安全データシート

3-ニトロトルエン

改訂日: 2024-01-24 版番号: 1

1. 化学品及び会社情報

製品識別子

CAS

製品名 : 3-ニトロトルエン

CB番号 : CB7854761

EINECS番号 : 202-728-6

物質または混合物の関連する特定された用途、および推奨されない用途

: 99-08-1

関連する特定用途 : 染料中間体 (NITE-CHRIPょり引用)

推奨されない用途 : なし

会社ID

会社名 : Chemicalbook

住所: 北京市海淀区上地十街匯煌国際1号棟

電話 : 010-86108875

2. 危険有害性の要約

GHS分類

分類実施日(物化危険性及び健康有害性)

R4.3.15、政府向けGHS分類ガイダンス(令和元年度改訂版(Ver2.0))を使用 ※一部、マニュアル(H18.2.10版)(GHS 初版)

物理化学的危険性

健康に対する有害性

急性毒性(経口) 区分4

眼に対する重篤な損傷性/眼刺激性 区分2B

生殖毒性 区分2

特定標的臓器毒性 (単回ばく露) 区分2(血液)

特定標的臓器毒性 (反復ばく露) 区分2(免疫系)

分類実施日(環境有害性)

ガイダンスVer.1.1 (GHS 4版, JIS Z7252:2014)

環境に対する有害性

水生環境有害性 短期(急性) 区分2

水生環境有害性 長期(慢性) 区分2

2.2注意書きも含むGHSラベル要素

絵表示

GHS07	GHS08	GHS09	

注意喚起語

警告

危険有害性情報

H302 飲み込むと有害。

H373 長期にわたる、又は反復ばく露により臓器 (全身毒性) の障害のおそれ。

H411 長期継続的影響によって水生生物に毒性。

注意書き

安全対策

P264 取扱い後は皮膚をよく洗うこと。

P270 この製品を使用するときに、飲食又は喫煙をしないこと。

P273 環境への放出を避けること。

応急措置

P301 + P312 + P330 飲み込んだ場合: 気分が悪いときは医師に連絡すること。口をすすぐこと。

P314 気分が悪いときは、医師の診察 / 手当てを受けること。

P391 漏出物を回収すること。

廃棄

P501 内容物 / 容器を承認された処理施設に廃棄すること。

2.3 他の危険有害性

なし

3. 組成及び成分情報

化学物質・混合物の区別 : 化学物質

別名 : 1-Methyl-3-nitrobenzene

化学特性(示性式、構造式等): C7H7NO2分子量: 137.14 g/molCAS番号: 99-08-1EC番号: 202-728-6

化審法官報公示番号 : 3-437

安衛法官報公示番号 :-

4. 応急措置

4.1 必要な応急手当

一般的アドバイス

この安全データシートを担当医に見せる。

吸入した場合

吸入後は新鮮な空気を吸うこと。ただちに医師の診察を受けること。

皮膚に付着した場合

皮膚に接触した場合: すべての汚染された衣類を直ちに脱ぐこと。 皮膚を流水/シャワーで洗うこと。 医師に相談する。

眼に入った場合

眼に触れた後は多量の水ですすぐこと。 眼科医の診察を受けること。 コンタクトレンズをはずす。

飲み込んだ場合

飲み込んだ後はただちに水を飲ませること(多くても2杯) 医師に相談する。

4.2 急性症状及び遅発性症状の最も重要な徴候症状

もっとも重要な既知の徴候と症状は、ラベル表示(項目2.2を参照)および/または項目11に記載されている

4.3 緊急治療及び必要とされる特別処置の指示

データなし

5. 火災時の措置

5.1 消火剤

使ってはならない消火剤

本物質/混合物に対する消火剤の制限なし

適切な消火剤

水 泡 二酸化炭素 (CO2) 粉末

5.2 特有の危険有害性

炭素酸化物

窒素酸化物(NOx)

可燃性。

蒸気は空気より重く、床に沿って広がることがある。

高熱で空気と反応して爆発性混合物を生じる

火災時に有害な燃焼ガスや蒸気を生じるおそれあり。

5.3 消防士へのアドバイス

自給式呼吸器がある場合のみ危険区域に留まってもよい。安全なゾーンまで離れるか適切な保護衣を着用して、皮膚に触れないようにすること。

5.4 詳細情報

ガス / 蒸気 / ミストを水スプレージェットで抑える(除去する)。 消火水が、地上水または地下水のシステムを汚染しないようにする。

6. 漏出時の措置

6.1 人体に対する注意事項、保護具及び緊急時措置

救急隊員以外への助言: 蒸気、エアゾールを吸入してはならない。 触れないようにすること。 十分な換気を確保する。 危険なエリアから避難し、緊急時手順に従い、専門家に相談のこと個人保護については項目 8 を参照する。

6.2 環境に対する注意事項

物質が排水施設に流れ込まないようにする。

6.3 封じ込め及び浄化の方法及び機材

排水溝に蓋をすること。こぼれたら集めて結合させ、ポンプですくい取る。 物質の制限があれば順守のこと (セクション 7、10参照) 液体吸収剤(例. Chemizorb®)で処置すること。 正しく廃棄すること。関係エリアを清掃のこと。

6.4 参照すべき他の項目

廃棄はセクション13を参照。

7. 取扱い及び保管上の注意

7.1 安全な取扱いのための予防措置

安全取扱注意事項

換気フードの下で作業すること。吸い込まないこと。 蒸気やエアロゾルが生じないようにすること。

衛生対策

汚れた衣類は取り替えること。事前に皮膚を保護することが望ましい。本物質を扱った後は手を洗うこと。注意事項は項目2.2を参照。

7.2 配合禁忌等を踏まえた保管条件

保管クラス

保管クラス (ドイツ) (TRGS 510): 6.1A: 可燃性、急性毒性カテゴリー1および2 / 猛毒性危険物

保管条件

密閉のこと。 換気のよい場所で保管する。 鍵をかけておくか、資格のあるまたは認可された人のみが出入りできる場所に入れておく。

7.3 特定の最終用途

項目1.2に記載されている用途以外には、その他の特定の用途が定められていない

8. ばく露防止及び保護措置

8.1 管理濃度

コンポーネント別作業環境測定パラメータ

TWA: 2 ppm - 米国。 ACGIH限界閾値 (TLV)

8.2 曝露防止

適切な技術的管理

汚れた衣類は取り替えること。事前に皮膚を保護することが望ましい。本物質を扱った後は手を洗う

こと。 **保護具**

眼/顔面の保護

NIOSH(US)またはEN 166(EU)などの適切な政府機関の規格で試験され、認められた眼の

保護具を使用する。 保護眼鏡

皮膚及び身体の保護具

本推奨は、当社発行の安全データシート,に記載されている製品およびその指定の使用法のみに適用される。溶解、他の物質との混合、およびEN374に記載の逸脱条件での使用については、CE認証手袋のサプライヤに問い合わせのこと(例. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet:

www.kcl.de)

フルコンタクト

材質: ブチルゴム

最小厚: 0.7 mm

破過時間: 480 min

試験物質: Butoject® (KCL 898)

本推奨は、当社発行の安全データシート,に記載されている製品およびその指定の使用法のみに適用される。溶解、他の物質との混合、および ${
m EN374}$ に記載の逸脱条件での使用については、

CE認証手袋のサプライヤに問い合わせのこと(例. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet:

www.kcl.de)

飛沫への接触

材質: ニトリルゴム

最小厚: 0.4 mm

破過時間: 30 min

試験物質: Camatril? (KCL 730 / Aldrich Z677442, Size M)

身体の保護

保護衣

呼吸用保護具

気化ガス/エアロゾル発生時に必要 次の規格に準拠しているフィルター式呼吸器保護具を推奨します。DIN EN 143、DIN 14387および使用済み呼吸器保護システムに関連する他の付属規格。

環境暴露の制御

物質が排水施設に流れ込まないようにする。

9. 物理的及び化学的性質

Information on basic physicochemical properties

物理状態	液体 (20℃、1気圧) (GHS判定)	
色	黄色	
臭い	特異臭、芳香臭	
16.1 ℃(ISCS(2001)) 16 ℃(GESTIS(2022)) 15.5 ℃(PubChem(2022))		
231.9 ℃(ISCS(2001)) 232 ℃(GESTIS(2		
可燃性(ICSC(2001))		
1.6 vol%(空気中)(ICSC(2001))		
テム(2022))		
データなし		
データなし		
データなし		

水: 0.05 g/100 ml(20℃)(ICSC(2001)) 水: 450 mg/L(20℃)(PubChem(2022)) エタノール、ベンゼン、 ジエチルエーテルなどに可溶(PubChem(2022)) Log Kow: 2.45(ICSC(2001), PubChem(2022)) 0.107 mm Hg(25°C)(PubChem(2022)) 1.16 g/cm³(20℃)(GESTIS(2022)) 1.1630 (20℃ / 4℃)(PubChem(2022)) 1.157 (20℃)(危険物災害等 支援システム(2022)) 4.73 (空気=1)(ICSC(2001)、GESTIS(2022)) 4.72 (空気=1)(PubChem(2022)) 該当しない 融点/凝固点 16.1 ℃(ISCS(2001)) 16 ℃(GESTIS(2022)) 15.5 ℃(PubChem(2022)) 沸点、初留点及び沸騰範囲 231.9 ℃(ISCS(2001)) 232 ℃(GESTIS(2022)) 234 ℃(危険物災害等支援システム(2022)) 可燃性 可燃性(ICSC(2001)) 爆発下限界及び爆発上限界/可燃限界 1.6 vol%(空気中)(ICSC(2001)) 引火点 106 ℃(Closed cup)(ICSC(2001)、GESTIS(2022)、PubChem(2022)) 100 ℃(危険物災害等支援システム(2022)) 自然発火点 440 ℃(危険物災害等支援システム(2022)) 分解温度 データなし

pН

データなし

動粘性率

データなし

溶解度

水: 0.05 g/100 ml(20℃)(ICSC(2001)) 水: 450 mg/L(20℃)(PubChem(2022)) エタノール、ベンゼン、ジエチルエーテルなどに可溶 (PubChem(2022))

n-オクタノール/水分配係数

Log Kow: 2.45(ICSC(2001), PubChem(2022))

蒸気圧

 $0.107 \text{ mm Hg}(25^{\circ}\text{C})(\text{PubChem}(2022))$

密度及び人又は相対密度

1.16 g/cm³(20℃)(GESTIS(2022)) 1.1630 (20℃ / 4℃)(PubChem(2022)) 1.157 (20℃)(危険物災害等支援システム(2022))

相対ガス密度

4.73 (空気=1)(ICSC(2001)、GESTIS(2022)) 4.72 (空気=1)(PubChem(2022))

粒子特性

該当しない

10. 安定性及び反応性

10.1 反応性

高熱で空気と反応して爆発性混合物を生じる

引火点より下のおよそ15ケルビンからの範囲は危険とみなされている。

10.2 化学的安定性

標準的な大気条件(室温)で化学的に安定。

10.3 危険有害反応可能性

次との反応で爆発のおそれ

アルカリ塩

過酸化物

硫酸

三酸化硫黄

還元剤

次により発熱反応を生じる

アンモニア

水酸化ナトリウム

強酸化剤

強酸

次との反応で燃焼ガスや蒸気の発火または生成のおそれ

ナトリウム

10.4 避けるべき条件

強力な熱

10.5 混触危険物質

データなし

10.6 危険有害な分解生成物

火災の場合:項目5を参照

11. 有害性情報

急性毒性

経口

ラットLD50値:1072mg/kg、2000mg/kgおよび2200mg/kg(IARC 65, 1996)に基づき算出された計算値は1187mg/kgであることから、区分4とした。

経皮

ウサギLD50値:>20000mg/kg(HSDB, 2005)であるが、ラットLD50値:>1157mg/kg(IUCLID, 2000、BUA 41, 1989)であることから、区分が特定できず、データ不足のため分類できないとした。

吸入:ガス

GHSの定義による液体である。

吸入:蒸気

HSDB(2005)に ラットLC50(4時間)値:>157ppm(換算値0.879mg/L)とのデータがあるのみで区分は特定できず、データ不足のため分類できない

吸入:粉じん及びミスト

IUCLID(2000)、BUA 41(1989)に ラットLC50(1時間)値:>2.417mg/L(4時間換算値0.6043mg/L)とのデータがあるのみで区分が特定できず、データ不足のため分類できない。

皮膚腐食性及び皮膚刺激性

ICSC(J)(2000)およびHSDB(2005)の皮膚を軽度に刺激するとの記述から、区分3とした。

眼に対する重篤な損傷性又は眼刺激性

ICSC(J)(2000)およびHSDB(2005)の皮膚を軽度に刺激するとの記述から、区分2Bとした。

呼吸器感作性

データなし。

皮膚感作性

データなし。

生殖細胞変異原性

体細胞を用いるin vivo変異原性試験であるラットおよびマウス赤血球を用いた小核試験で陰性の結果(NTP DB, 2005)があることから、区分に該当しないとした。

発がん性

【分類根拠】 データ不足のため分類できない。本物質について、DFGの分類はCategory 3である。しかし、DFGの分類は類似物質(4-ニトロトルエン)からの類推であること、本物質自体の証拠は疫学、動物実験ともに入手できないことから、分類には用いなかった。

【参考データ等】(1)国内外の分類機関による既存分類として、DFGでは(2)、(3)のデータを踏まえ本物質の異性体である4-ニトロトルエン (CAS番号 99-99-0)と同じ Category 3(DFG MAK (2007))に分類している。その他、IARCではグループ3(IARC 65 (1999))に分類している。 (2)4-ニトロトルエンと本物質の代謝経路はほぼ同様であり、定性的および定量的に同様の作用を示す(DFG MAK (2007))。 (3)4-ニトロトルエンを被験物質としたラットを用いた2年間混餌投与による発がん性試験において、2,500 ppmで雌に陰核腺の腺腫及び/又はがんの有意な頻度増加、雄で皮下腺腫及び皮下の腺腫及び/又はがんの有意な増加がみられ、発がん性について、雄では不確かな証拠、雌ではある程度の証拠が得られたとの報告がある(NTP TR498 (2002))。 (4)4-ニトロトルエンを被験物質としたB6C3F1マウスを用いた105~106週間混餌投与による試験において、5,000 ppmで雄に細気管支-肺胞の腺腫とがんの合計頻度の増加がみられ、本物質の発がん性について、雄で不確かな証拠が得られた。なお、雄にみられた肺腫瘍に関連した前腫瘍性病変として、肺胞の細気管支化と過形成が雌雄でみられたとの報告がある(NTP TR498 (2002))。

生殖毒性

ACGIH(7th, 2001)およびIARC 65(1996)のラットおよびマウスを用いた混餌経口投与試験において、体重の低値などの一般毒性が認められる用量で精子数減少などの精巣機能障害および雌の性周期異常が認められたとの記述から、区分2とした。

特定標的臓器毒性 (単回ばく露)

ICSC(J)(2000)の血液に影響を与え、メトヘモグロビンを生成することがあるとの記述から、区分2(血液)とした。

特定標的臓器毒性 (反復ばく露)

NTP DB(2005)およびPATTY(4th, 1994)のマウスを用いた経口投与試験において免疫機能への影響が区分2のガイダンス値範囲の投与量で認められたとの記述から、区分2(免疫系)とした。

誤えん有害性*

データなし。

*JIS Z7252の改訂により吸引性呼吸器有害性から項目名が変更となった。

12. 環境影響情報

12.1 生態毒性

魚毒性

流水式試験LC50- Danio rerio (ゼブラフィッシュ) - 35.3 mg/l - 96 h

(OECD 試験ガイドライン 203)

ミジンコ等の水生無脊

止水式試験 EC50 - Daphnia magna (オオミジンコ) - 7.4 mg/l - 48 h

椎動物に対する毒性

備考: (ECHA)

藻類に対する毒性

成長抑制 ErC50 - Chlorella pyrenoidosa - 14 mg/l - 96 h

(OECD 試験ガイドライン 201)

微生物毒性

3.95 mg/l - 15 min

備考: (IUCLID)

12.2 残留性 · 分解性

生分解性

好気性 - 曝露時間 14 d

結果: 2% - 易分解性ではない。

12.3 生体蓄積性

データなし

12.4 土壌中の移動性

データなし

12.5 PBT および **vPvB** の評価結果

化学物質安全性評価が必要ではない/行っていないため、PBT/vPvB評価データはない。

12.6 内分泌かく乱性

データなし

12.7 他の有害影響

データなし

13. 廃棄上の注意

13.1 廃棄物処理方法

製品

内容物及び容器は、関連法規及び各自治体の条例等の規制に従い、産業廃棄物として適切に処理すること。

14. 輸送上の注意

14.1 国連番号

ADR/RID (陸上規制): 1664 IMDG (海上規制): 1664 IATA-DGR (航空規制): 1664

14.2 国連輸送名

ADR/RID (陸上規制): NITROTOLUENES, LIQUID IMDG (海上規制): NITROTOLUENES, LIQUID IATA-DGR (航空規制): Nitrotoluenes, liquid

14.3 輸送危険有害性クラス

ADR/RID (陸上規制): 6.1 IMDG (海上規制): 6.1 IATA-DGR (航空規制): 6.1

14.4 容器等級

ADR/RID (陸上規制): II IMDG (海上規制): II IATA-DGR (航空規制): II

14.5 環境危険有害性

ADR/RID: 該当 IMDG 海洋汚染物質(該当・非該当): IATA-DGR (航空規制): 非該当該当

14.6 特別の安全対策

なし

14.7 混触危険物質

15. 適用法令

労働安全衛生法

名称等を表示すべき危険物及び有害物(法第57条第1項、施行令第18条第1号、第2号別表第9) 名称等を通知すべき危険物及び有害物(法第57条の2、施行令第18条の2第1号、第2号別表第9) 危険性又は有害性等を調査すべき物(法第57条の3)

化学物質排出把握管理促進法(PRTR法)

第二種指定化学物質(法第2条第3項、施行令第2条別表第2)(令和4年度までの対象)

毒物及び劇物取締法

該当しない

消防法

第4類 引火性液体 第三石油類 非水溶性(法第2条第7項危険物別表第1·第4類)

船舶安全法

毒物類(危規則第3条危険物告示別表第1)

航空法

毒物類(施行規則第194条危険物告示別表第1)

16. その他の情報

略語と頭字語

ADR: 道路による危険物の国際輸送に関する欧州協定

CAS: ケミカルアブストラクトサービス

EC50: 有効濃度 50%

IATA: 国際航空運送協会

IMDG: 国際海上危険物

LC50: 致死濃度 50%

LD50: 致死量 50%

RID: 鉄道による危険物の国際運送に関する規則

STEL: 短期暴露限度 TWA: 時間加重平均

参考文献

- 【1】労働安全衛生法 ウェブサイト https://www.mhlw.go.jp
- 【2】化学物質審查規制法(化審法)https://www.env.go.jp
- 【3】化学物質排出把握管理促進法(PRTR法) https://www.chemicoco.env.go.jp
- 【4】NITE化学物質総合情報提供システム (NITE-CHRIP) https://www.nite.go.jp/
- 【5】カメオケミカルズ公式サイト http://cameochemicals.noaa.gov/search/simple
- 【6】ChemlDplus、ウェブサイト http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/chemidlite.jsp
- 【7】ECHA 欧州化学物質庁、ウェブサイト https://echa.europa.eu/

- 【8】eChemPortal OECD 化学物質情報グローバルポータル、ウェブサイトhttp://www.echemportal.org/echemportal/index? pageID=0&request_locale=en
- 【9】ERG 米国運輸省による緊急対応ガイドブック、ウェブサイトhttp://www.phmsa.dot.gov/hazmat/library/erg
- 【10】有害物質に関するドイツ GESTIS データベース、ウェブサイトhttp://www.dguv.de/ifa/gestis/gestis-stoffdatenbank/index-2.jsp
- 【11】HSDB 有害物質データバンク、ウェブサイト https://toxnet.nlm.nih.gov/newtoxnet/hsdb.htm
- 【12】IARC 国際がん研究機関、ウェブサイト http://www.iarc.fr/
- 【13】IPCS The International Chemical Safety Cards (ICSC)、ウェブサイトhttp://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.home
- 【14】Sigma-Aldrich、ウェブサイト https://www.sigmaaldrich.com/

免責事項:

本MSDS中の情報は指定された製品にのみ適用され、特に規定がない限り、本製品とその他の物質の混合物には適用されません。本MSDSは、製品使用者の適切な専門的なトレーニングを受けた者にのみ製品安全情報を提供します。本MSDSの使用者は、本SDSの適用性について独自に判断しなければならない。本MSDSの著者は、本MSDSの使用によるいかなる傷害にも責任を負わない。