

FULL SIDS SUMMARY

6-tert-Butyl-2, 4-xyleneol

CAS NO: 1879-09-0		SPECIES	PROTOCOL	RESULTS
PHYSICAL-CHEMICAL				
2.1	Melting Point			21 – 22 °C
2.2	Boiling Point			247.8 – 248.3 °C
2.3	Density			No data available
2.4	Vapour Pressure		OECD TG 104	1.7 Pa at 25 °C
2.5	Partition Coefficient (Log Pow)		OECD TG 107	4.08 at 25 °C
2.6 A.	Water Solubility		OECD TG 105	150 mg/l at 25 °C
B.	pH			No data available.
	pKa			No data available
2.12	Oxidation: Reduction Potential			No data available.
ENVIRONMENTAL FATE AND PATHWAY				
3.1.1	Photodegradation		Calculation	Half-life: 2.16 years (direct photolysis in water)
3.1.2	Stability in Water		OECD TG 111	Stable at pH 4.0, 7.0 and 9.0
3.2	Monitoring Data			No data available
3.3	Transport and Distribution		Calculated (Fugacity Level III)	100% released to water, In Air 0.72% In Water 40.70% In Soil 30.70% In Sediment 27.88%
3.5	Biodegradation		OECD TG 301C	Not readily biodegradable: 3-5% (BOD) in 28 days, 0-4% (GC) in 28 days
3.6	Bioaccumulation			No data available
ECOTOXICOLOGY				
4.1	Acute/Prolonged Toxicity to Fish	<i>Oryzias latipes</i>	OECD TG 203	LC ₅₀ (24hr): 6.0 mg/L LC ₅₀ (96hr): 4.4 mg/L
4.2	Acute Toxicity to Aquatic Invertebrates (<i>Daphnia</i>)	<i>Daphnia magna</i>	OECD TG 202	EC ₅₀ (24hr): 5.6 mg/l
4.3	Toxicity to Aquatic Plants e.g. Algae	<i>Selenastrum capricornutum</i>	OECD TG 201	EC ₅₀ (72hr): 3.6 mg/l NOEC: 1.7 mg/l
4.5.2	Chronic Toxicity to Aquatic Invertebrates (<i>Daphnia</i>)	<i>Daphnia magna</i>	OECD TG 202	EC ₅₀ (21d, Immobility): 2.5 mg/l EC ₅₀ (21d, Reproduction): 0.60 mg/l NOEC (21d, Repro): 0.32 mg/l
4.6.1	Toxicity to Soil Dwelling Organisms			No data available.
4.6.2	Toxicity to Terrestrial Plants			No data available.

A chromosomal aberration test in line with Guidelines for Screening Mutagenicity Testing of Chemicals (Japan) and OECD Test Guideline 473 was conducted using cultured Chinese Hamster lung (CHL/IU) cells. This study was well controlled and regarded as a key study.

No structural chromosomal aberrations or polyploidy were recognized up to a maximum concentration of 3.5 mg/ml under conditions of both continuous treatment and short-term treatment with or without an exogenous metabolic activation system (MHW, 1998).

In vivo Studies

No data are available on *in vivo* genotoxic effects.

3.1.4 Toxicity for Reproduction

6-tert-Butyl-2,4-xyleneol was studied for oral toxicity in rats according to the OECD combined repeated dose and reproductive/developmental toxicity test [OECD TG 422] at doses of 0, 6, 30 and 150 mg/kg/day.

Test substance showed no effects on mating, fertility and estrous cycle. In observation at delivery, three females given 150 mg/kg lost their litters during lactation period, and tendency to decrease of viability index of pups at Day 4 after birth was observed in 150 mg/kg group. The results described above led to a conclusion that effects of reproductive toxicity study were considered to appear at 150 mg/kg/day in rats (MHW, Japan, 1994). The NOEL for repeated dose toxicity in rats is considered to be 30 mg/kg/day in parental animals males and 30 mg/kg/day in F₁ offspring.

3.2 Initial Assessment for Human Health

The chemical showed no genotoxic effects in bacteria and in a chromosomal aberration test *in vitro*. In a combined repeat dose and reproductive/developmental toxicity screening test, there were no clinical observation attributed to the administration of the test substance in parental animals. However, increases of liver and kidney weights were observed at the middle and highest dose level (30 and 150 mg/kg/day). In addition, histopathological examination showed swelling of liver cells and degeneration and protein cast of the proximal renal tubules in the groups. From the view point of reproductive/developmental end-points, only a few females at the highest dose lost their litters during lactation period. Other effects (e.g. mating, fertility and estrous cycle) were not observed. Therefore, the NOEL was 6 mg/kg/day for repeated dose toxicity and 30 mg/kg/day for reproductive toxicity.

For human health, daily intake of the chemical could not be estimated, because of the lack of exposure scenarios. Therefore, the health risk is presumably low due to its exposure situation.

4 HAZARDS TO THE ENVIRONMENT

4.1 Aquatic Effects

6-tert-Butyl-2,4-xyleneol has been tested in a limited number of aquatic species (*Selenastrum capricornutum*, *Daphnia magna* and *Oryzias latipes*), under OECD test guidelines [OECD TG 201, 202, 203]. Acute and chronic toxicity data to test organisms for 6-tert-butyl-2,4-xyleneol are summarized in Table 2. No other ecotoxicological data are available.

Various NOEC and LC₅₀ values were gained from above tests; 96h LC₅₀ = 4.4 mg/l (acute fish); 24h EC₅₀ = 5.6 mg/l (acute daphnia); 72h EC₅₀ = 3.6 mg/l (acute algae); NOEC = 1.7 mg/L (algae), 21d NOEC = 0.32 mg/l (long-term daphnia reproduction). Therefore, the chemical is considered to

be moderately toxic to fish, daphnids and algae. As the lowest chronic toxicity result, the 21 d-NOEC (reproduction) of *Daphnia magna* (0.32 mg/l) was adopted. An assessment factor of 100 is applied. Thus PNEC of 6-tert-butyl-2, 4-xyleneol is 0.0032 mg/l. Since the chemical is not produced in member countries, PEC/PNEC ratio could not be calculated. Therefore, it is considered to be currently of low potential risk for the environment.

Table 2. Acute and chronic toxicity data of 6-tert-butyl-2,4-xyleneol to aquatic organisms.

Species	Endpoint ¹	Conc. (mg/L)	Reference
<i>Selenastrum capricornutum</i> (algae)	Biomass: EC ₅₀ (72h)	3.6 mg/L	EA, Japan. (1994)
	NOEC	1.7 mg/L	
<i>Daphnia magna</i> (water flea)	Imm: EC ₅₀ (24h)	5.6 mg/L	
	Imm: EC ₅₀ (21d)	2.5 mg/L	
	Rep: EC ₅₀ (21d)	0.60 mg/L	
	NOEC(21d)	0.32 mg/L	
<i>Oryzias latipes</i> (fish, Medaka)	Mor: LC ₅₀ (24h)	6.0 mg/L	
	Mor: LC ₅₀ (72h)	5.0 mg/L	
	Mor: LC ₅₀ (96h)	4.4 mg/L	

Notes: ¹ Mor, mortality, Rep, reproduction, Imm, immobilisation

4.2 Initial Assessment for the Environment

6-tert-Butyl-2,4-xyleneol is not produced in Japan, and there are no imported volumes. However, this chemical is registered in TSCA and EINECS. This chemical is stable in acidic, neutral and alkaline solutions, and is considered as "not readily biodegradable".

For the environment, various NOEC and LC₅₀ values were gained from test results; 96h LC₅₀ = 4.4 mg/l (acute fish); 24h EC₅₀ = 5.6 mg/l (acute daphnia); 72h NOEC = 1.7 mg/l (algae); 21d NOEC = 0.32 mg/l (long-term daphnia reproduction). Therefore, the chemical is considered to be moderately toxic to fish and daphnids and algae. As the lowest chronic toxicity result, the 21 d-NOEC (reproduction) of *Daphnia magna* (0.32 mg/l) was adopted. An assessment factor of 100 is applied. Thus the PNEC of 6-tert-butyl-2, 4-xyleneol is 0.0032 mg/l. Since the chemical is not produced in member countries, PEC/PNEC ratio could not be calculated. Therefore, it is considered to be currently of low potential risk for the environment.

5 RECOMMENDATIONS

A potential hazard to man due to a low no-effect-level in repeated dose animal studies is identified, but exposure is considered to be low.

Unless further information on exposure in other member countries presents evidence to the contrary, it is currently considered of low potential risk and low priority for further work.

要 約

試験委託者：環境省

表 題：イソチオシアン酸メチルの藻類 (*Pseudokirchneriella subcapitata*)
に対する生長阻害試験

試験番号：A030423-1

試験方法：

- 1) 適用ガイドライン：OECD 化学品テストガイドライン No. 201 「藻類生長阻害試験」
(1984年)
- 2) 暴露方式：止水式 (密閉系), 振とう培養 (100rpm)
- 3) 供試生物：*Pseudokirchneriella subcapitata* (株名：ATCC22662)
(旧学名：*Selenastrum capricornutum*)
- 4) 暴露期間：72時間
- 5) 試験濃度：対照区, 助剤対照区,
(設定値) 0.0200, 0.0330, 0.0540, 0.0890, 0.150, 0.240, 0.400 mg/L
公比：1.6
助剤濃度一定：93 mg/L (N,N-ジメチルホルムアミド使用)
- 6) 試験液量：100 mL/容器
- 7) 連 数：3 容器/試験区
- 8) 初期細胞濃度：前培養した藻類 1×10^4 cells/mL
- 9) 試験温度：23±2 °C
- 10) 照 明：4000 lux (±20%の変動内, フラスコ液面付近) で連続照明
- 11) 分 析 法：ガスクロマトグラフィー質量分析 (GC/MS)

試験結果：

- 1) 試験液および試験培養液中の被験物質濃度

被験物質濃度分析の結果, 測定値の設定値に対する割合は, 暴露開始時の試験液において 96~101 %, 暴露終了時の試験培養液において 17~95 %であった。濃度減少の主な原因は, 藻体への移行および揮散と考えられた。阻害濃度の算出には開始時の測定値を用いた。

2) 生長曲線下面積の比較による阻害濃度

50%生長阻害濃度 EbC50 (0-72h) : 0.135 mg/L (95%信頼区間 : 0.131~0.139 mg/L)

最大無作用濃度 NOECb (0-72h) : 0.0548 mg/L

3) 生長速度の比較による阻害濃度

50%生長阻害濃度 ErC50 (24-48h) : 0.181 mg/L (95%信頼区間 : 算出不可)

最大無作用濃度 NOECr (24-48h) : 0.0548 mg/L

50%生長阻害濃度 ErC50 (24-72h) : 0.193 mg/L (95%信頼区間 : 算出不可)

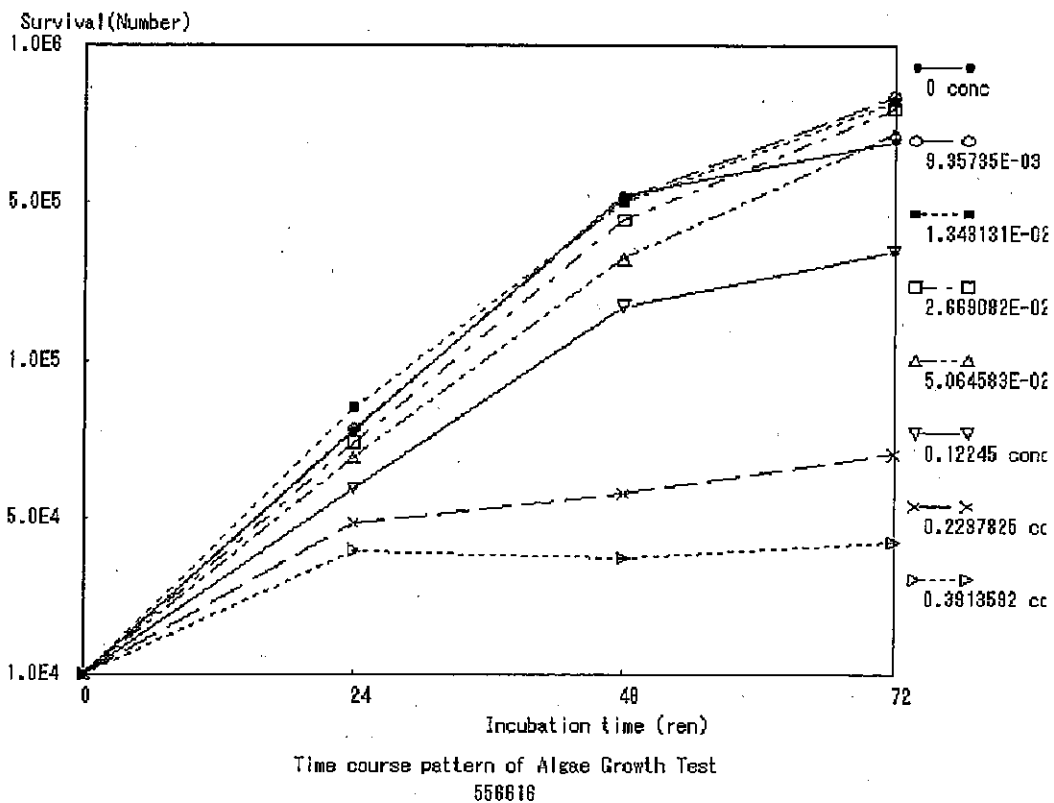
最大無作用濃度 NOECr (24-72h) : 0.0855 mg/L

4) 藻類の形態観察

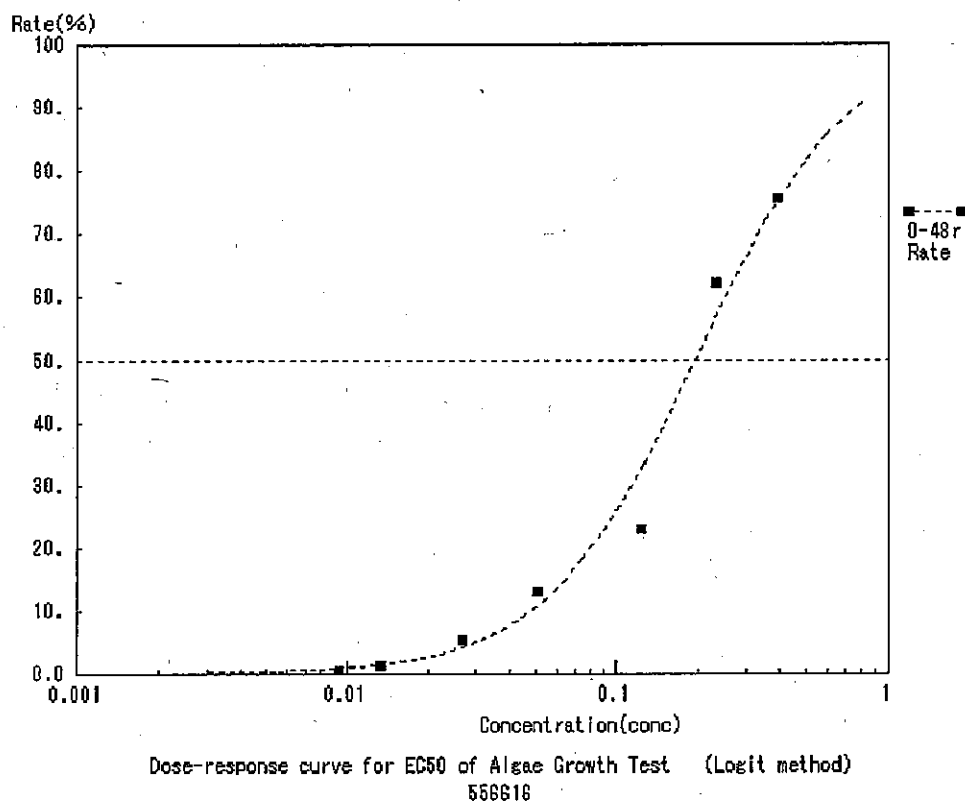
暴露終了時の顕微鏡下での細胞形態観察の結果、0.240 mg/L以上の濃度区で、細胞容積の拡大（膨張）が認められた。0.150 mg/L以下の濃度区では細胞形態の変化（収縮、膨張、破裂等）や細胞凝集は認められず、また、対照区および助剤対照区との相違もなかった。

イソチオシアン酸メチル (CAS.556-61-6)

① 生長曲線



②阻害率曲線



③毒性値

48hErC50(実測値に基づく)=0.19mg/L
48hNOECr(実測値に基づく)=0.027mg/L

要 約

試験委託者：環境省

表 題：イソチオシアン酸メチルのオオミジンコ (*Daphnia magna*) に対する急性遊泳阻害試験

試験番号：A030423-2

試験方法：

- 1) 適用ガイドライン：OECD 化学品テストガイドライン No. 202 「ミジンコ類、急性遊泳阻害試験および繁殖試験」 (1984年)
- 2) 暴露方式：半止水式 (24時間後に試験液の全量を交換)
水面をテフロンシートで被覆
- 3) 供試生物：オオミジンコ (*Daphnia magna*)
- 4) 暴露期間：48時間
- 5) 試験濃度：対照区, 0.0200, 0.0360, 0.0630, 0.110, 0.200 mg/L
(設定値) 公比：1.8
- 6) 試験液量：100 mL/容器
- 7) 連 数：4 容器/試験区
- 8) 供試生物数：20頭/試験区 (5頭/容器)
- 9) 試験温度：20±1℃
- 10) 照 明：室内光, 16時間明 (800 lux以下) / 8時間暗
- 11) 分 析 法：ガスクロマトグラフィー質量分析 (GC/MS)

試験結果：

1) 試験液中の被験物質濃度

試験液の分析の結果、測定値の設定値に対する割合は、暴露開始時において 86~87%、
換水前において 73~79%であった。

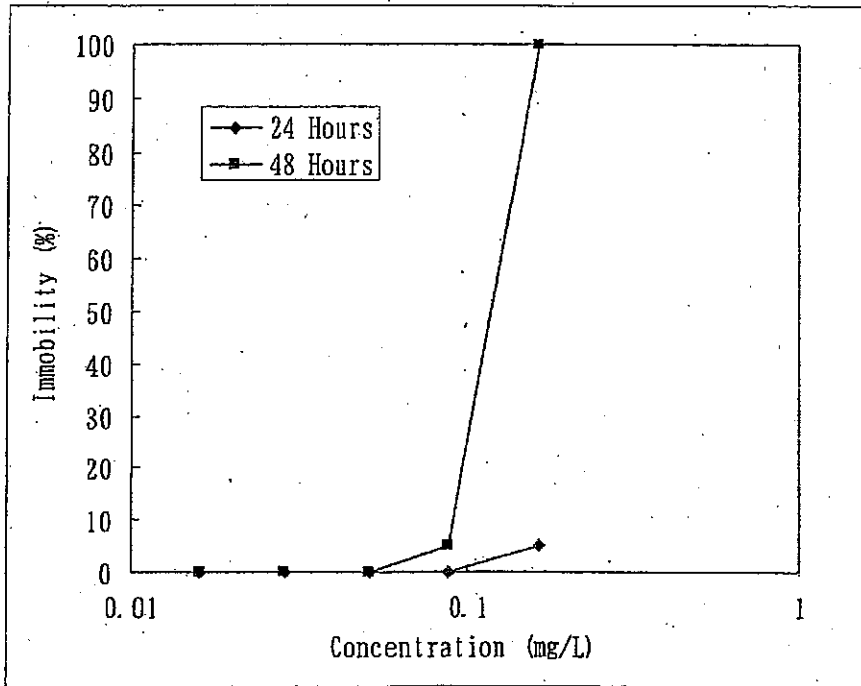
2) 24時間暴露後の結果

	(mg/L)	95%信頼区間 (mg/L)
半数遊泳阻害濃度 (EiC50)	> 0.165	算出不可
0%阻害最高濃度	0.0881	—
100%阻害最低濃度	> 0.165	—

3) 48時間暴露後の結果

	(mg/L)	95%信頼区間 (mg/L)
半数遊泳阻害濃度 (EiC50)	0.116	0.0881 ~ 0.165
0%阻害最高濃度	0.0521	—
100%阻害最低濃度	0.165	—

Figure 1 Concentration-Immobility Curve



要 約

試験委託者：環境省

表 題：イソチオシアン酸メチルのヒメダカ (*Oryzias latipes*) に対する急性毒性試験

試験番号：A030423-4

試験方法：

- 1) 適用ガイドライン：OECD 化学品テストガイドライン No. 203 「魚類急性毒性試験」
(1992年)
- 2) 暴露方式：半止水式 (24時間毎に試験液の全量を交換)
水面をテフロンシートで被覆
- 3) 供試生物：ヒメダカ (*Oryzias latipes*)
- 4) 暴露期間：96時間
- 5) 試験濃度：対照区, 0.0125, 0.0250, 0.0500, 0.100, 0.200 mg/L
(設定値) 公比：2.0
- 6) 試験液量：5.0 L/容器
- 7) 連 数：1 容器/試験区
- 8) 供試生物数：10尾/試験区
- 9) 試験温度：24±1℃
- 10) 照 明：室内光, 16時間明 (1000 lux以下) / 8時間暗
- 11) 分 析 法：ガスクロマトグラフィー質量分析 (GC/MS)

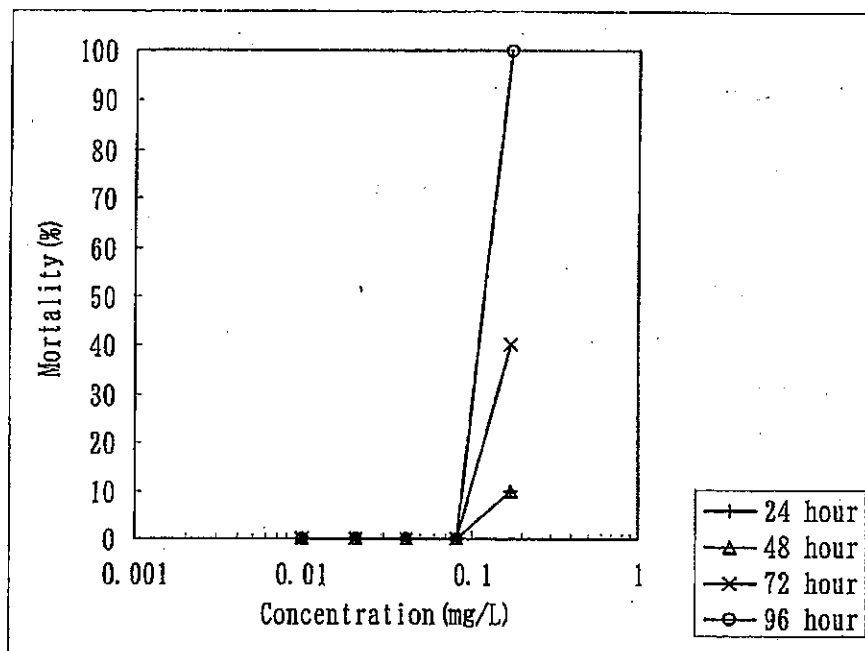
試験結果：

1) 試験液中の被験物質濃度

試験液の分析の結果、測定値の設定値に対する割合は、暴露開始時において84~91%、24時間後において71~81%であった。

2) 96時間暴露後の半数致死濃度 (LC50) : 0.118 mg/L (95%信頼区間 : 0.0818 ~ 0.169 mg/L)

Figure 1 Concentration-Mortality Curve



要 旨

試験委託者

環境庁

表 題4-(1-メチルエテニル)フェノールの藻類 (*Selenastrum capricornutum*) に対する生長阻害試験試験番号

NMMP/E99/1210

試験方法

本試験は、OECD化学品テストガイドラインNo.201「藻類生長阻害試験」(1984年)に準拠して実施した。

- 1) 被験物質 : 4-(1-メチルエテニル)フェノール
- 2) 培養方式 : 振とう培養 (100rpm)
- 3) 供試生物種 : *Selenastrum capricornutum* (ATCC-22662)
- 4) 温度 : 23±2 °C
- 5) 暴露期間 : 72 時間
- 6) 試験液量 : 100 mL (OECD培地)
- 7) 照明 : 4000 ~ 5000 lux (連続照明)
- 8) 初期細胞濃度 : 1×10^4 cells/mL
- 9) 試験濃度(設定) : 対照区、助剤対照区、0.4mg/L、0.7mg/L、1.2mg/L、2.2mg/L
4.0mg/Lおよび 7.2mg/L (公比 1.8)
- 10) 試験液中の被験物質の分析
: HPLC法 (暴露開始時、終了時)

結 果

- 1) 生長曲線下の面積の比較による生長阻害濃度
EbC50(0-72) = 2.83 mg/L (95%信頼区間: 2.59 mg/L ~ 3.11 mg/L)
無影響濃度 (NOEC(面積法 0-72)) = 1.56 mg/L

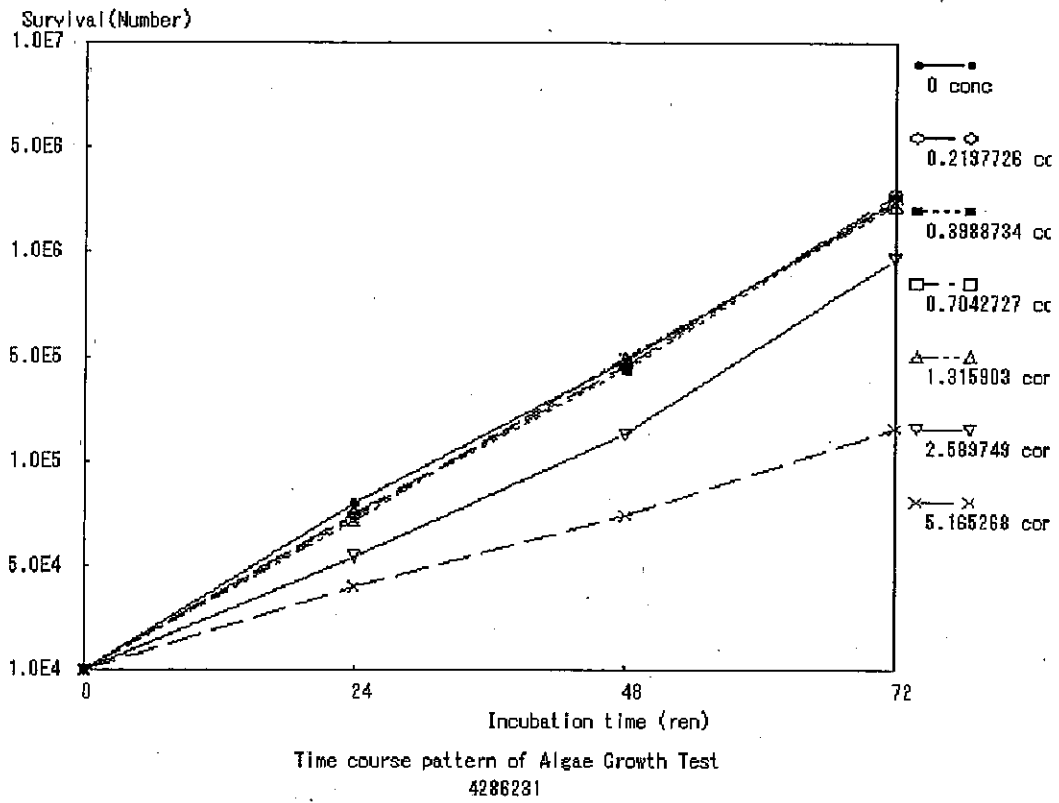
2) 生長速度の比較による生長阻害濃度

$$\text{ErC50}(24-48) = 5.67 \text{ mg/L} \text{ (95\%信頼区間: } 5.22 \text{ mg/L} \sim 6.30 \text{ mg/L)}$$
$$\text{無影響濃度 (NOEC(速度法 24-48))} = 3.24 \text{ mg/L}$$
$$\text{ErC50}(24-72) = 5.95 \text{ mg/L} \text{ (95\%信頼区間: } 5.59 \text{ mg/L} \sim 6.44 \text{ mg/L)}$$
$$\text{無影響濃度 (NOEC(速度法 24-72))} = 3.24 \text{ mg/L}$$

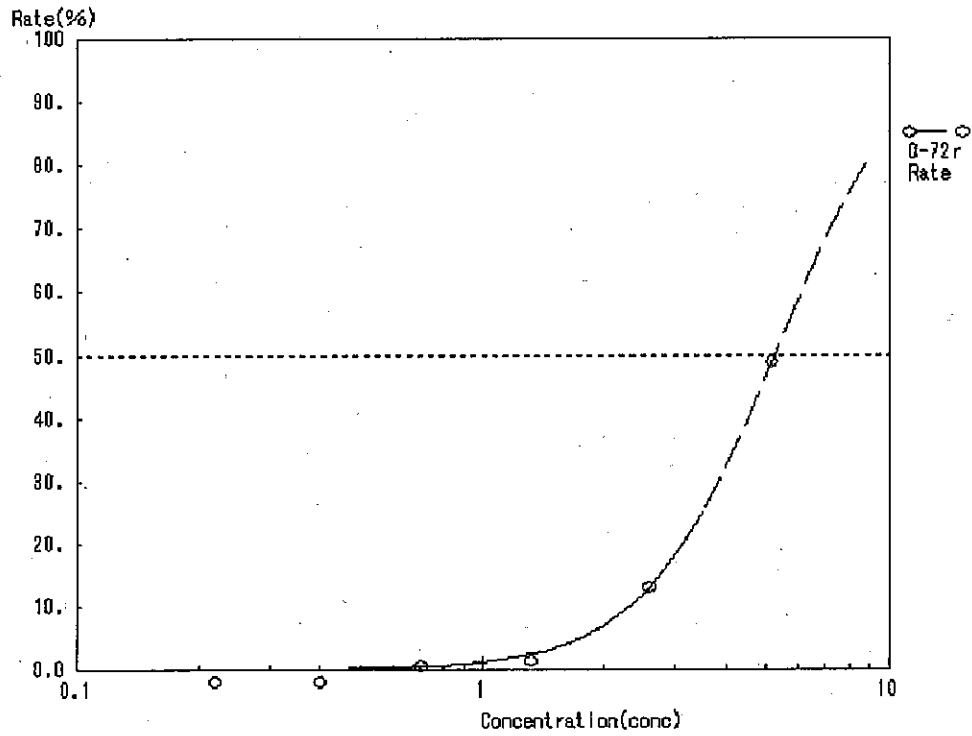
(上記濃度は、全て暴露開始時の実測濃度に基づく値)

4-(1-メチルエチニル)フェノール(CAS.4286-23-1)

①生長曲線



②阻害率曲線



Dose-response curve for EC50 of Algae Growth Test (Logit method)
4286231

③毒性値

72hErC50(実測値に基づく) = 5.4mg/L
72hNOECr(実測値に基づく) = 1.3mg/L

要 旨

試験委託者

環境庁

表 題4-(1-メチルエテニル)フェノールのオオミジンコ (*Daphnia magna*)に対する急性遊泳阻害試験試験番号

NMMP/E99/2210

試験方法

本試験は、OECD 化学品テストガイドライン No.202「ミジンコ類、急性遊泳阻害試験および繁殖試験」(1984年)に準拠して実施した。

- 1)被験物質 :4-(1-メチルエテニル)フェノール
- 2)暴露方法 :止水式
- 3)供試生物 :オオミジンコ (*Daphnia magna*)
- 4)暴露期間 :48時間
- 5)連数 :1濃度区につき4連
- 6)生物数 :20頭/1濃度区(1連につき5頭で1濃度区20頭)
- 7)試験濃度 :対照区、助剤対照区、0.53mg/L、0.95mg/L、1.71mg/L、3.09mg/L、5.56mg/L
および10.0mg/L(公比1.8)(設定濃度)
- 8)試験液量 :100 mL
- 9)照明 :室内光、16時間明/8時間暗
- 10)試験水温 :20±1°C

結 果

1)24時間暴露後の結果

24時間半数遊泳阻害濃度(EiC50)=5.17mg/L(95%信頼区間:2.47mg/L~9.06mg/L)

2)48時間暴露後の結果

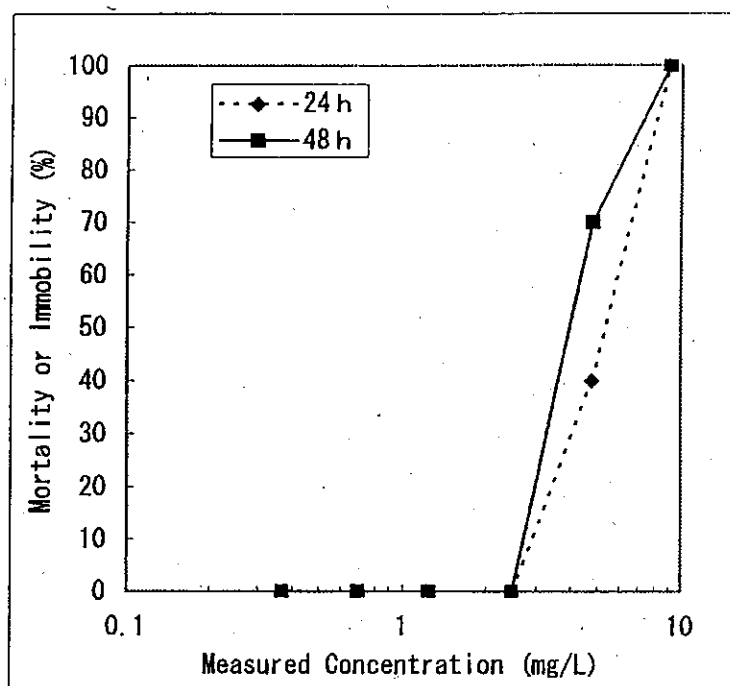
48時間半数遊泳阻害濃度(EiC50)=4.12mg/L(95%信頼区間:2.47mg/L~4.78mg/L)

最大無作用濃度(NOECi)=2.47mg/L

100%阻害最低濃度=9.06mg/L

(上記濃度は、全て実測濃度の幾何平均値に基づく値)

Figure 1 Concentration-Response Curve of 4-(1-Methylethenyl)phenol

Mortality or Immobility in *Daphnia magna*

要 旨

試験委託者

環境庁

表 題4-(1-メチルエテニル)フェノールのオオミジンコ (*Daphnia magna*)に対する繁殖阻害試験試験番号

NMMP/E99/3210

試験方法

本試験は、OECD 化学品テストガイドライン No.211「オオミジンコ繁殖試験」(1998年)に準拠して実施した。

- 1) 被験物質 : 4-(1-メチルエテニル)フェノール
- 2) 暴露方法 : 半止水式(週に3回、試験液の全量を交換)
- 3) 供試生物 : オオミジンコ (*Daphnia magna*)
- 4) 暴露期間 : 21 日間
- 5) 試験濃度 : 対照区、助剤対照区、0.24mg/L、0.43mg/L、0.77mg/L、1.39mg/L、
2.50mg/L および 4.50mg/L(設定濃度)
(公比1.8、助剤 HCO-50、100mg/L)
- 6) 試験液量 : 1容器(連)につき 80 mL
- 7) 連数 : 10 容器(連)/濃度区
- 8) 供試生物数 : 10 頭/濃度区(1連につき 1 頭)
- 9) 試験水温 : 20±1°C
- 10) 照明 : 室内光、16 時間明/8 時間暗
- 11) 被験物質の分析 : 高速液体クロマトグラフ分析

結 果

1) 試験液中の被験物質濃度

実測濃度が設定濃度の±20%を外れたので結果の算出には実測濃度の時間加重平均値を用いた。

2) 21日間の親ミジンコの半数致死濃度(LC50)

= 0.98mg/L (95%信頼区間 : 0.56mg/L~3.33mg/L)

3) 21日間の50%繁殖阻害濃度(ErC50)

= 0.79mg/L (95%信頼区間 : 0.71mg/L~0.91mg/L)

4) 21日間の最大無作用濃度(NOECr) = 0.53mg/L

5) 21日間の最小作用濃度(LOECr) = 1.01mg/L

(上記濃度は、実測濃度の時間加重平均値に基づく値)

Figure 1 Cumulative Numbers of Dead Parental *Daphnia*

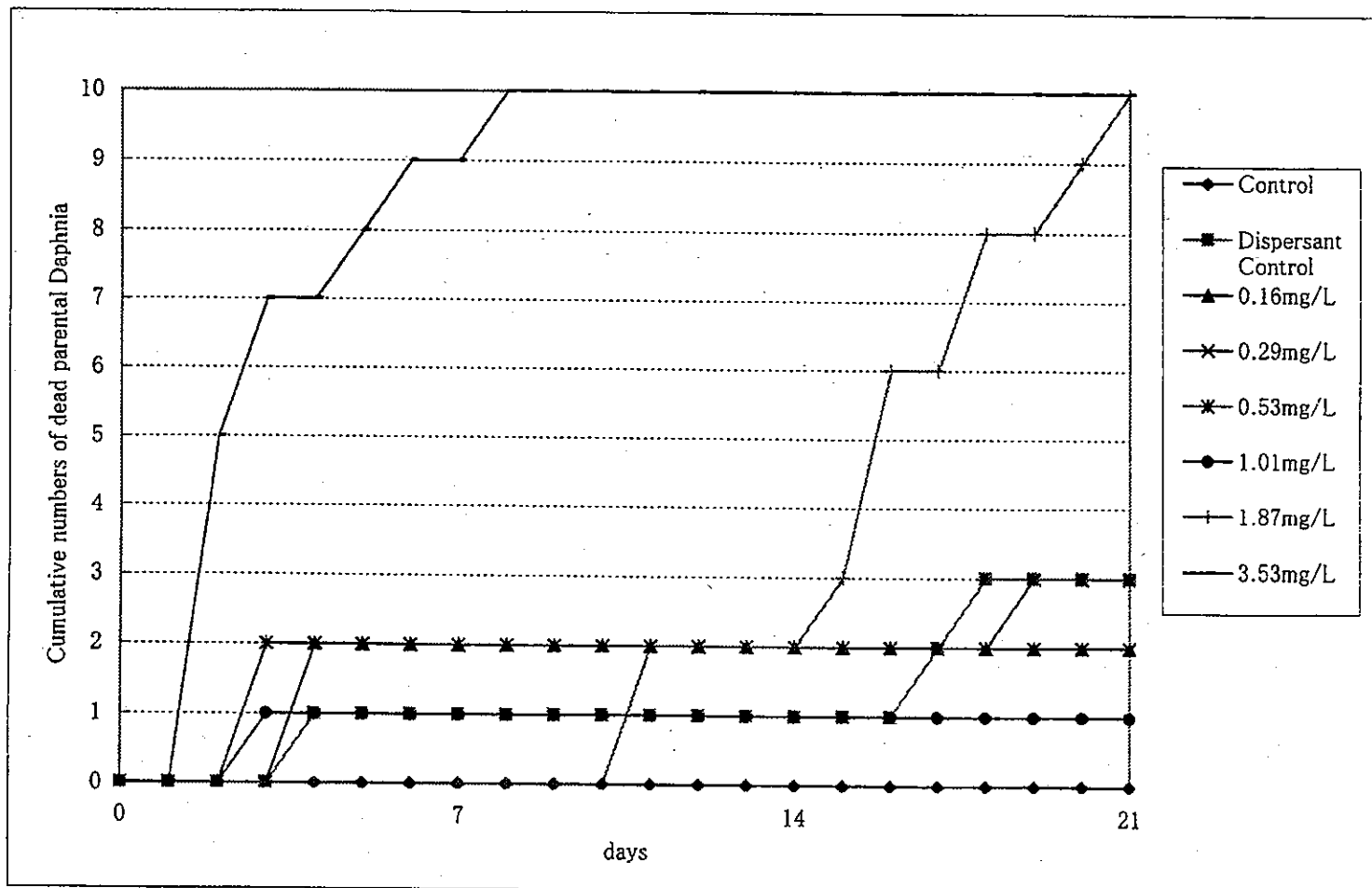
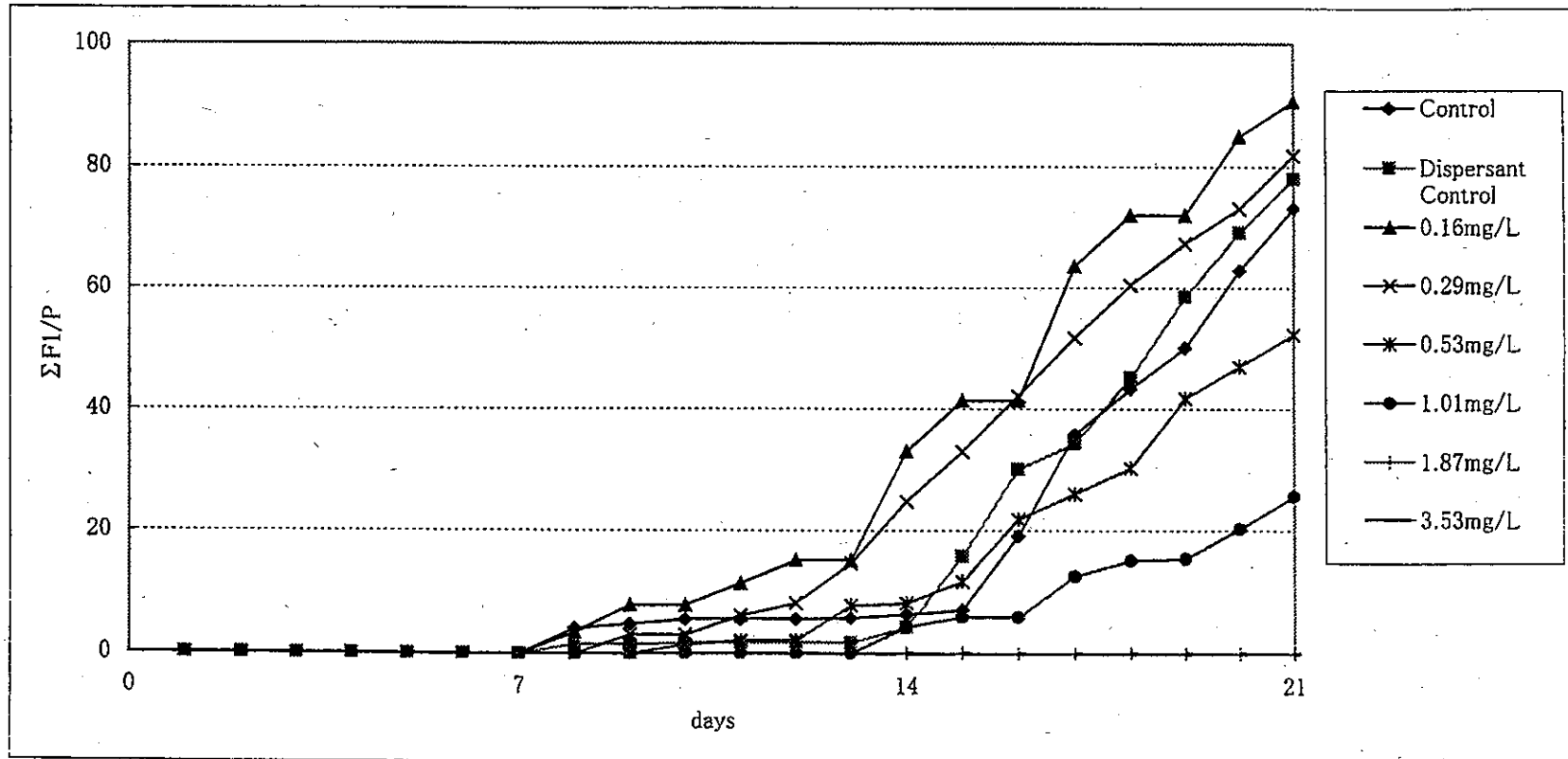


Figure 2 Mean Cumulative Numbers of Juveniles Produced per Adult ($\Sigma F1/P$) during 21 days



要 旨

試験委託者

環境庁

表 題4-(1-メチルエテニル)フェノールのヒメダカ (*Oryzias latipes*) に対する急性毒性試験試験番号

NMMP/E99/4210

試験方法

本試験は、OECD 化学品テストガイドライン No.203「魚類毒性試験」(1992年)に準拠して実施した。

被験物質	:4-(1-メチルエテニル)フェノール
方式	:半止水式(24時間換水)
供試生物	:ヒメダカ (<i>Oryzias latipes</i>)
試験濃度	:対照区、助剤対照区および1.9mg/L、3.4mg/L、6.2mg/L、11.1mg/L および 20.0mg/L(設定濃度)
曝露期間	:96 時間
試験液量	:3.0L
生物数	:10 尾/濃度区
照明	:室内光、16 時間明/8 時間暗
エアレーション	:なし
温度	:24±1°C

結 果

試験の結果、4-(1-メチルエテニル)フェノールの実測濃度の幾何平均値に基づく96時間の半数致死濃度(LC50)は9.2mg/Lであり、その95%信頼区間は6.2mg/L~16.7mg/Lであった。

Figure 1. Concentration-Response Curve of 4-(1-Methylethenyl)phenol

Mortality in Medaka

