

[19] 1-クロロ-2,4-ジニトロベンゼン

1. 物質に関する基本的事項

(1) 分子式・分子量・構造式

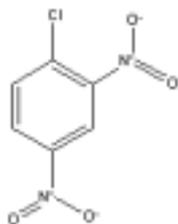
物質名：1-クロロ-2,4-ジニトロベンゼン
 (別の呼称：2,4-ジニトロ-1-クロロベンゼン 4-クロロ-1,3-ジニトロベンゼン)

CAS 番号：97-00-7

分子式：C₆H₃ClN₂O₄

分子量：202.6

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色針状結晶である¹⁾。

融点	54 ²⁾
沸点	315 ²⁾
比重	1.7 ²⁾
蒸気圧	8.5 × 10 ⁻⁵ mmHg(25 ³⁾) ³⁾
換算係数	該当せず ⁴⁾
n-オクタノール/水分配係数 (log Pow)	2.17 ⁵⁾
加水分解性	加水分解する化学結合なし ⁶⁾
解離定数	文献なし ⁴⁾
水溶性	8mg/L(15 ⁷⁾) ⁷⁾

(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：難分解 ⁸⁾ 嫌氣的：報告なし ⁹⁾ 非生物的： (OH ラジカルとの反応性)：大気中での反応速度を 2.2 × 10 ⁻¹⁴ cm ³ /分子・sec(25 ⁹⁾) とした時の半減期は 750 日である ⁹⁾ 。 BOD から算出した分解度： 0%(試験期間：2 週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L) ⁸⁾ 生物濃縮係数 (BCF)：<4.2(試験期間：6 週間、試験濃度：0.01mg/L)、<44(試験期間：6 週間、試験濃度：0.001mg/L) ⁸⁾
--

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の平成 10 年度における製造量等は 193t であり、その内訳は製造量 193t、輸入量 0t である¹⁰⁾。また、OECD に報告された生産量は 1,000 ~ 10,000t である。

用途

本物質の主な用途は、染料(サルファーブラック)、有機合成である¹⁾。

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

1-クロロ-2,4-ジニトロベンゼン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⁾。

表 2.1 1-クロロ-2,4-ジニトロベンゼンの各媒体間の分布予測結果

		分布量(%)
大	気	0.01
水	質	20.8
土	壌	36.5
底	質	42.7

(2) 各媒体中の存在量の概要

1-クロロ-2,4-ジニトロベンゼン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 1-クロロ-2,4-ジニトロベンゼンの水質、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 μg/L	<0.5	<0.5			0.5	0/1	東京	1978	2
公共用水域・海水 μg/L	<0.5	<0.5			0.2~0.5	0/7	全国	1978	2
底質(公共用水域・淡水) μg/g	<16.7	<16.7			16.7	0/1	東京	1978	2
底質(公共用水域・海水) μg/g	<16.7	<16.7			7~16.7	0/4	全国	1978	2

注 過去に 0.5μg/L 未満の報告が得られている (1978)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)

1-クロロ-2,4-ジニトロベンゼン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 1-クロロ-2,4-ジニトロベンゼンの濃度

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。

3. 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 3.1 のとおりとなる。

表 3.1 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			140	<i>Selenastrum capricornutum</i>	NOEC BMS	3				環境庁
			198	<i>Selenastrum capricornutum</i>	EC ₅₀ BMS	3				環境庁
			270	<i>Selenastrum capricornutum</i>	NOEC GRO	3				環境庁
			370	<i>Selenastrum capricornutum</i>	EC ₅₀ GRO	3				環境庁
甲殻類			150~360	<i>Daphnia magna</i>	NR ENZ	~4				14239
			183	<i>Daphnia magna</i>	NOEC REP	21				環境庁

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	
			490	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	2				11948
			540	<i>Ceriodaphnia reticulata</i>	NR ENZ	1				14239
			540	<i>Daphnia magna</i>	NR ENZ	1				14239
			655	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	2				環境庁
魚類			157	<i>Oryzias latipes</i>	LC ₅₀ MOR	4				環境庁
その他			1,300	<i>Brachionus calyciflorus</i>	LC ₅₀ MOR	1				9385
			2,000	<i>Brachionus plicatilis</i>	LC ₅₀ MOR	1				16539

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) EC₅₀(Median Effective Concentration): 半数影響濃度、LC₅₀(Median Lethal Concentration): 半数致死濃度、NOEC
 (No Observed Effect Concentration): 無影響濃度、NR(Not Reported):記載無し
 影響内容) BMS(Biomass): 生物現存量、ENZ(Enzyme): 酵素活性、GRO(Growth): 生長(植物)、成長(動物)、MOR(Mortality):
 死亡、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 *Selenastrum capricornutum* の生長阻害の 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 198 μg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する遊泳阻害の 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 655 μg/L、魚類では *Oryzias latipes* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 157 μg/L、その他ではツボワムシ *Brachionus calyciflorus* に対する 24 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 1,300 μg/L であった。急性毒性値について 3 生物群 (藻類、甲殻類及び魚類) 及びその他の生物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 100 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 (魚類の 157 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 1.6μg/L が得られた。なお、甲殻類については *Daphnia magna* に対する 48 時間半数影響濃度 490μg/L が得られているが、より信頼性の高い上記の値を採用した。

慢性毒性値については、藻類では *Selenastrum capricornutum* の生長阻害の無影響濃度 (NOEC) が 140 μg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する繁殖阻害の 21 日間無影響濃度 (NOEC) が 183 μg/L であった。慢性毒性値について 2 生物群 (藻類及び甲殻類) 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 100 を用いることとし、上記の毒性値のうち、最も低い値 (藻類の 140 μg/L) にこれを適用することにより、慢性毒性値による PNEC として 1.4 μg/L が得られた。

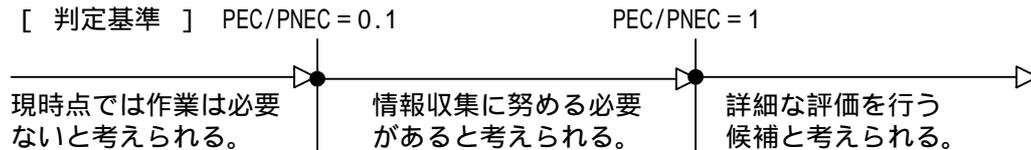
本物質の PNEC としては、藻類の慢性毒性値をアセスメント係数 100 で除した 1.4 μg/L を採用する。

(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

媒体		平均濃度	最大値[95 パーセンタイル値]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。	1.4 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：公共用水域・淡水域は、河川河口域を含む。



現時点では暴露評価に耐える十分なデータが得られず、PEC を求めることができなかったため、生態リスクの判定はできない。本物質は OECD に報告された生産量が 1,000 ~ 10,000t であり、水質中に 20% 程度分配されると予測されている。また、PNEC 値は 1.4μg/L と小さい値を示している。したがって、今後は、環境中濃度の測定等を優先的に行う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) 化学工業日報社(2002)：14102 の化学商品
- 2) Budavari, S. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 1996. 356. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 3) Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989. [HSDB]
- 4) 財団法人化学物質評価研究機構(2002)：化学物質安全性(ハザード)評価シート
- 5) Debnath AK et al; J Med Chem 34: 786-97 (1991). [HSDB]
- 6) Lyman WJ et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Washington, DC: Amer Chem Soc pp. 7-4, 7-5, 8-14 (1990). [HSDB]
- 7) Yalkowsky SH; Arizona Database of Aqueous Solubility, College of Pharmacy, University of Arizona Tuscon, AZ (1989). [HSDB]
- 8) 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).
- 9) Meylan WM, Howard PH; Chemosphere 26: 2293-99 (1993). [HSDB]
- 10) 平成 10 年度既存化学物質の製造・輸入量に関する実態調査, 通商産業省(1999). [財団法人化学物質評価研究機構(2002)：化学物質安全性(ハザード)評価シート]

(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54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)

9385: Snell, T.W., B.D. Moffat, C. Janssen, and G. Persoone (1991): Acute Toxicity Tests Using Rotifers IV. Effects of Cyst Age, Temperature, and Salinity on the Sensitivity of *Brachionus calyciflorus*. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 21(3):308-317.

11948: Dierickx, P.J., and C. Van der Wielen (1986): Glutathione-Dependent Toxicity of the Algicide 1-Chloro-2,4-Dinitrobenzene to *Daphnia magna* Straus. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 37(4):629-632.

14239: LeBlanc, G.A., and B.J. Cochrane (1985): Modulation of Substrate-Specific Glutathione S-Transferase Activity in *Daphnia magna* with Concomitant Effects on Toxicity Tolerance. *Comp. Biochem. Physiol.* 82 C(1):37-42.

16539: Snell, T.W., B.D. Moffat, C. Janssen, and G. Persoone (1991): Acute Toxicity Tests Using Rotifers. III. Effects of Temperature, Strain, and Exposure Time on the Sensitivity of *Brachionus plicatilis*. *Environ. Toxicol. Water Qual.* 6:63-75.

- 3) 環境庁(2000): 平成11年度 生態影響試験実施事業報告