既存化学物質安全性(ハザード)評価シート(要約版)

整	理番号	96 - 40	官報公示 整理番号	3	3 - 436	CAS 番号	98 - 95 - 3
名	称	別名:二	ロベンゼン トロベンゾール rbane oil	,	構 造 式		NO ₂
分	子 式		$C_6H_5NO_2$		分子量		123.11

市場で流通している商品(代表例)1)

: 99 %以上 純 度

不純物 添加剤又は安定剤: -

物理・化学的性状データ

外 観:黄色液体2)

点:6 ²⁾、5.7 ²⁾ 融

沸 点:211 ²⁾

引 火 点:87.8 3)

発 火 点:482 3)

爆発限界:1.8-40%3)

比 重:d₄¹⁵1.205⁴⁾

蒸 気 密 度: 4.25(空気 = 1)⁴⁾

蒸 気 圧: 0.02 kPa(0.15 mmHg)(20)、0.05 kPa(0.35 mmHg)(30)、

 $0.13 \text{ kPa} (1 \text{ mmHg}) (44.4), 1.33 \text{ kPa} (10 \text{ mmHg}) (84.9)^{5}$

分配係数: log Pow; 1.85(実測値)⁶⁾、1.88(計算値)⁶⁾

加水分解性:該当せず 解離定数:解離基なし

スペクトル:主要マススペクトルフラグメント

m/z 77(基準ピーク, 1.0)、123(0.42)、93(0.09)、51(0.59)、65(0.14)、

30(0.15) ⁵⁾

吸 脱 着 性: 土壌吸着係数 $Koc = 170^{7}$ 、 210^{7} 、 370^{7} 、 67^{-8}

粒 度 分 布:該当せず

溶 解 性:ニトロベンゼン / 水; $1.9 \text{ mg}/\ell$ (20)⁸⁾、 $8.0 \text{ mg}/\ell$ (80)⁸⁾

アルコール、エーテル、ベンゼンなどの溶媒と自由に混和。

換算係数:1 ppm = 5.12 mg/m^3

(気体, 20) $1 \text{ mg/m}^3 = 0.195 \text{ ppm}$

総合評価

1) 危険有害性の要約

ニトロベンゼンのヒトへの影響として、急性的には頭痛、めまい、悪心、意識喪失、昏睡、瞳孔反応消失などの症状が、亜急性・慢性的には急性より軽度であるものの同様の臨床症状のほか、抑うつ症状や興奮症状などの中枢神経系障害を疑わせる症状や顕著なチアノーゼがみられている。ほとんどの影響がメトヘモグロビン形成に起因した変化であり、実験動物でも肝臓、腎臓、脾臓、精巣への影響のほか、メトヘモグロビン血症、溶血性貧血が報告されている。

変異原性試験では in vitro のハムスター胚細胞を用いる突然変異試験と in vivo のショウジョウバエを用いる伴性劣性致死試験で陽性であり、実験動物における発がん性試験ではマウスの雄で細気管支/肺胞上皮腺腫及び癌、甲状腺の濾胞細胞腺腫、雌で肝細胞腺腫及び乳腺の腺癌、ラットの雄で肝細胞腺腫及び癌、甲状腺の濾胞細胞腺腫及び癌、雌で子宮内膜ポリープの発生率増加の報告がある。ヒトでの暴露と発がんの関連性を示唆するデータはないが、動物実験の結果からヒトでも発がん性を示す可能性はあると考えられ、IARCではグループ 2B に分類されている。

生殖試験では胎児毒性、奇形等はみられないものの精巣、精巣上体への影響が報告されている。

本物質は環境中に放出された場合、物理化学的性状から考えて広範囲に分布するものと予想される。水中に直接放出された場合、微生物によっては分解されにくく残留することが予想されるが、生物への蓄積性は低い。また、表層水中での直接光分解による半減期は 133 日との報告もある。大気中での本物質の半減期は $57 \sim 107$ 日と計算され、主な分解機構は OH ラジカルとの反応である。また、大気中での直接光分解により o-、p-ニトロフェノールが生成するとの報告もある。環境庁のモニタリングでは水質、底質、魚類、大気中に検出例がある。水圏環境生物に対しては、OECD の有害性分類基準(案)では藻類に対しては harmful に該当し、甲殻類に対しては toxic、魚類に対しては harmful に分類される。

2) 指摘事項

- (1) マウス、ラットで癌発生率増加の報告があり、ヒトに対して発がん性を示す可能性があると考えられている。
- (2) ヒト、実験動物において主にメトヘモグロビン血症に起因した影響が認められている。
- (3) 生殖試験で雄生殖器への影響がみられている。

参考資料

- 1) (社)日本化学工業協会調査資料(1996).
- 2) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(1983).
- 3) 化学物質安全情報研究会編, 化学物質安全性データブック, オーム社(1995).
- 4) 化学辞典, 東京化学同人(1994).
- 5) NIST Library of 54K Compounds.
- 6) 分配係数計算用プログラム " C Log P ", アダムネット(株).
- 7) Loekke, H., Ecotoxicol. Environ. Saf., **8**, 395-409 (1984).
- 8) Roy, W.R., Griffin, R.A., Environ. Geol. Water Sci., 7, 241-247. (1985).