

## [ 4 1 ] テレフタル酸

### 1 . 物質に関する基本的事項

#### (1) 分子式・分子量・構造式

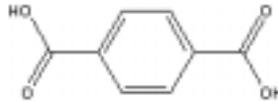
物質名：テレフタル酸  
(別の呼称：p-フタル酸、p-ベンゼンジカルボン酸、p-カルボキシ安息香酸、p-カルボキシベンゼン、TPA、PTA)

CAS 番号：100-21-0

分子式：C<sub>8</sub>H<sub>6</sub>O<sub>4</sub>

分子量：166.1

構造式：



#### (2) 物理化学的性状

本物質は白色固体である<sup>1)</sup>。

融点	402 (昇華) <sup>2)</sup>
比重	1.51 <sup>3)</sup>
蒸気圧	$9.20 \times 10^{-6}$ mmHg(25 ) <sup>4)</sup>
換算係数	1ppm=6.91mg/m <sup>3</sup> (気体、20 ) <sup>5)</sup>
n-オクタノール/水分配係数 (log Pow)	2.00 <sup>6)</sup>
加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合なし <sup>5)</sup>
解離定数	pK1=3.54(25 )、pK2=4.46(25 ) <sup>7)</sup>
水溶性	15mg/L(20 ) <sup>8)</sup>

#### (3) 環境運命に関する基礎的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

分解性 好氣的：良分解 <sup>9)</sup> 。土壌懸濁液に添加したテレフタル酸(濃度：20mg/L)は、2日間で完全に分解されたとの報告がある <sup>10)</sup> 。 嫌氣的：報告なし <sup>5)</sup> 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 $2.75 \times 10^{-13}$ cm <sup>3</sup> /分子・sec <sup>10)</sup> 、OHラジカル濃度を $5.0 \times 10^5 \sim 1 \times 10^6$ 分子/cm <sup>3</sup> とした時の半減期は29~58日と計算される <sup>5)</sup> 。 BODから算出した分解度： 75%(試験期間：2週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L) <sup>9)</sup> 生物濃縮係数(BCF)：3.162(計算値) <sup>11)</sup>
--

## (4) 製造輸入量及び用途

## 生産量・輸入量等

本物質の平成 12 年における国内生産量は 1,526,887t(高純度のもの)であり、輸出量は 527,989.760t、輸入量は 13,124.000t(輸出入量はテレフタル酸およびその塩)である<sup>12)</sup>。また、OECD に報告している生産量は 10,000t 以上である。

## 用途

本物質の主な用途はポリエステル系合繊(テトロン)、テトロンフィルム(ルミラー、ダイテフオイル)、ボトルエンブラ(ポリアリレート)の原料である<sup>12)</sup>。

## 2. 暴露評価

環境リスクの初期評価のため、水生生物の生存・生育を確保する観点から、実測データをもとに基本的には特定の排出源の影響を受けていない一般環境等からの暴露を評価することとし、安全側に立った評価の観点からその大部分がカバーされる高濃度側のデータによって暴露量の評価を行った。原則として統計的検定の実施を含めデータの信頼性を確認した上で最大濃度を評価に用いている。なお、多数のデータが得られている場合は、95 パーセンタイル値を参考として併記している。

## (1) 環境中分布の予測

テレフタル酸の環境中の分布について、各環境媒体間への移行量の比率を EUSES モデルを用いて算出した結果を表 2.1 に示す。なお、モデル計算においては、面積 2,400km<sup>2</sup>、人口約 800 万人のモデル地域を設定して予測を行った<sup>1)</sup>。

表 2.1 テレフタル酸の各媒体間の分布予測結果

		分布量(%)
大	気	0.0
水	質	35.5
土	壌	6.2
底	質	58.3

## (2) 各媒体中の存在量の概要

テレフタル酸の水質及び底質中の濃度について情報の整理を行ったが、データの信頼性が確認された調査例はなかった。

表 2.2 テレフタル酸の水質、底質中の存在状況

媒体	幾何平均値	算術平均値	最小値	最大値	検出下限値	検出率	調査地域	測定年	文献
公共用水域・淡水 $\mu\text{g/L}$	<50	<50			2 ~ 50	0/2	東京、 埼玉	1983	2
公共用水域・海水 $\mu\text{g/L}$	<50	<50			10 ~ 50	0/6	全国	1983	2
底質（公共用水域・淡水） $\mu\text{g/g}$	<250	<250			50 ~ 250	0/2	東京、 埼玉	1983	2
底質（公共用水域・海水） $\mu\text{g/g}$	<280	<280			250 ~ 280	0/6	全国	1983	2

## (3) 水生生物に対する暴露の推定（水質に係る予測環境中濃度：PEC）

テレフタル酸の水生生物に対する暴露の推定の観点から、水質中濃度を表 2.3 のように整理した。評価に耐えるデータは得られなかった。

表 2.3 水質中のテレフタル酸の濃度

媒体	平均濃度	最大値等濃度
	水質	
公共用水域・淡水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった
公共用水域・海水	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった

注)：公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。

## 4．生態リスクの初期評価

生態リスクの初期評価として、水生生物に対する化学物質の影響（内分泌攪乱作用に関するものを除く）についてのリスク評価を行った。

## (1) 生態毒性の概要

本物質の水生生物に対する影響濃度に関する知見の収集を行い、その信頼性を確認したものについて生物群、毒性分類別に整理すると表 4.1 のとおりとなる。

表 4.1 生態毒性の概要

生物種	急性	慢性	毒性値 [ $\mu\text{g/L}$ ]	生物名	エンドポイント /影響内容	暴露期間 [日]	信頼性			Ref. No.
							a	b	c	
藻類			22.0%	<i>Selenastrum capricornutum</i>	IC <sub>50</sub> POP	4				17221
甲殻類			25.5%	<i>Daphnia magna</i>	EC <sub>50</sub> IMM	2				17221
魚類			>70%	<i>Pimephales promelas</i>	EC <sub>50</sub> MOR	2				17221
その他			<b>55,000</b>	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	IC <sub>50</sub> POP	36 時間				16142
			280,000	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	IC <sub>50</sub> POP	9 時間				16142
			356,000	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	IC <sub>50</sub> POP	9 時間				14980

太字の毒性値は、PNEC 算出の際に参照した知見として本文で言及したもので、下線を付した毒性値は PNEC 算出の根拠として採用されたものを示す。

信頼性) a：毒性値は信頼できる値である、b：ある程度信頼できる値である、c：毒性値の信頼性は低いあるいは不明

エンドポイント) IC<sub>50</sub> (Median Inhibition Concentration) : 半数阻害濃度、EC<sub>50</sub> (Median Effective Concentration) : 半数影響濃度  
 影響内容) POP (Population) : 個体群の変化、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality): 死亡

## (2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて、信頼できる知見のうち生物群ごとに値の最も低いものを整理し、そのうち最も低い値に対して情報量に応じたアセスメント係数を適用することにより、予測無影響濃度 (PNEC) を求めた。

急性毒性値については、その他の生物ではテトラヒメナ類 *Tetrahymena pyriformis* に対する生長阻害の 36 時間半数影響濃度 (IC<sub>50</sub>) 55,000 µg/L であった。急性毒性値について藻類、甲殻類及び魚類の信頼できる知見が得られなかったため PNEC を求めることができなかった。なお、その他の生物を採用した場合、PNEC の参考値は 55 µg/L となる。

慢性毒性値については、信頼できるデータが得られなかった。

本物質の PNEC は求めることはできなかったが、参考値としては 55 µg/L となる。

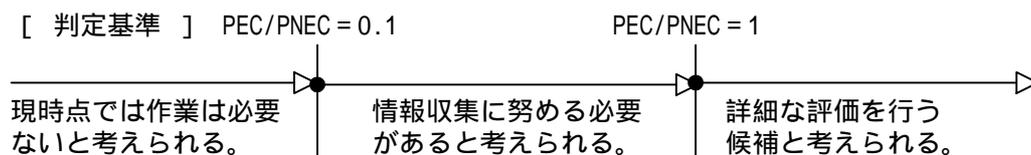
## (3) 生態リスクの初期評価結果

表 4.2 生態リスクの初期評価結果

媒体		平均濃度	最大値[95 パーセントイル値]濃度 (PEC)	PNEC	PEC/PNEC 比
水質	公共用水域・淡水域	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった	(55) µg/L	-
	公共用水域・海水域	評価に耐えるデータは得られなかった	評価に耐えるデータは得られなかった		-

注：1)公共用水域・淡水域は、河川河口域を含む。

2)PNEC での ( ) 内の数値はその他の生物を考慮した場合の値。



生態リスク初期評価に必要な情報は得られなかったため、生態リスクの判定はできない。本物質の国内生産量 (平成 12 年) は 1,526,887t で、OECD に報告している生産量は 10,000t 以上と多く、水質中には約 36% 分配されると予測されているが、良分解性で BOD 分解率も 75% と報告されている。したがって、今後、類似物質の毒性等に関する情報を収集し、生態毒性に関する知見の充実を優先的に行う必要性について検討する必要があると考えられる。

## 4 . 引用文献等

### (1) 物質に関する基本的事項

- 1) 化学辞典, 東京化学同人(1994). [財団法人化学物質評価研究機構(1998): 化学物質安全性(ハザード)評価シート]

- 2) Budavari, S. (ed.). The Merck Index - Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals. Rahway, NJ: Merck and Co., Inc., 1989. 1443. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 3) Sax, N.I. Dangerous Properties of Industrial Materials. 6th ed. New York, NY: Van Nostrand Reinhold, 1984. 2503. [HSDB]
- 4) Towle PH et al; Phthalic Acids; In: Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. 2th ed. Volumes 15:444. New York, NY: John Wiley and Sons (1968). [HSDB]
- 5) 財団法人化学物質評価研究機構(1998) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート]
- 6) Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995. 38. [HSDB]
- 7) Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. 3rd ed., Volumes 1-26. New York, NY: John Wiley and Sons, 1978-1984.,p. 17 732-7 (1982). [HSDB]
- 8) Yalkowsky SH, Dannenfelser RM; The AQUASOL dATABASE of Aqueous Solubility. Fifth Ed, Tucson, AZ: Univ Az, College of Pharmacy (1992). [HSDB]
- 9) 通産省化学品安全課監修, 化学品検査協会編, 化審法の既存化学物質安全性点検データ集, 日本化学物質安全・情報センター(1992).
- 10) Hazardous Substances Data Bank(HSDB), U.S. National Library of Medicine(1997). [財団法人化学物質評価研究機構(1998) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート]
- 11) BCFWIN v2.14
- 12) 化学工業日報社(2002) : 14102 の化学商品

## (2) 暴露評価

- 1: (財)日本環境衛生センター 平成 13 年度化学物質の暴露評価に関する調査報告書 (環境庁請負業務)
- 2:環境庁保健調査室 : 昭和 59 年版化学物質と環境

## (3) 生態リスクの初期評価

- 1) データベース : U.S.EPA 「AQUIRE」
  - 2) 引用文献 (Ref. No. : データベースでの引用文献番号)
- 14980 : Sauvant, M.P., D. Pepin, C.A. Groliere, and J. Bohatier (1995) : Effects of Organic and Inorganic Substances on the Cell Proliferation of L-929 Fibroblasts and *Tetrahymena pyriformis* GL Protozoa Used for Toxicological Bioassays. Bull.Environ.Contam.Toxicol. 55(2):171-178.
- 16142 : Sauvant, M.P., D. Pepin, J. Bohatier, and C.A. Groliere (1995) : Microplate Technique for Screening and Assessing Cytotoxicity of Xenobiotics with *Tetrahymena pyriformis*. Ecotoxicol.Environ.Saf. 32(2):159-165.
- 17221 : Haley, M.V., N.A. Chester, C.W. Kurnas, W.T. Muse, and C.T. Phillips (1995) : Toxicity of Terephthalic Acid (TPA) Smoke Mix to Algae, *Daphnia*, Fathead Minnows, and Earthworms. Edgewood Research Development & Engineering Center Rep.No.ERDEC-TR-275, U.S.Army Chemical and Biological Defense Command, Aberdeen Proving Ground, MD:20 p.(U.S.NTIS AD-A299941).