

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	106 - 44 - 5
名 称	<p><i>p</i>-クレゾール</p> <p>別名：4-メチルフェノール 4-ヒドロキシトルエン <i>p</i>-クレゾール酸</p>		構造式		
分子式	C ₇ H ₈ O		分子量	108.14	
<p>市場で流通している商品(代表例)¹⁾ <i>o</i>-、<i>m</i>-、<i>p</i>-体の混合物</p> <p>純 度 : 不明 80 %以上</p> <p>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</p> <p>添加剤又は安定剤：不明 しゅう酸、クエン酸</p>					
特に断りがない限り、 <i>p</i> -クレゾール単体を指す。					
<p>物理・化学的性状データ</p> <p>外 観：白色固体²⁾</p> <p>融 点：35.5 ³⁾、34.78 ²⁾</p> <p>沸 点：201.8 ³⁾</p> <p>引 火 点：86 ³⁾、94 ⁴⁾</p> <p>発 火 点：560 ⁵⁾</p> <p>爆発限界：1.1 % (150 ⁵⁾)</p> <p>比 重：d₄²⁰ 1.034²⁾</p> <p>蒸気密度：3.72(空気 = 1)⁵⁾、3.78(空気 = 1)⁶⁾</p> <p>蒸 気 圧：5 Pa(0.04 mmHg)(20 ⁷⁾)、15 Pa(0.11 mmHg)(25 ⁷⁾)、133 Pa(1 mmHg)(53 ⁷⁾)</p> <p>分配係数：log Pow ; 1.94(実測値)⁸⁾、1.97(計算値)⁸⁾</p> <p>加水分解性：加水分解を受けやすい化学結合なし</p> <p>解離定数：pKa = 10.26(25 ⁹⁾)</p> <p>スペクトル：主要マススペクトルフラグメント m/z 107(基準ピーク, 1.0)、90(0.09)、77(0.28)、51(0.19)¹⁰⁾</p> <p>吸脱着性：土壌吸着係数 K_{oc} = 49、650¹¹⁾</p> <p>粒度分布：文献なし</p> <p>溶解性：<i>p</i>-クレゾール/水；24 g/l(40 ⁷⁾)、53 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。</p> <p>換算係数：1 ppm = 4.50 mg/m³ (気体, 20 ⁷⁾) 1 mg/m³ = 0.222 ppm</p>					

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 *p*-クレゾールの影響として痙攣や昏睡がみられた他、嗅上皮の萎縮や呼吸上皮の過形成及び扁平上皮化生、気管上皮化生、肝臓及び腎臓の重量増加に加えて子宮の萎縮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と骨の小奇形がみられている。

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。対流圏大気中の半減期は10～20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報告がある。河川水、富栄養湖水あるいは池水、貧栄養湖水での夏場の太陽光による光分解の半減期はそれぞれ400、830、200日と報告されている。環境庁のモニタリングデータでは底質中から検出されている。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、甲殻類に対しては分類基準なし、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の萎縮と性周期の延長がみられ、胎児では骨の小奇形がみられている。
- (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。

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).