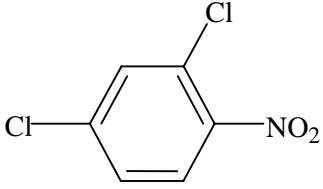


既存化学物質安全性(ハザード)評価シート

整理番号	99 - 27	官報公示 整理番号	3 - 455	CAS 番号	611 - 06 - 3
名 称	2,4-ジクロロ-1-ニトロベンゼン		構 造 式		
分子式	C ₆ H ₃ Cl ₂ NO ₂		分子 量	192.00	
<p>市場で流通している商品(代表例)¹⁾</p> <p>純 度 : 92 ~ 94%</p> <p>不純物 : 1,3-ジクロロ-2-ニトロベンゼン、1,4-ジクロロ-2-ニトロベンゼン、 2,4-ジクロロ-1,5-ジニトロベンゼン</p> <p>添加剤又は安定剤: 無添加</p>					
<p>1. 物理・化学的性状データ</p> <p>外 観: 黄色固体²⁾</p> <p>融 点: 30³⁾</p> <p>沸 点: 258.5^{2, 3, 4, 5)}</p> <p>引 火 点: 112^{2, 6)}</p> <p>発 火 点: 500⁷⁾</p> <p>爆発限界: 文献なし</p> <p>比 重: d₄⁷⁸ 1.551⁶⁾</p> <p>蒸気密度: 6.62(空気 = 1)</p> <p>蒸 気 圧: 1 Pa(7.50 × 10⁻³ mmHg)(20³⁾)³⁾</p> <p>分配係数: log Pow ; 3.09(実測値)、3.11(計算値)⁸⁾</p> <p>加水分解性: 加水分解を受けやすい化学結合なし</p> <p>解離定数: 文献なし</p> <p>スペクトル: 主要マススペクトルフラグメント m/z 74(基準ピーク, 1.0)、109(0.84)、133(0.78)</p> <p>吸脱着性: 土壌吸着係数 K_{oc} = 760⁴⁾</p> <p>粒度分布: 文献なし</p> <p>溶解性: 2,4-ジクロロ-1-ニトロベンゼン/水 ; 0.188 g/l (20^{3, 7)})^{3, 7)} エタノールなどの有機溶媒に可溶⁶⁾。</p> <p>換算係数: 該当せず</p>					

2. 発生源・暴露レベル

製造量等：平成8年度 1,678 t (製造 1,316 t 輸入 362 t)⁹⁾
(ジクロロニトロベンゼンとして)

放出・暴露量：文献なし

用途：主な用途としては医薬品原料(鎮痛解熱剤)、その他用途としては除草剤原料、染料・顔料中間体及び写真薬原料¹⁾。

3. 環境運命

1) 分解性

好氣的

難分解¹⁰⁾(化審法)

試験期間	被験物質	活性汚泥
4 週間	100 mg/ℓ	30 mg/ℓ
BOD から算出した分解度		
0%		

嫌氣的

報告なし。

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 = $1.2 \times 10^{-13} \text{ cm}^3/\text{分子} \cdot \text{sec}$ (25)⁴⁾、OH ラジカル濃度を $5 \times 10^5 \sim 1 \times 10^6 \text{ 分子}/\text{cm}^3$ とした時の半減期は 65 ~ 130 日と計算される。

2) 濃縮性

低濃縮¹⁰⁾(化審法)

脂質含量	試験期間	
-	6 週間	
	試験濃度	濃縮倍率
第1区	0.05 mg/ℓ	29 ~ 65
第2区	0.005 mg/ℓ	18 ~ 48

藻類への濃縮倍率：150(*Chlorella fusca*、試験濃度：0.05 mg/ℓ、暴露期間：24 時間)³⁾

3) 環境分布・モニタリングデータ¹¹⁾

実施年度 (昭)	検出例と検出範囲			
	水質 ppb	底質 ppb	魚類 ppm	その他 ppb
	B/A 検出範囲 (検出限界)	B/A 検出範囲 (検出限界)	B/A 検出範囲 (検出限界)	B/A 検出範囲 (検出限界)
56	0/21 - (0.02)	0/21 - (1)	調査データなし	調査データなし
(平) 6	0/27 - (0.06)	0/27 - (8.5)	0/27 - (0.003)	大気 0/27 - (14)

B/A は検出数 / 検体数を表す。

4. 生態毒性データ

分類	生物名	LC ₅₀ (mg/ℓ) (暴露時間)	EC ₅₀ (mg/ℓ) (暴露時間) : 影響指標	OECD 分類基準(案) ¹²⁾
藻類	<i>Chlorella Pyrenoidosa</i> ^{3,13)} (クロレラ)	/	2.4(96-h) : 増殖阻害	(toxic)
甲殻類	<i>Daphnia magna</i> ^{3,13)} (オオミジンコ)	/	4.2(48-h) : 遊泳阻害	toxic
魚類	<i>Brachydanio rerio</i> ³⁾ (ゼブラフィッシュ)	7.1(96-h)	/	toxic

()内分類 : OECD の分類基準値が適用できると仮定した時の分類

5. ほ乳動物毒性データ

1) 急性毒性^{3,7)}

	マウス	ラット
経口 LD ₅₀	790 mg/kg	379-1,920 mg/kg
吸入 LC ₅₀	-	-
経皮 LD ₅₀	-	921 mg/kg

ラットに単回投与した実験(投与経路、用量不明)で、被毛粗剛、腹臥位、横臥位、尿量増加、昏睡がみられている⁷⁾。

ラットに 500-2,000 mg/kg を経皮投与した実験で、自発運動低下、うずくまり、大腿部の筋緊張、よろめき、めまい、蒼白、正向反射の低下、呼吸数減少、閉瞼、被毛粗剛、下痢、腹臥位、横臥位がみられている。死亡動物では、肝臓、脾臓、肺の退色、腹腔内の血性腹水がみられている⁷⁾。

2) 刺激性・腐食性

ウサギの皮膚に 500 mg を半閉塞で 4 時間適用した実験で軽度の刺激性を示し、ウサギの眼に 100 mg を適用した実験では刺激性を示さない^{3, 7)}。

3) 感作性

モルモットを用いたマキシマイゼーション法で感作性を示すことが報告されている^{3, 7)}が、マウスを用いた local lymph node assay では陰性と報告されている⁷⁾。

4) 反復投与毒性

報告なし。

5) 変異原性・遺伝毒性

試験方法		試験条件	結果*
<i>in vitro</i>	復帰突然変異試験	ネズミチフス菌 TA98、TA100、TA1535、TA1537、TA1538、S9(-)、51.2-6,553.6 µg/plate (TA100 の S9(-)のみ陽性) ^{3, 7)}	+
		ネズミチフス菌 TA98、TA100、TA1535、TA1537、TA1538、S9(+/-)、3-215 µg/plate (TA98、TA100 の S9(+))のみ陽性) ^{3, 7, 14)}	+
		ネズミチフス菌 TA98、TA100、S9(+/-)、100-1,000 µg/plate (TA100 の S9(+/-)のみ陽性) ^{3, 7, 14)}	+
		ネズミチフス菌 TA98、TA100 ⁴⁾	+
	突然変異試験	チャイニーズハムスター-V79 細胞、S9(+/-)、75-250 µg/ml ³⁾	-
	突然変異試験	チャイニーズハムスター-V79 細胞、S9(+/-)、10-200 µg/ml ³⁾	-
<i>in vivo</i>	伴性劣性致死試験	ショウジョウバエ、経口投与 20、30 ppm 又は注射 30 ppm ³⁾	-

* - : 陰性 + : 陽性

6) 発がん性

報告なし。

7) 生殖・発生毒性

報告なし。

6. ヒトへの影響

1) 急性影響

報告なし。

2) 慢性影響

報告なし。

3) 発がん性^{15, 16, 17)}

機 関	分 類	基 準
EPA(1999年)	-	1999年現在発がん性について評価されていない。
EU(1998年)	-	1999年現在発がん性について評価されていない。
NTP(1998年)	/	1999年現在発がん性について評価されていない。
IARC(1999年)	-	1999年現在発がん性について評価されていない。
ACGIH(1998年)	-	1999年現在発がん性について評価されていない。
日本産業衛生学会(1999年)	-	1999年現在発がん性について評価されていない。

ヒトでの発がんに関する報告はない。

4) 許容濃度^{16, 17)}

機関名	許容濃度	経皮吸収性
ACGIH(1998年)	記載なし	-
日本産業衛生学会(1999年)	記載なし	-

7. 生体内運命

マウスの腹部に放射標識した本物質 2.5 mg を閉塞適用した実験では、その吸収率は、3、15 及び 72 時間後で、それぞれ 7%、41% 及び 71% である⁷⁾。適用 3 時間後の放射活性は毛包及び表皮に局在している⁷⁾。本物質は尿中に迅速に排泄されるが、一部は肝臓への蓄積がみられている⁷⁾。

ラットに ¹⁴C 標識した本物質 1 mg/kg を単回経口投与した実験では、5 日後に体内で検出された放射活性は投与量の 0.9% である^{3, 7)}。

ウサギに本物質 200、300 及び 400 mg/kg を単回経口投与した実験では、投与量の 0.3% が糞中に排泄されている^{3, 7)}。尿中に本物質の未変化体は検出されず、53-84% がメルカプツール酸誘導体、5-22% がグルクロニド、5-6% がエーテル硫酸塩及び 6-8% がジクロロアニリンとして尿中に排泄されている。メルカプツール酸誘導体の大部分は *N*-アセチル-*S*-(5-クロロ-2-ニトロフェニル)-*L*-システインであり、他に 2, 4-ジクロロ-5-ニトロフェノール、3, 5-ジクロロ-2-ニトロフェノール、2-アミノ-3, 5-ジクロロフェノール、5-アミノ-2, 4-ジクロロフェノール及び 2, 4-ジクロロアニリンがみられている^{3, 7)}。

8. 分類(OECD 分類基準・案¹²⁾)

- 1) ほ乳動物に対する急性毒性は、経口投与ではマウス、ラットでクラス 4、経皮投与ではラットでクラス 3 に分類される。
- 2) 水圏環境生物に対する急性毒性は、藻類、甲殻類及び魚類のいずれに対しても toxic に分類又は該当する。

9. 総合評価

1) 危険有害性の要約

本物質によるヒトへの影響についての報告はない。実験動物ではモルモットを用いたマキシマイゼーション法では感作性を示すことも報告されている。慢性影響についての報告はなく、発がん性についても評価されていない。実験動物での反復投与試験、発がん性試験及び生殖・発生毒性についての報告もない。変異原性・遺伝毒性については、復帰突然変異試験で陽性であるが、それ以外は陰性である。

本物質は環境中に放出された場合、大気中での OH ラジカルとの反応による半減期は数ヵ月以内と計算される。水圏では生分解されにくい。環境庁のモニタリングデータでは環境中から検出されたことはない。水圏環境生物に対する急性毒性は強い。

2) 指摘事項

- (1) 復帰突然変異試験で陽性である。

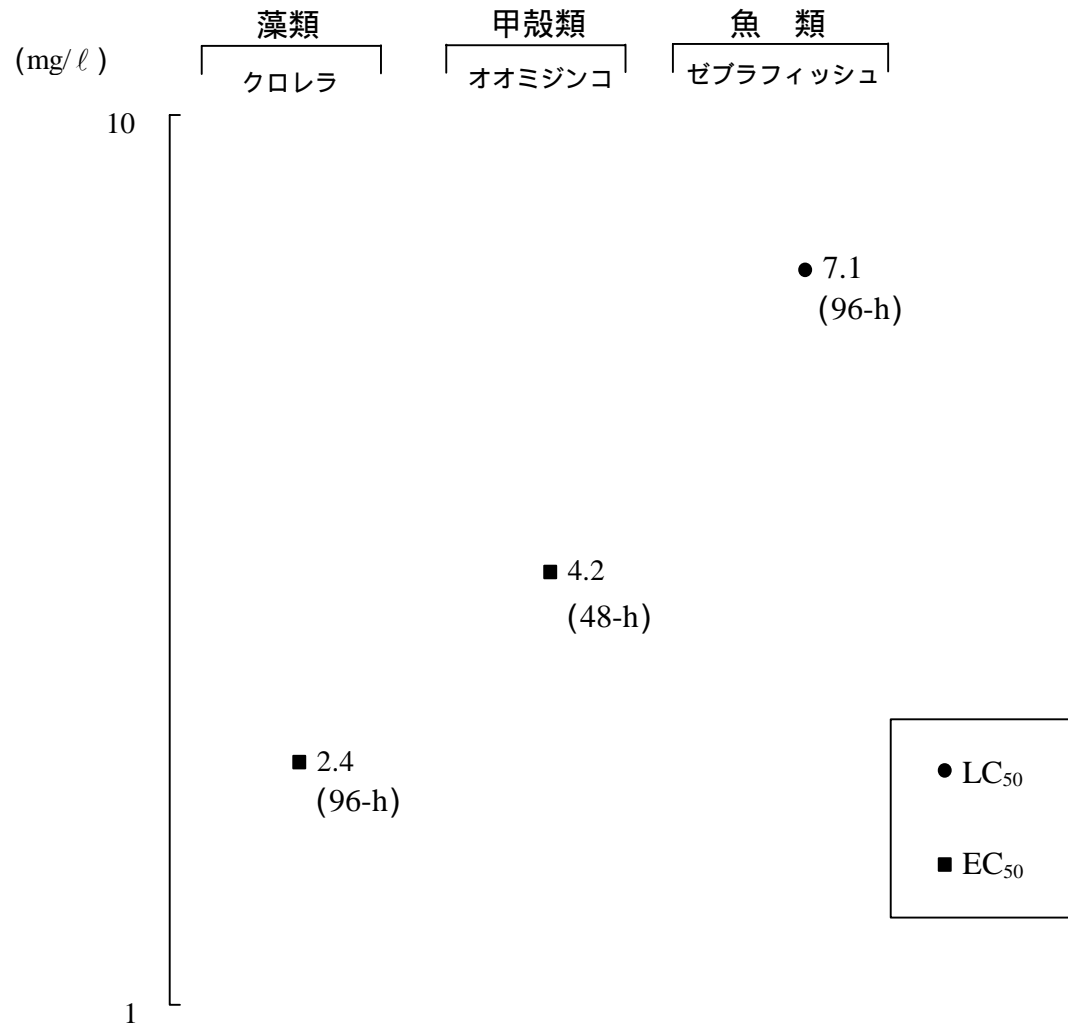
参考資料

- 1) (社)日本化学工業協会調査資料(2000).
- 2) IPCS, International Chemical Safety Cards(1993).
- 3) IUCLID(International Uniform Chemical Information Data Base) Data Sheet, EU(1995).
- 4) Hazardous Substances Data Bank(HSDB), U.S.National Library Medicine(1998).
- 5) 化学辞典, 東京化学同人(1994).
- 6) Richardson, M.L. et.al., The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry(1992-1995).
- 7) BUA Report, 64(1991).
- 8) 分配係数計算用プログラム“C Log P”, アダムネット(株).
- 9) 平成8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.
- 10) 化学品検査協会, 化審法の既存化学物質安全性点検データ(1985).
- 11) 環境庁環境保健部環境安全課監修, 化学物質と環境(1999).
- 12) OECD, Proposal for a Harmonized Classification System based on Acute Toxicity(1996).
- 13) AQUIRE(US EPA, ECOTOX Database System).
- 14) Registry of Toxic Effects of Chemical Substances(RTECS), US NIOSH(1998).
- 15) JETOC, 発がん性物質の分類とその基準, 発がん性評価物質一覧表, 第4版(1999).
- 16) ACGIH, Booklet of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices(1996).
- 17) 許容濃度等の勧告, 産業衛生学雑誌, 41, 96-158(1999).

別添資料

- 1) 生態毒性図

生態毒性図



引用文献

- 1) IUCLID (International Uniform Chemical Information Data Base) Data Sheet, EU (1995).
- 2) AQUIRE (US EPA, ECOTOX Database system).