

[4] ニトログリセリン

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： ニトログリセリン

(別の呼称：硝酸グリセロール)

CAS 番号：55-63-0

化審法官報告示整理番号：2-1574

化管法政令番号：1-236

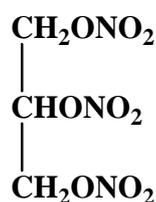
RTECS 番号：QX2100000

分子式：C₃H₅N₃O₉

分子量：227.09

換算係数：1 ppm = 9.29 mg/m³(気体、25°C)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質の常温では淡黄色の油状である¹⁾。衝撃と摩擦にきわめて敏感なため、その取扱には注意が必要である²⁾。

融点	13.5°C(安定型) ³⁾
沸点	218°C(爆発する) ³⁾
密度	1.5931g/cm ³ (20°C) ⁴⁾
蒸気圧	2.00×10 ⁻⁴ mmHg (=0.0267Pa) (20°C) ⁵⁾
分配係数(1-オクタノール/水)(log Kow)	1.62 ⁶⁾
解離定数 (pKa)	
水溶性	1.38×10 ³ mg/L(20°C) ⁵⁾

(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。

生物分解性

好氣的分解：活性汚泥を用いた振盪フラスコ法では、5 日間で 53.6%分解(30°C)⁷⁾。

化学的分解性：

OH ラジカルとの反応性 (大気中)

反応速度定数：1.1×10⁻¹²cm³/(分子・sec)(AOPWIN⁸⁾により計算)

半減期：4.9～49 日 (OH ラジカル濃度を 3×10⁶～3×10⁵ 分子/cm³ ⁹⁾ と仮定し、1 日は 12 時間として計算)

加水分解性

反応速度定数：0.0215 L/(分子・sec)(25°C、測定値)^{10,11)}

半減期：1.0～10年（pHを8～7と仮定して計算）
反応速度定数：0.00836 L/(分子・sec)(18°C、測定値) ¹⁰⁾
半減期：2.6～26年（pHを8～7と仮定して計算）
生物濃縮性
生物濃縮係数（BCF）：3.5（BCFWIN ¹²⁾ により計算）
土壌吸着性
土壌吸着係数（Koc）：130（PCKOCWIN ¹³⁾ により計算）

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の平成13年度における製造(出荷)及び輸入量は100～1,000t未満である¹⁴⁾。化学物質排出把握管理促進法（化管法）の製造・輸入量区分は100tである。

② 用途

本物質の主な用途、排出源はダイナマイトの基材、無煙火薬の主剤、医薬品とされている¹⁵⁾。液体のままニトログリセリンが工場外に出荷されることはほとんどなく、工場内でダイナマイトに加工される²⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

本物質は化学物質排出把握管理促進法第一種指定化学物質（政令番号：236）として指定されている。

2. 暴露評価

生態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水生生物の生息が可能な環境を保持すべき公共用水域における化学物質の暴露を評価することとし、データの信頼性を確認した上で安全側に立った評価の観点から原則として最大濃度により評価を行っている。

(1) 環境中への排出量

ニトログリセリンは化管法の第一種指定化学物質である。同法に基づき公表された、平成15年度の届出排出量¹⁾、届出外排出量対象業種²⁾、届出外排出量非対象業種・家庭・移動体³⁾から集計した排出量等を表2.1に示す。なお、届出外排出量対象業種・非対象業種・家庭・移動体の推計はなされていなかった。

表 2.1 化管法に基づく排出量及び移動量（PRTR データ）の集計結果（平成 15 年度）

	届出					届出外（国による推計）				総排出量（kg/年）			
	排出量（kg/年）				移動量（kg/年）	排出量（kg/年）				届出 排出量	届出外 排出量	合計	
	大気	公共用水域	土壌	埋立	下水道	廃棄物移動	対象業種	非対象業種	家庭				移動体
全排出・移動量	1,192	88	0	0	0	390	—	—	—	—	1,280	—	1,280

業種	大気	公共用水域	土壌	埋立	下水道	廃棄物移動	合計
化学工業	1,192 (100%)	88 (100%)	0	0	0	0	0
その他の製造業	0	0	0	0	0	390 (100%)	390

届出	届出外
100%	—

本物質の平成15年度における環境中への総排出量は、1.3tとなり、これらはすべて届出排出量であり、大気への排出が1.2t、水域への排出が0.088tであった。この他に廃棄物への移動量が0.39tであった。届出排出量の主な排出源は、化学工業（100%）であった。

(2) 媒体別分配割合の予測

本物質の環境中の媒体別分配割合を、表2.1に示した環境中への排出量と下水道への移動量を基に、USES3.0をベースに日本固有のパラメータを組み込んだMackay-Type Level III多媒体モデル⁴⁾を用いて予測した。予測の対象地域は、平成15年度環境中への推定排出量が最大であった大分県（大気への排出量0.68t）とした。予測結果を表2.2に示す。

本物質の環境中への排出は大気が大部分を占めていたが、環境中の媒体別分配割合は水域が66.4%、土壌が32.1%と予測された。

表 2.2 媒体別分配割合の予測結果

媒 体	分配割合（%）
大 気	0.5
水 域	66.4
土 壌	32.1
底 質	0.9

(注) 環境中で各媒体別に最終的に分配される割合を質量比として示したもの。

(3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の水質及び底質中の濃度について情報の収集を試みたが、信頼性が確認された調査例は得られなかった。

(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）

本物質について、実測データに基づき水生生物に対する暴露の推定を行うことはできなかった。

3. 生態リスクの初期評価

水生生物の生態リスクに関する初期評価を行った。

(1) 水生生物に対する毒性値の概要

本物質の水生生物に対する毒性値に関する知見を収集し、その信頼性を確認したものを生物群（藻類、甲殻類、魚類及びその他）ごとに整理すると表3.1のとおりとなった。

表 3.1 水生生物に対する毒性値の概要

生物種	急性	慢性	毒性値 [µg/L]	生物名	生物分類	エンドポイント /影響内容	暴露期間 [日]	信頼性			文献 No.
								a	b	c	
藻類	○		400	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO ^{*1}	4	○			1)-5963
	○		1,000	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO ^{*1}	4	○			1)-5963
	○		1,000	<i>Navicula pelliculosa</i>	珪藻類	EC ₅₀ GRO ^{*1}	4	○			1)-5963
	○		3,300	<i>Navicula pelliculosa</i>	珪藻類	EC ₅₀ GRO ^{*1}	4	○			1)-5963
甲殻類	○		32,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	LC ₅₀ MOR ^{*2}	2		○		1)-5963
	○		46,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM ^{*1}	2		○		1)-5963
魚類	○		1,670	<i>Lepomis macrochirus</i>	ブルーギル	LC ₅₀ MOR ^{*2}	4		○		1)-5963
	○		>1,870	<i>Lepomis macrochirus</i>	ブルーギル	LC ₅₀ MOR ^{*2}	1		○		1)-5963
	○		>1,870	<i>Ictalurus punctatus</i>	チャネルキャットフイッシュ	LC ₅₀ MOR ^{*2}	4		○		1)-5963
	○		>1,870	<i>Ictalurus punctatus</i>	チャネルキャットフイッシュ	LC ₅₀ MOR ^{*2}	1		○		1)-5963
	○		2,500	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッドミノー	LC ₅₀ MOR ^{*1}	4		○		1)-5963
	○		2,700	<i>Lepomis macrochirus</i>	ブルーギル	LC ₅₀ MOR ^{*1}	4		○		1)-5963
	○		2,800	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	ニジマス	LC ₅₀ MOR ^{*1}	4		○		1)-5963
	○		2,900	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	ニジマス	LC ₅₀ MOR ^{*1}	2		○		1)-5963
	○		3,000	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッドミノー	LC ₅₀ MOR ^{*2}	4		○		1)-5963
	○		3,200	<i>Ictalurus punctatus</i>	チャネルキャットフイッシュ	LC ₅₀ MOR ^{*1}	4		○		1)-5963
	○		4,100	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッドミノー	LC ₅₀ MOR ^{*1}	2		○		1)-5963
	○		4,300	<i>Lepomis macrochirus</i>	ブルーギル	LC ₅₀ MOR ^{*1}	2		○		1)-5963
	○		4,700	<i>Ictalurus punctatus</i>	チャネルキャットフイッシュ	LC ₅₀ MOR ^{*1}	2		○		1)-5963
	○		4,800	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	ニジマス	LC ₅₀ MOR ^{*1}	1		○		1)-5963

生物種	急性	慢性	毒性値 [μg/L]	生物名	生物分類	エンドポイント /影響内容	暴露期間 [日]	信頼性			文献 No.
								a	b	c	
	○		6,000 ~8,000	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッドミノー	LC ₅₀ MOR ^{*2}	1		○		1)-5963
	○		6,300	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッドミノー	LC ₅₀ MOR ^{*1}	1		○		1)-5963
	○		6,400	<i>Lepomis macrochirus</i>	ブルーギル	LC ₅₀ MOR ^{*1}	1		○		1)-5963
	○		6,500	<i>Ictalurus punctatus</i>	チャネルキャットフ イッシュ	LC ₅₀ MOR ^{*1}	1		○		1)-5963
その他	○		20,000	<i>Chironomus tentans</i>	ユスリカ属	LC ₅₀ MOR ^{*1}	2	○			1)-5963
	○		55,000	<i>Chironomus tentans</i>	ユスリカ属	EC ₅₀ IMM ^{*1}	2		○		1)-5963
	○		57,000	<i>Chironomus tentans</i>	ユスリカ属	LC ₅₀ MOR ^{*1}	1	○			1)-5963
	○		76,000	<i>Chironomus tentans</i>	ユスリカ属	EC ₅₀ IMM ^{*1}	1		○		1)-5963

毒性値 (太字) : PNEC 算出の際に参照した知見として本文で言及したもの

毒性値 (太字下線) : PNEC 算出の根拠として採用されたもの

信頼性: 本初期評価における信頼性ランク (a, b までを採用)

a : 毒性値は信頼できる、b : 毒性値はある程度信頼できる、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

影響内容

IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、GRO (Growth) : 生長 (植物)、成長 (動物)

*1 止水式で実施された試験

*2 流水式で実施された試験

信頼性が認められた知見のうち、生物群ごとに急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて最も小さい値を予測無影響濃度(PNEC)導出のために採用した。その知見の概要は以下のとおりである。

1) 藻類

Bentleyら¹⁾⁻⁵⁹⁶³は、米国EPAの試験方法(1971a)に準拠し、緑藻類*Pseudokirchneriella subcapitata* (旧*Selenastrum capricornutum*) の生長阻害試験を実施した。設定試験濃度は0、0.1、0.3、1.0、1.8、3.2、10.0mg/L (公比1.8) であった。設定濃度に基づく96時間半数影響濃度 (EC₅₀) は400μg/L であった。

2) 甲殻類

Bentleyら¹⁾⁻⁵⁹⁶³は、米国EPA の試験方法 (EPA, 660/3-75-009, 1975)に準拠し、オオミジンコ *Daphnia magna*の急性遊泳阻害試験を流水式で実施した。試験濃度は対照区のほかに6濃度区が設定された。設定濃度に基づく48時間の半数致死濃度 (LC₅₀) は32,000μg/Lであった。本試験は被験物質が実測されていないため、毒性値の信頼性は「b」とした。

3) 魚類

Bentleyら¹⁾⁻⁵⁹⁶³は、米国EPA の試験方法 (EPA, 660/3-75-009, 1975)に準拠し、ブルーギル

*Lepomis macrochirus*の急性毒性試験を流水式で実施した。試験濃度区は対照区のほかに7濃度区が設定された。設定濃度に基づく96時間の半数致死濃度（LC₅₀）は1,670μg/Lであった。本試験は被験物質が実測されていないため、毒性値の信頼性は「b」とした。

(2) 予測無影響濃度（PNEC）の設定

急性毒性及び慢性毒性のそれぞれについて、上記本文で示した毒性値に情報量に応じたアセスメント係数を適用し、予測無影響濃度（PNEC）を求めた。

急性毒性値

藻類	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	生長阻害；96時間 EC ₅₀	400 μg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	48時間 LC ₅₀	32,000 μg/L
魚類	<i>Lepomis macrochirus</i>	96時間 LC ₅₀	1,670 μg/L

アセスメント係数：100 [3生物群(藻類、甲殻類及び魚類)について信頼できる知見が得られたため]

3つの毒性値のうち最も小さい値（藻類の400 μg/L）をアセスメント係数100で除することにより、急性毒性値に基づくPNEC値4 μg/Lが得られた。

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ため、本物質のPNECとしては、藻類の急性毒性値から得られた4 μg/Lを採用する。

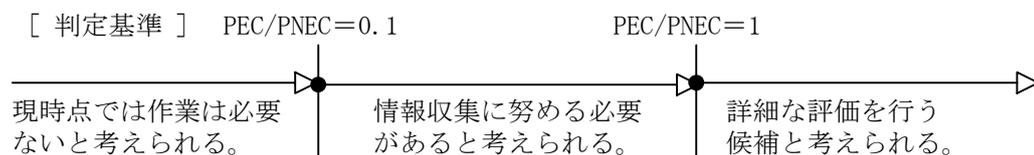
(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

水質	平均濃度	最大濃度（PEC）	PNEC	PEC/ PNEC 比
公共用水域・淡水	データは得られなかった	データは得られなかった	4 μg/L	—
公共用水域・海水	データは得られなかった	データは得られなかった		—

注)：1) 環境中濃度での（ ）内の数値は測定年を示す。

2) 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。



現時点では環境中濃度に関するデータが得られなかったため、生態リスクの判定はできない。本物質の平成13年度における製造(出荷)及び輸入量は100～1,000t未満の範囲であり、平成15年度PRTRデータによれば公共用水域への届出排出量は0.09tであった。水域への分配割合は66%と予測され、PNEC値は4 μg/Lであった。したがって、生産量及び環境排出量の推移を把握しつつ、環境中濃度の把握の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) 東京化学同人 (1989) : 化学大辞典 : 1685.
- 2) 化学工業日報社(2005) : 14705 の化学商品
- 3) O'Neil, M.J. ed. (2001): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, N.J.: Merck and Co., Inc. (CD-ROM).
- 4) Lide, D.R. ed. (2002-2003): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 83rd ed., Boca Raton, London, New York, Washington D.C., CRC Press: 3-279.
- 5) Howard, P.H., and Meylan, W.M., ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 16.
- 6) Hansch, C., Leo, A., and Hoekman, D. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington D.C., ACS Professional Reference Book: 6.
- 7) Wendt, T.M., Cornell J.H., and Kaplan A.M. (1978): Microbial Degradation of Glycerol Nitrates. Appl. Environ. Microbiol., 36(5): 693-699.
- 8) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1. 91.
- 9) Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., and Michalenko, E.M. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xiv.
- 10) Cappellos, C. et al; Int J Chem Kinet 16: 1027-51 (1984): (Hazardous Substances Data Bank <http://toxnet.nlm.nih.gov/>, 2005.5.12 現在)
- 11) Ellington, J.J.; Hydrolysis Rate Constants for Enhancing Property-Reactivity Relationships: USEPA/600/3-89/063, NTIS PB89-220479 (1989): 45
- 12) U.S. Environmental Protection Agency, BCFWIN™ v.2.15.
- 13) U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWIN™ v.1.66.
- 14) 経済産業省(2003) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成 13 年度実績) の確報値
- 15) 環境省(2005) : PRTR データを読み解くための市民ガイドブック 化学物質による環境リスクを減らすために 平成 15 年度集計結果から

(2) 暴露評価

- 1) 経済産業省製造産業局化学物質管理課、環境省環境保健部環境安全課(2005) : 平成 15 年度特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律 (化学物質排出把握管理促進法) 第 11 条に基づき開示する個別事業所データ
- 2) 経済産業省製造産業局化学物質管理課、環境省環境保健部環境安全課(2005) : 平成 15 年度 PRTR 届出外排出量の推計方法等の詳細 資料 1
(<http://www.env.go.jp/chemi/prtr/result/todokedegaiH15/syosai/1susogiri-1.pdf>)
- 3) 製品評価技術基盤機構 : 届出外排出量の推計値の対象化学物質別集計結果 算出事項 (対象業種・非対象業種・家庭・移動体) 別の集計 表 3-2 都道府県別
(<http://www.prtr.nite.go.jp/prtr/csv/2003a/2003a3-2.csv>)

4) (独)国立環境研究所(2004) : 平成 15 年度新規化学物質挙動追跡調査報告書

(3) 生態リスクの初期評価

1)- : U.S.EPA 「AQUIRE」

5963 : Bentley, R.E., J.W. Dean, S.J. Ells, G.A. LeBlanc, S. Sauter, K.S. Buxton, and B.H. Sleight Iii
(1978): Laboratory Evaluation of the Toxicity of Nitroglycerine to Aquatic Organisms.
U.S.Army Medical Res.Develop.Command, Washington, D.C.:82 p.(U.S.NTIS AD-A061739)