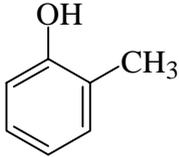


既存化学物質安全性(ハザード)評価シート(要約版)

整理番号	97 - 9	官報公示 整理番号	3 - 499	CAS 番号	95 - 48 - 7
名 称	o-クレゾール 別名：2-メチルフェノール 2-ヒドロキシトルエン o-クレゾール酸		構 造 式		
分子式	C ₇ H ₈ O		分子 量	108.14	
市場で流通している商品(代表例) ¹⁾			o-, m-, p-体の混合物		
純 度	: 99.9 % 以上		80 % 以上		
不純物	: キシレノール、フェノール		キシレノール、エチルフェノール、 フェノール		
添加剤又は安定剤	: 不明		しゅう酸、クエン酸		
特に断りがない限り、o-クレゾール単体を指す。					
物理・化学的性状データ					
外 観	: 白色固体 ²⁾				
融 点	: 30 ³⁾ 、30.94 ²⁾				
沸 点	: 191 ~ 192 ³⁾				
引 火 点	: 81-83 ^{3, 4)}				
発 火 点	: 560 ~ 600 ⁵⁾				
爆発限界	: 1.4 % (149 ⁵⁾)				
比 重	: d ₄ ²⁰ 1.047 ³⁾				
蒸気密度	: 3.72(空気 = 1) ⁵⁾ 、3.78(空気 = 1) ⁶⁾				
蒸気圧	: 24 Pa(0.2 mmHg)(20 ⁷⁾)、55 Pa(0.4 mmHg)(30 ⁷⁾)、250 Pa(1.9 mmHg)(50 ⁷⁾)				
分配係数	: log Pow ; 1.95(実測値) ⁸⁾ 、1.97(計算値) ⁸⁾				
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 = 10.26(25 ⁹⁾)				
スペクトル	: 主要マススペクトルフラグメント m/z 108(基準ピーク, 1.0)、90(0.25)、77(0.34)、51(0.21) ¹⁰⁾				
吸脱着性	: 土壌吸着係数 K _{oc} = 22 ¹¹⁾				
粒度分布	: 文献なし				
溶解性	: o-クレゾール/水 ; 26 g/l(25 ⁷⁾)、31 g/l(40 ⁷⁾)、56 g/l(100 ⁷⁾) アルコール、エーテル、ベンゼンなどの有機溶媒と自由に混和。				
換算係数	: 1 ppm = 4.50 mg/m ³ (気体, 20 ⁷⁾) 1 mg/m ³ = 0.222 ppm				

総合評価

1) 危険有害性の要約

クレゾールの毒性は *o*-、*m*-、*p*-異性体でほぼ同様の影響がみられるが、その強さは *p*- > *o*- > *m*-の順とされている。

クレゾールはヒト及び実験動物において眼や皮膚に対する刺激性を有し、呼吸器、消化器及び皮膚から吸収されて毒性影響を示す。クレゾールの毒性は主としてその刺激性・腐食性に起因するものであり、ヒトでも経口摂取や吸入、経皮吸収により呼吸障害、心及び循環障害、腎機能障害を呈して死に至る場合がある。事故例では血液や肝臓、腎臓への影響がみられ、経口暴露による死亡が報告されている。実験動物における *o*-クレゾールの影響として痙攣や昏睡がみられた他、前胃粘膜上皮の過形成、肝臓及び腎臓の重量増加に加えて子宮と卵巣の萎縮、性周期の延長や骨髄の低形成が報告されている。変異原性・遺伝毒性試験では多くの報告で陰性であるが、一部に陽性例もみられる。ヒトでの発がん性については報告がなく、実験動物についてはマウスの皮膚でプロモーション作用を示唆する報告以外に発がん性についての報告はない。生殖・発生毒性については性周期の延長や側脳室拡張、骨化遅延がみられている。

本物質は環境中に放出された場合、物理化学的性状から考えて大気圏、水圏及び底質中に分布するものと予想される。水中では主として生分解により分解される。嫌気的な底質中では分解を受けにくい。対流圏大気中での半減期は 9.6 時間と計算され、主な分解機構は OH ラジカルとの反応である。また、夜間においては、NO₃ ラジカルとの反応によりニトロクレゾールが生成されるとの報告がある。環境庁のモニタリングでは、データが少なく環境中からは検出されていない。水圏環境生物に対する急性毒性は、OECD 分類基準(案)では藻類に対しては harmful に該当し、甲殻類に対しては toxic、魚類に対しては harmful ~ toxic にそれぞれ分類される。

2) 指摘事項

- (1) 眼や皮膚に対して強い刺激性を有する。
- (2) 経口摂取のほか、吸入や経皮吸収による中毒症状が速やかに現れる。
- (3) 刺激性・腐食性に起因した毒性を示し、重篤な場合には呼吸障害、心及び循環障害、腎機能障害を呈して死に至る場合がある。
- (4) 実験動物において子宮と卵巣の萎縮と性周期の延長がみられ、胎児では側脳室拡張、骨化遅延がみられている。
- (5) 変異原性試験の一部に陽性の報告があるが、発がん性についてはマウスの皮膚でプロモーション作用が示唆されている他はヒト、実験動物ともに報告例がない。
- (6) 水圏環境生物に対する急性毒性が強いので、十分な処理をして排出する必要がある。

参考資料

- 1) (社)日本化学工業協会調査資料(1997).
- 2) 有機合成化学協会編, 有機化学物辞典, 講談社(1985).
- 3) The Merck Index, 12th. Ed., Merck & Co., Inc.(1996).
- 4) Richardson, M.L. et.al., The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Hemistry(1992-1995).
- 5) IPCS, International Chemical Safety Cards(1989).
- 6) 日本化学会編, 化学防災指針集成, 丸善(1996).
- 7) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd. Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(1983).
- 8) 分配係数計算用プログラム“C Log P”, アダムネット(株).
- 9) John A. Dean, Lange's Handbook of Chemistry, 13th., MacGraw-Hill Book Company (1985).
- 10) NIST Library of 54K Compounds.
- 11) Hazardous Substances Data Bank(HSDS), U.S.National Library Medicine(1996).