


[1 0] 1-クロロ-4-ニトロベンゼン

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： 1-クロロ-4-ニトロベンゼン (別の呼称：p-クロロニトロベンゼン) CAS 番号：100-00-5 分子式：C ₆ H ₄ ClNO ₂ 分子量：157.6 構造式：	
--	--

(2) 物理化学的性状

本物質は黄色の固体である¹⁾。水溶性はやや高い。

融点	82 ~ 84 ¹⁾
沸点	242 ¹⁾
比重	1.520 (20 ²⁾) ²⁾
蒸気圧	20 Pa (0.15 mmHg) (30 ³⁾) ³⁾
換算係数	1ppm=6.45 mg/m ³ at 25 ³⁾ , 気体 (計算値)
n-オクタノール/水分配係数	2.39 (実測値) ³⁾
加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合なし ⁴⁾
解離定数	解離基なし ⁴⁾
水溶性	225 mg/L (20 ⁵⁾) ⁵⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

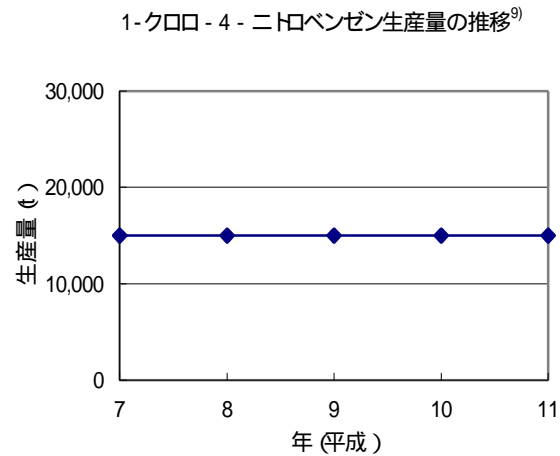
本物質の生分解性は悪い。分解性及び濃縮性は次のとおりである。

分解性 好氣的：難分解 ⁶⁾ 嫌氣的：報告なし ⁴⁾ 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 = 5.0×10^{-12} cm ³ /分子・sec (25 ⁷⁾) ⁷⁾ 、OH ラジカル濃度 = を $5.0 \times 10^5 \sim 1 \times 10^6$ 分子/cm ³ とした時の半減期は 1.6 ~ 3.2 日と計算される ⁴⁾ (直接光分解)：水中では、濃度 1.45×10^{-6} mol/L の水溶液に波長 290 nm 以上の光を 84 時間照射した時の分解度は 5 % 以下との報告がある ⁷⁾ 。 BOD から算出した分解度： 0 % (試験期間：2 週間、被験物質：100 mg/L、活性汚泥：30 mg/L) ⁶⁾ 生物濃縮係数 (BCF)：5.8 ~ 20.9 (試験期間：8 週間、試験濃度：0.15 mg/L), 7.5 ~ 18.1 (試験期間：8 週間、試験濃度：0.01 mg/L) ⁶⁾

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の平成 11 年における国内生産量は 15,000 t(推定)であり、輸出入量については記載がないので⁸⁾、推定される国内流通量は 15,000 t(推定)である。また、OECD に報告している生産量は 10,000 t 以上である。国内流通量の目安として、生産量の推移⁹⁾を下図に示した。



用途

本物質の主な用途は、アゾ染料、硫化染料の中間物である⁸⁾。

2. 暴露評価

環境リスクの初期評価のため、わが国の一般的な国民の健康や、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が、多数のデータが得られ、その一部に排出源周辺等のデータも含まれると考えられる場合には、95パーセンタイル値による評価を行っている。

(1) 環境中分布の予測

本物質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 2,400km²、人口約 800 万人のモデル地域を設定して予測を行った^{1),2)}。

表 2.1 本物質の各媒体間の分布予測結果

		分布量(%)
大	気	16.0
水	質	79.9
土	壤	0.005
底	質	4.1

(2) 各媒体中の存在量の概要

本物質の環境中等の濃度について情報の整理を行った。各媒体ごとにデータの信頼性が確認された調査例のうち、より広範囲の地域で調査が実施されたものを抽出した結果を表 2.2 に示す。

表 2.2 本物質の各媒体中の存在状況

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
一般環境大気	μg/m ³	< 0.003	0.0062	< 0.003	0.084	0.003	2/18	全国	1991	3
食物	μg/g	< 0.000175	< 0.000175			0.000175	0/45	全国	2001	4
公共用水域・淡水	μg/L	< 0.3	< 0.3			0.3	0/25	全国	1991	3
公共用水域・海水	μg/L	< 0.3	< 0.3			0.3	0/27	全国	1991	3
底質(公共用水域・淡水)	μg/g	< 0.04	< 0.04			0.04	0/25	全国	1991	3
底質(公共用水域・海水)	μg/g	< 0.04	< 0.04			0.04	0/29	全国	1991	3

(3) 人に対する暴露の推定（一日暴露量の予測最大量）

一般環境大気、公共用水域淡水及び食物の実測値を用いて、人に対する暴露の推定を行った。ここで公共用水域淡水のデータを用いたのは、飲料水の分析値が得られなかったため

ある(表 2.3)。化学物質の人による一日暴露量の算出に際しては、人の1日の呼吸量、飲水量及び食事量をそれぞれ 15m³、2L 及び 2,000g と仮定し、体重を 50kg と仮定している。

表 2.3 本物質の各媒体中濃度と一日暴露量

	媒体	濃度	一日暴露量
平均	大気		
	一般環境大気	0.003 µg/m ³ 未満程度 (1991)	0.0009 µg/kg/day 未満程度
	室内空気	データはない	データはない
	水質		
	飲料水	データはない	データはない
	地下水	データはない	データはない
	公共用水域・淡水	0.3 µg/L 未満程度 (1991)	0.012 µg/kg/day 未満程度
食物	0.000175 µg/g 未満程度 (2001)	0.007 µg/kg/day 未満程度	
土壌	データはない	データはない	
最大値等	大気		
	一般環境大気	0.084 µg/m ³ 程度 (1991)	0.025 µg/kg/day 程度
	室内空気	データはない	データはない
	水質		
	飲料水	データはない	データはない
	地下水	データはない	データはない
	公共用水域・淡水	0.3 µg/L 未満程度 (1991)	0.012 µg/kg/day 未満程度
食物	0.000175 µg/g 未満程度 (2001)	0.007 µg/kg/day 未満程度	
土壌	データはない	データはない	

人の一日暴露量の集計結果を表 2.4 に示す。吸入暴露による一日暴露量の予測最大量は 0.025 µg/kg/day (0.084 µg/m³) であった。経口暴露による一日暴露量の予測最大量は 0.019 µg/kg/day 未満であり、そのうち水質経由が 0.012 µg/kg/day 未満、食物経由が 0.007 µg/kg/day 未満であった。全暴露経路からの一日暴露量の予測最大量は 0.044 µg/kg/day 未満であった。

表 2.4 人の一日暴露量

		平均	予測最大量
		暴露量($\mu\text{g}/\text{kg}/\text{day}$)	暴露量($\mu\text{g}/\text{kg}/\text{day}$)
大気	一般環境大気	<u>0.0009</u>	0.025
	室内空気		
水質	飲料水		
	地下水		
	公共用水域・淡水	<u>0.012</u>	<u>0.012</u>
食物		<u>0.007</u>	<u>0.007</u>
土壌			
経口暴露量合計		<u>0.019</u>	<u>0.019</u>
総暴露量		<u>0.0199</u>	0.044

注：アンダーラインは不検出データによる暴露量を示す。また、総暴露量の項のアンダーラインは、不検出データによる暴露量が優位を示した総暴露量を示す。

(4) 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）

本物質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 2.5 のように整理した。水質について安全側の評価値として予測環境中濃度（PEC）を設定すると、公共用水域の淡水域及び海水域のいずれについても概ね $0.3 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満となった。

表 2.5 水質中の本物質の濃度

媒 体	平均	最大値等
	濃 度	濃 度
水 質		
公共用水域・淡水	$0.3 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満程度 (1991)	$0.3 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満程度 (1991)
公共用水域・海水	$0.3 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満程度 (1991)	$0.3 \mu\text{g}/\text{L}$ 未満程度 (1991)

注：公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。

3. 健康リスクの初期評価

健康リスクの初期評価として、ヒトに対する化学物質の影響（内分泌かく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) 一般毒性及び生殖・発生毒性

急性毒性¹⁾

表 3.1 急性毒性

動物種	経路	致死量、中毒量等
マウス	経口	LD ₅₀ : 1,414 mg/kg
哺乳動物	経口	LD ₅₀ : 420 mg/kg

本物質の局所刺激は少ないが、皮膚から吸収され、全身性の中毒を起こす。全身症状としては、急激な貧血が特徴で、チアノーゼを起こすこともある。倦怠感が強く現れる。

中・長期毒性

Sprague-Dawley ラット雌雄各 10 匹を 1 群とし、0、5、15、45 mg/m³ をエチレングリコールモノメチルエーテルに溶解してその蒸気を 4 週間（6 時間/日、5 日/週）吸入させた結果、用量に依存したメトヘモグロビンの上昇を認めた。また、15 mg/m³ 群及び 45 mg/m³ 群では貧血、肝・脾重量の増加と髄外造血、ヘモジデロシスが観察された²⁾。

生殖・発生毒性

ア) Sprague-Dawley ラット雌 24 匹を 1 群とし、0、5、15、45 mg/kg/day をコーン油に溶解して妊娠 6 日～19 日目まで経口投与した結果、45 mg/kg/day 群で胚・胎仔の吸収率と骨格の奇形の出現頻度に増加を認めたが、15 mg/kg/day 以下の群では異常を認めなかった³⁾。

なお、この研究者たちはこの後、さらに低用量で、より長期間の暴露の影響についても検討し、本物質に起因すると考えられる影響がなかったとされている（ただし、原論文が入手できないため、詳細は不明）。

イ) F344/N ラット雌雄各 10 匹を 1 群とし、0、39、77、155 mg/m³ を 13 週間（6 時間/日、5 日/週）吸入させた結果、39 mg/m³ 以上の群で性周期の短縮が認められた⁴⁾。

ヒトへの影響

ヒトに対する影響として、吸入及び経皮暴露による頭痛、動悸、めまい、吐き気、食欲不振等が知られている。

本物質の製造工場働く労働者が暴露され、顔面の蒼白、頭痛、呼吸困難、血清の赤色化、赤血球の巨大化と変形等がみられたとの報告がある。また、製品としての本物質を荷造り作業中に足部に付着したまま放置したために経皮吸収による中毒を起こした労働者では、不快感、頭痛、吐き気、呼吸困難、心悸亢進、チアノーゼ等の症状がみられている。

Yoshida (1988) は日本での職業暴露濃度を測定し、個人暴露量は、秋期 0.31 mg/m³ (0.12～0.80 mg/m³)、冬期 0.16 mg/m³ (0.04～0.66 mg/m³)、夏期 0.38 mg/m³ (0.16～0.88 mg/m³) であったと報告している。

(2) 発がん性

発がん性に関する知見の概要

F344 / DuCrj ラット及び Crj:BDF1 マウス雌雄各 50 匹を 1 群とし、ラットに 0、40、200、1,000 ppm、マウスに 0、125、500、2,000 ppm を食餌に添加して 104 週間投与した結果、ラットでは 1,000 ppm 群の雌雄に脾臓の間葉系組織由来の腫瘍（線維腫、線維肉腫、骨肉腫、肉腫（NOS）、血管肉腫）及び副腎の褐色細胞腫の発生増加を認めた。一方、マウスでは 2,000 ppm 群の雄に血管腫、悪性リンパ腫及び肝細胞がん、2,000 ppm 群の雌に肝臓の血管肉腫と肝細胞がんの発生増加を認めたが、発生率が低値であることからがん原性を断定するには至らなかった⁵⁾。

CD-1 マウスの雌雄に 18 ヶ月間の混餌投与した結果、雌雄ともに血管腫瘍の発生を認め、無影響量は食餌中濃度で 3,000 mg/kg であった。

発がんリスク評価の必要性

実験動物及びヒトでの発がん性に関して十分な証拠がないため、IARC の評価では 3（ヒトに対する発がん性については分類できない）に分類されている。このため、現時点では発がん性に関する評価を行う必要はない。

(3) 無毒性量（NOAEL）等の設定

経口暴露及び吸入暴露について、信頼性のあるデータが得られなかった。

(4) 健康リスクの初期評価結果

無毒性量等を設定できなかったため、現時点ではリスクの判定はできない。

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 [μg/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			2,200	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	EC ₁₀ BMS	2				2997
			4,900	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	EC ₁₀ PGR	2				2997
			8,000	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	EC ₅₀ BMS	2				2997
			16,000	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	EC ₅₀ PGR	2				2997
甲殻類			320	<i>Daphnia magna</i>	NOEC REP	21				847
			15,000	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	1				847
魚類			1,000	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	LC ₁₀₀ MOR	1				9125
その他			74,440	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	EC ₅₀ POP	2				4980

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の、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) EC₁₀ (10% Effective Concentration): 10%影響濃度、EC₅₀ (Median Effective Concentration): 半数影響濃度、LC₅₀ (Median Lethal Concentration): 半数致死濃度、LC₁₀₀ (100% Lethal Concentration): 100%致死濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration): 無影響濃度

影響内容) BMS (Biomass): 生物現存量、IMM (Immobilization): 遊泳阻害、MOR (Mortality): 死亡、PGR (Population Growth): 個体群成長・増殖、POP (Population): 個体群の組成変化、REP (Reproduction): 繁殖、再生産

(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、藻類では *Scenedesmus subspicatus* に対する生長阻害の 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 8,000 μg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する遊泳阻害の 24 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 15,000 μg/L、その他の生物では繊毛虫類 *Tetrahymena pyriformis* に対する増殖阻害の 48 時間半数成長阻害濃度 (EC₅₀) が 74,440 μg/L であった。急性毒性値について 3 生物群 (藻類、甲殻類及びその他) の信頼できる知見が得られたため、アセスメント係数として 1,000 を用いることとし、上記の毒性値のうち、その他の生物を除いて最も低い値 (藻類の 8,000 μg/L) にこれを適用することにより、急性毒性値による PNEC として 8 μg/L が得られた。

慢性毒性値については、甲殻類では *Daphnia magna* に対する繁殖阻害の 21 日間無影響濃度

5 . 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) The Merck Index, 11th Ed. (1989) Merck & Co., Inc.
- 2) Richardson, M. L. et. al. (1992) The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry
- 3) IPCS (1997) International Chemical Safety Cards
- 4) (財)化学品検査協会(1997) 化学物質ハザード・データ集
- 5) YALKOWSKY, SH & DANNENFELSER, RM (1992) [SRC WSKOWWIN v1.40]
- 6) (財)化学品検査協会(1992) 化審法の既存化学物質安全性点検データ集
- 7) Hazardous Substances Data Bank (HSDB) (1998) U.S. National Library of Medicine
- 8) 化学工業日報社(2001) 13901 の化学商品
- 9) 化学工業日報社(1997;1998;1999;2000;2001) 13197 の化学商品, 13398 の化学商品, 13599 の化学商品, 13700 の化学商品, 13901 の化学商品

(2) 暴露評価

- 1) (財)日本環境衛生センター 平成 11 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) (財)日本環境衛生センター 平成 12 年度化学物質の暴露評価に関する調査報告書(環境省 請負業務)
- 3) 環境庁保健調査室 平成 4 年版化学物質と環境
- 4) (財)日本食品分析センター 平成 11 年度食事からの化学物質暴露量に関する調査報告書

(3) 健康リスクの初期評価

- 1) 後藤 稔 編 (1994) 産業中毒便覧(増補版), 医歯薬出版
- 2) Nair, R. S. *et al.* (1986) *Fundam. Appl. Toxicol.*, 6 : 618-627.
- 3) Nair, R. S. *et al.* (1985) *Toxicity of Nitroaromatic Compounds* (Richkert, D. B. ed.) Washington DC, Hemisphere, pp. 61-85.
- 4) National Toxicology Program (1993) TOX 33.
- 5) 労働省(1994) パラ - ニトロクロルベンゼンによる健康障害を防止するための指針について(基発第 155 号)

参考資料

- ・ IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans, Volume 65, (1996) .

(4) 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)
- 847:Kuhn,R., M.Pattard, K.Pernak, and A.Winter (1989): Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to *Daphnia magna* in the 21 Day Reproduction Test. *Water Res.* 23(4): 501-510.
- 2997:Kuhn,R. and M.Pattard (1990): Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to Green Algae (*Scenedesmus subspicatus*) in the Cell Multiplication Inhibition Test. *Water Res.* 24(1): 31-38.
- 4980:Schultz,T.W., M.Cajina-Quezada, M.Chang, D.T.Lin, and R.Jain (1989): Structure-Toxicity

- Relationships of Para-Position Alkyl- and Halogen-Substituted Monoaromatic Compounds. In: G.W.Suter II and M.A.Lewis (Eds.), Aquatic Toxicology and Environmental Fate, 11th Volume, ASTM STP 1007, Philadelphia, PA:410-423.
- 9125:Lysak,A. and J.Marcinek (1972): Multiple Toxic Effect of Simultaneous Action of Some Chemical Substances on Fish. Roczn. Nauk Roln. Ser. H Rybactwo 94(3): 53-63.