

## 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	99 - 8	官報公示 整理番号	3 - 437	CAS 番号	99 - 99 - 0
名 称	4-ニトロトルエン 別名： <i>p</i> -ニトロトルエン 1-メチル-4-ニトロ ベンゼン		構 造 式		
分子式	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> N		分子 量	137.14	
市場で流通している商品(代表例) <sup>1)</sup> 純 度 : 99%以上 不純物 : 水分 添加剤又は安定剤: 無添加					
2-ニトロトルエンについては、個別評価シートがある。					
物理・化学的性状データ 外 観: 無色もしくは黄色固体 <sup>2, 3)</sup> 融 点: 51.6-52.1 <sup>4)</sup> 沸 点: 237.7 <sup>4)</sup> 引 火 点: 106 (c.c.) <sup>5)</sup> 発 火 点: 文献なし 爆発限界: 文献なし 比 重: d <sub>4</sub> <sup>25</sup> 1.1226 <sup>4)</sup> 蒸気密度: 4.73(空気 = 1) 蒸 気 圧: 13.3 Pa(0.1 mmHg)(20 ) <sup>2)</sup> 分配係数: log Pow ; 2.37(実測値) <sup>6)</sup> 、2.38(計算値) <sup>6)</sup> 加水分解性: 加水分解を受けやすい化学結合なし 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 91(基準ピーク, 1.0)、137(0.66)、65(0.56)、107(0.21) <sup>7)</sup> 吸 脱 着 性: 土壌吸着係数 Koc = 153、464 <sup>8)</sup> 粒 度 分 布: 文献なし 溶 解 性: 4-ニトロトルエン/水 ; 442 mg/ℓ (30 ) <sup>2)</sup> アルコール、エーテル、ベンゼンなどの有機溶媒に混和。 換 算 係 数: 1 ppm = 5.70 mg/m <sup>3</sup> (気体, 20 ) 1 mg/m <sup>3</sup> = 0.175 ppm					

## 総合評価

### 1) 危険有害性の要約

ヒトではメトヘモグロビン血症がみられている。実験動物においてもメトヘモグロビン血症が発生し、さらに肝臓、腎臓、脾臓、精巣に変化が認められている。変異原性・遺伝毒性では *in vitro* 試験で陽性の結果が報告されている。ヒトでの発がん性については報告がなく、実験動物では発がん性は認められていない。生殖・発生毒性ではラットで精巣及び精子への影響と性周期の延長及び消失がみられている。なお、2-ニトロトルエンにおいても同様の毒性症状が報告されている。

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 20 日以内と計算される。水圏では生分解されにくい、生物への蓄積性は低い。水中での直接光分解による半減期は数時間と計算される。環境庁のモニタリングデータでは水質及び底質から検出されたことがある。水圏環境生物に対する急性毒性は甲殻類で強い。

### 2) 指摘事項

- (1) ヒトではメトヘモグロビン血症がみられている。
- (2) 実験動物で精巣及び精子、性周期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(1999).
- 2) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd. Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(1996).
- 3) IPCS, International Chemical Safety Cards(1992).
- 4) 有機合成化学協会編, 有機化学物辞典, 講談社(1985).
- 5) Richardson, M.L. et.al., The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry(1992-1995).
- 6) 分配係数計算用プログラム“C Log P”, アダムネット(株).
- 7) NIST Library of 54K Compounds.
- 8) Hazardous Substances Data Bank(HSDB), U.S. National Library of Medicine(1998).