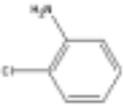


[20] o-クロロアニリン

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： o-クロロアニリン (別の呼称：2-クロロアニリン、2-クロロベンゼンアミン)
CAS 番号：95-51-2
分子式：C ₆ H ₆ ClN
分子量：127.6
構造式： 

(2) 物理化学的性状

本物質は無色の液体である¹⁾。

融点	-14 ²⁾
沸点	208.84 (99.61mol%) ³⁾
比重	1.2114(22/4) ³⁾
蒸気圧	0.17mmHg(20) ⁴⁾
換算係数	1ppm=5.30mg/m ³ (気体、20) ⁵⁾
n-オクタノール/水分配係数 (log Pow)	1.90 ⁶⁾
加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合なし ⁵⁾
解離定数	pKa=2.661(25) ⁷⁾
水溶性	8,165mg/L(25) ⁸⁾

(3) 環境運命に関する基本的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

<p>分解性</p> <p>好氣的：難分解⁹⁾。OECD テストガイドライン 302B 試験(本質分解性試験)により 28 日間で 94% 分解されたとの報告がある(試験濃度：700mg/L)¹⁰⁾</p> <p>嫌氣的：報告なし⁵⁾</p> <p>非生物的：</p> <p>(OH ラジカルとの反応性)：対流圏大気中では、速度定数 3.1×10^{-11} cm³/分子・sec で、OH ラジカル濃度を $5 \times 10^5 \sim 1 \times 10^6$ 分子/cm³ とした時の半減期は 6 ~ 12 時間と計算される⁵⁾。</p> <p>(直接光分解)：石英管に入れた水溶液に波長 300nm 以上の光を照射した場合の半減期は 11.5 時間である¹¹⁾。</p> <p>BOD から算出した分解度：</p> <p>2.7% (試験期間：2 週間、被験物質：100mg/L、活性汚泥：30mg/L)⁹⁾</p> <p>生物濃縮係数 (BCF)：5.4 ~ 9.0(試験期間：8 週間、試験濃度：0.1mg/L)、<14 ~ 32(試験期間：8 週間、試験濃度：0.01mg/L)⁹⁾</p>

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の平成 12 年における国内生産量は 500t(推定)であり、輸出入量の記載がないことから¹⁾、推定される国内流通量は 500t である。また、OECD に報告している生産量は 1,000～10,000t、PRTR 法の製造・輸入量区分は 1,000～10,000t の範囲である。

用途

本物質の主な用途は、ファーストイエローG ベースとして知られている¹⁾。ナフトール AB-BT、ASS などの中間体、3-ヒドロキシジフェニレンオキシドの出発原料、医薬、農薬中間原料、樹脂架橋剤である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

o-クロロアニリ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 o-クロロアニリンの各媒体間の分布予測結果

		分布量 (%)
大	気	0.09
水	質	36.1
土	壌	11.1
底	質	52.8

(2) 各媒体中の存在量の概要

o-クロロアニリ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。各媒体ごとにデータの信頼性が確認された調査例のうち、より広範囲の地域で調査が実施されたものを抽出した結果を表 2.2 に示す。

表 2.2 o-クロロアニリンの水質、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 $\mu\text{g/L}$	<0.09	<0.09			0.09	0/22	全国	1998	2
公共用水域・海水 $\mu\text{g/L}$	<0.09	<0.09			0.09	0/30	全国	1998	2
底質(公共用水域・淡水) $\mu\text{g/g}$	<5	<5	<5	38	5	4/21	全国	1998	2
底質(公共用水域・海水) $\mu\text{g/g}$	<5	<5	<5	18	5	1/25	全国	1998	2

注 1)過去に最大値で 0.53 $\mu\text{g/L}$ の測定値が報告されている(1990)³⁾

(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)

o-クロロアニリ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。水質について安全側の評価値として予測環境中濃度(PEC)を設定すると、公共用水域の淡水域では 0.09 $\mu\text{g/L}$ 未満、同海水域でも同様に 0.09 $\mu\text{g/L}$ 未満となった。

表 2.3 水質中の o-クロロアニリンの濃度

媒体	平均濃度	最大値等濃度
	水質	
公共用水域・淡水	0.09 $\mu\text{g/L}$ 未満 (1998)	0.09 $\mu\text{g/L}$ 未満(1998)
公共用水域・海水	0.09 $\mu\text{g/L}$ 未満 (1998)	0.09 $\mu\text{g/L}$ 未満(1998)

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 [$\mu\text{g/L}$]	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			3,200	<i>Selenastrum capricornutum</i>	NOEC BMS	3				環境省
			12,700	<i>Selenastrum capricornutum</i>	EC ₅₀ BMS	3				環境省
			32,000	<i>Selenastrum capricornutum</i>	NOEC GRO	3				環境省
			54,400	<i>Selenastrum capricornutum</i>	EC ₅₀ GRO	3				環境省
			35,000	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	EC ₅₀ POP	4				2997
甲殻類			32	<i>Daphnia magna</i>	NOEC REP	21				環境省
			32	<i>Daphnia magna</i>	NOEC REP	21				847
			460	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	2				6629

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	
			1,500	<i>Daphnia magna</i>	LC ₅₀ MOR	2				6629
			1,800	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	2				846
			1,990	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	2				環境省
			6,000	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	1				847
魚類			1,660	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	NR MOR	17.3 時間			○	789
			5,200	<i>Brachydanio rerio</i>	LC ₅₀ MOR	4				5436
			5,650	<i>Pimephales promelas</i>	LC ₅₀ MOR	4				15031
			7,340	<i>Oryzias latipes</i>	LC ₅₀ MOR	4				環境省
その他			200,000	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	EC ₅₀ GRO	1				11258

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、GRO (Growth) : 生長 (植物)、成長 (動物)、IMM (Immobilization) : 遊泳障害、MOR (Mortality) : 死亡、POP (Population Changes): 個体群の変化、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* に対する生長障害の 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 12,700 μg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する遊泳障害の 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 1,800 μg/L、魚類では *Brachydanio rerio* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 5,200 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) 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もっとも小さい値 (甲殻類の 1,800 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 18 μg/L が得られた。

慢性毒性値については、藻類では *Selenastrum capricornutum* に対する生長障害の 72 時間無影響濃度 (NOEC) が 3,200 μg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する繁殖障害の 21 日間無影響濃度 (NOEC) が 32 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もっとも小さい値 (甲殻類の 32 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 0.32 μg/L が得られた。

本物質の PNEC としては、甲殻類の慢性毒性値をアセスメント係数 100 で除した 0.32 μg/L を採用する。

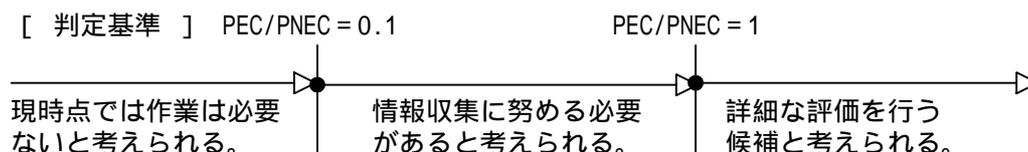
(3) 生態リスクの初期評価結果

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	0.09 μ g/L未満 (1998)	0.09 μ g/L未満(1998)	0.32	<0.28
	公共用水域・海水域	0.09 μ g/L未満 (1998)	0.09 μ g/L未満 (1998)	μ g/L	<0.28

注) : 1) 環境中濃度での()内の数値は測点年を示す。

2) 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。



本物質の公共用水域における濃度は、平均濃度でみると淡水域・海水域共に 0.09 μ g/L 未満であり、検出下限値未満であった。安全側の評価値として設定された予測環境中濃度 (PEC) は、淡水域・海水域共に 0.09 μ g/L 未満であった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域・海水域共に 0.28 未満となるため、現時点では生態リスクの判定はできない。本物質は、OECD に報告されている生産量が 1,000 ~ 10,000t の範囲で多く、約 36% が水質中に分配されると予測されており、PNEC 値は 0.32 μ g/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) Lide, D.R. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 75th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 1994-1995.,p. 3-21. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 3) Budavari, S. (ed.). The Merck Index - Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals. Rahway, NJ: Merck and Co., Inc., 1989. 327. [HSDB]
- 4) PIACENTE V ET AL; J CHEM ENG DATA 30: 372-6 (1985). [HSDB]
- 5) 財団法人化学物質評価研究機構(2000) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート
- 6) Hansch, C. and A. Leo. The Log P Database. Claremont, CA: Pomona College, 1987. 201. [HSDB]
- 7) Perrin DD; Dissociation Constants of Organic Bases in Aqueous Solution, Suppl 1972 Butterworth London: IUPAC Chemical Data Series no. 4313 (1972). [HSDB]
- 8) Huyskens P et al; Bull Soc Chim Belg 84: 253-62 (1975). [HSDB]
- 9) 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).
- 10) IUCLID(International Uniform Chemical Information Data Base) Data Sheet, EU(1995). [財団法人化学物質評価研究機構(2000) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート]

11) Kondo M; Simulation Studies of Degradation of Chemicals in the Environment, Tokyo, Japan: Office of Health Studies Environ Agency (1978). [HSDB]

(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:平成11年版化学物質と環境
- 3:環境庁保健調査室:平成3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)
 - 789: Bradbury, S.P., T.R. Henry, G.J. Niemi, R.W. Carlson, and V.M. Snarski (1989): Use of Respiratory-Cardiovascular Responses of Rainbow Trout (*Salmo gairdneri*) in Identifying Acute Toxicity Syndromes in Fish: Part 3. Polar Narcotics. Environ.Toxicol.Chem. 8(3):247-261.
 - 846: Kuhn, R., M. Pattard, K. Pernak, and A. Winter (1989): Results of the Harmful Effects of Selected Water Pollutants (Anilines, Phenols, Aliphatic Compounds) to *Daphnia magna*. Water Res. 23(4):495-499.
 - 847: Kuhn, R., M. Pattard, K. Pernak, and A. Winter (1989): Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to *Daphnia magna* in the 21 Day Reproduction Test. Water Res. 23(4):501-510.
 - 2997: Kuhn, R., and M. Pattard (1990): Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to Green Algae (*Scenedesmus subspicatus*) in the Cell Multiplication Inhibition Test. Water Res. 24(1):31-38.
 - 5436: Zok, S., G. Gorge, W. Kalsch, and R. Nagel (1991): Bioconcentration, Metabolism and Toxicity of Substituted Anilines in the Zebrafish (*Brachydanio rerio*). Sci.Total Environ. 109/110:411-421.
 - 6629: Canton, J.H., W. Slooff, H.J. Kool, J. Struys, T.J.M. Gouw, R.C.C. Wegman, and G.J. Piet (1985): Toxicity, Biodegradability and Accumulation of a Number of Cl/N-Containing Compounds for Classification and Establishing Water Quality Criteria. Regul. Toxicol. Pharmacol. 5:123-131.
 - 11258: Yoshioka, Y., Y. Ose, and T. Sato (1985): Testing for the Toxicity of Chemicals with *Tetrahymena pyriformis*. Sci.Total Environ. 43(1-2):149-157.
 - 15031: Broderius, S.J., M.D. Kahl, and M.D. Hoglund (1995): Use of Joint Toxic Response to Define the Primary Mode of Toxic Action for Diverse Industrial Organic Chemicals. Environ. Toxicol. Chem.14(9):1591-1605.
- 3) 環境省(2001):平成12年度 生態影響試験実施事業報告