(3) 腹腔内投与

実験動物(動物種不明)に 3.5 mg/kg を 3 週間に 9 回投与した実験で、脾臓の被膜の線維性肥厚を伴う腹膜炎、腎症、副腎髄質の充血がみられている¹⁴⁾。

5) 変異原性・遺伝毒性

試験方法		試験条件	結果*
in vitro	復帰突然変異試験	ネズミチフス菌 TA100、TA98 S9(+/-) ⁸⁾	+
		ネズミチフス菌 ¹³⁾	-

* - : 陰性 + : 陽性

6) 発がん性

報告なし。

7) 生殖・発生毒性

(1) 経口投与

ラットに 9、18、35 mg/kg/day を強制経口投与した 2 世代繁殖試験で、18 mg/kg/day 以上で F₀ での精子の運動性の低下、雄の体重増加抑制、F₀、F₁ での肝臓、腎臓重量増加及び肝細胞腫大、尿細管変性、F₁、F₂ での新生児体重の低下がみられている^{15, 16)}。

ラットに 20、35、50 mg/kg/day を妊娠 6 日目から 15 日目までの 10 日間投与した実験で、母動物において全用量で体重の増加抑制と摂餌量の減少がみられ、50 mg/kg/day で着床後吸収胚と奇形(内容記載なし)の増加がみられている¹⁷⁾。

6. ヒトへの影響

1) 急性影響

本物質により皮膚炎、頭痛及びめまいを生じる¹⁴⁾。In vitro の実験では、成人の血液に本物質 0.25、0.50 mM(27.5、55 mg/ℓ) を添加した実験で、メトヘモグロビンの形成が認められている¹⁸⁾。

2) 慢性影響

報告なし。

3) 発がん性^{19, 20, 21)}

機 関	分 類	基 準
EPA(1996 年)		1997 年現在発がん性について評価されていない。
EU(1996 年)		1997 年現在発がん性について評価されていない。
NTP(1994 年)		1997 年現在発がん性について評価されていない。
IARC(1996 年)		1997 年現在発がん性について評価されていない。
ACGIH(1997 年)		1997 年現在発がん性について評価されていない。
日本産業衛生学会(1998 年)		1998 年現在発がん性について評価されていない。

ヒトでのがんの発生についての報告はない。

4) 許容濃度

機関名	許容濃度	経皮吸収性
ACGIH(1997 年)	0.5 ppm(2.3 mg/m ³)	
日本産業衛生学会(1998 年)	記載なし	

7. 生体内運命

チオフェノールは、経口、経皮、吸入経路から吸収される⁴⁾。ウサギの経口投与実験では、尿中にチオフェニルグルクロン酸及びチオフェニル硫酸として排泄される⁴⁾。ラットに³⁵Sで標識した本物質 6 mg/kg を経口投与した実験では尿中にメチルフェニルスルホンと少量のメチルフェニルスルホキシドが排泄される。このことは、本物質が容易にS-メチル化を受けてメチルフェニルスルフィドが形成され、さらに酸化をへてメチルフェニルスルホキシドになることを示す^{4, 14)}。

8. 分類(OECD 分類基準・案)

- 1) ほ乳動物に対する急性毒性は、経口投与ではラットでクラス 2、吸入暴露ではマウス及びラットでクラス 1、経皮投与ではラットでクラス 3、ウサギでクラス 2 に分類される。
- 2) 水圏環境生物に対する急性毒性については、分類基準を適用できるデータがない。

9. 総合評価

1) 危険有害性の要約

本物質は経口、経皮及び吸入経路から吸収される。急性影響としては皮膚炎、頭痛やめまいを生じ、実験動物では致死量に近い量に暴露されると中枢神経系への影響もみられる。慢性影響についてヒトでの報告はないが、実験動物では腎臓、肝臓の他、精子への影響がみられている。変異原性・遺伝毒性については、*in vitro* で陰性と陽性の報告があり、発がん性についてはヒト、実験動物とも報告はない。生殖・発生毒性については、ラットで母動物や親動物に毒性が惹起される量において、次世代に奇形や腎臓、肝臓への障害等がみられている。

本物質は環境中に放出された場合、大気中では OH ラジカルとの分解反応が関与しており、半減期は 1 週間前後と計算される。水圏では生分解されにくい。

生態毒性データ及びモニタリングデータはいずれも報告されていない。

2) 指摘事項

- (1) ヒトで皮膚炎、頭痛、めまいを生じる。
- (2) 実験動物では致死量に近い量の急性暴露により中枢神経系への影響がみられ、反復投与では肝臓、腎臓への影響がみられる。
- (3) ラットにおいて奇形がみられている。

参考資料

- 1) (社)日本化学工業協会調査資料(1999).
- 2) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd. Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(1996).
- 3) The Merck Index, 12th. Ed., Merck & Co., Inc.(1996).
- 4) 後藤稔, 池田正之, 原一郎編, 産業中毒便覧・増補版, 医歯薬出版(1991).
- 5) 有機合成化学協会編, 有機化学物辞典, 講談社(1985).
- 6) 分配係数計算用プログラム“C Log P”, アダムネット(株).
- 7) NIST Library of 54K Compounds.
- 8) Hazardous Substances Data Bank(HSDS), U.S.National Library Medicine(1997).
- 9) 平成8年度 既存化学物質の製造・輸入量に関する実態調査, 通商産業省.
- 10) 化学品検査協会編, 既存化学物質点検データ(1979).
- 11) Registry of Toxic Effects of Chemical Substances(RTECS), US NIOSH(1996).
- 12) 12394 の化学商品, 化学工業日報社(1994).
- 13) The Canadian Center for Occupational Health and Safety CCOHS CHEMINFO(1996).
- 14) ACGIH, Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices(1991).
- 15) National Toxicology Program(NTP) Technical Report Series, Summary(1996).
- 16) G. W. Wolfe, Toxicologist, **30**(1), 119(1996).
- 17) J. D. George, Toxicologist **15**(1), 160(1995).
- 18) Persis Amrolia, Journal of Applied toxicology, **9**(2), 113-118(1989).
- 19) JETOC, 発がん性物質の分類とその基準, 発がん性評価物質一覧表, 第3版(1997).
- 20) ACGIH, ACGIH Booklet of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices(1996).
- 21) 許容濃度等の勧告, 産業衛生学雑誌, **40**, 129-153(1998).

別添資料

ほ乳動物毒性図

ほ乳動物毒性図（経口投与）

