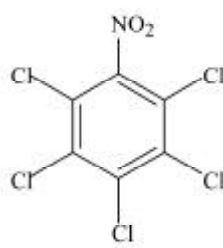


[3 5] ペンタクロロニトロベンゼン

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：ペンタクロロニトロベンゼン
CAS 番号：82-68-8
分子式：C ₆ Cl ₅ NO ₂
分子量：295.3
構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色固体で¹⁾、水溶性は低い。

融点	143 ~ 144 ²⁾
沸点	328 (一部份分解) ²⁾
比重	1.718 (25) ¹⁾
蒸気圧	6.7×10^{-3} Pa (5.0×10^{-5} mmHg) (20) ²⁾
換算係数	1ppm=12.08 mg/m ³ at 25 ,気体 (計算値)
n-オクタノール/水分配係数	4.64 (実測値) ³⁾
加水分解性	加水分解を受けやすい化学結合なし ⁴⁾
解離定数	解離基なし ⁴⁾
水溶性	0.44 mg/L (20) ²⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

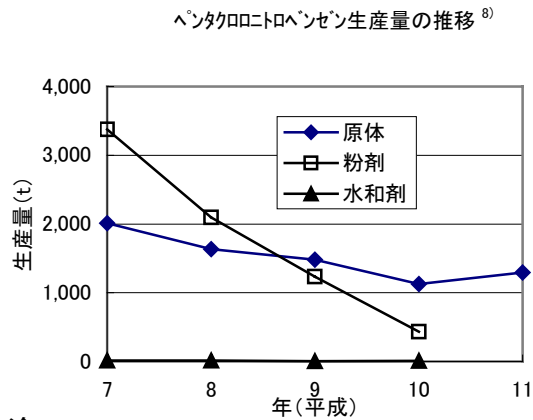
本物質の蓄積性は高いと想定される。本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

<p>分解性</p> <p>好氣的：難分解⁵⁾</p> <p>嫌氣的：硫酸還元条件下の河口から採取した嫌氣的底質中で、ペンタクロロアニリンに変換(半減期：0.866 日)された後、順次脱塩素化されたクロロアニリン類に変換されたとの報告がある¹⁾。</p> <p>非生物的：</p> <p>(直接光分解)：ヘキサン、メタノール溶液を7月の太陽光へ7日間の照射しても分解しなかったとの報告がある⁶⁾。</p> <p>BOD から算出した分解度：</p> <p>1%(試験期間：4週間、被験物質：100 mg/L、活性汚泥：30 mg/L)⁵⁾</p> <p>生物濃縮係数 (BCF)：魚類 (ウグイ) ; 1,140、藻類 ; 14,000、22,000¹⁾</p>
--

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の11農薬年度における国内生産量は1,293.8t(原体)、輸出量は1,595.0t(原体)である⁷⁾。また、OECDに報告している生産量は1,000～10,000tである。国内流通量の目安として、生産量の推移⁸⁾を下図に示した。



② 用途

本物質の用途は土壌専用の殺菌剤で、5及び20%の粉剤と50及び75%の水和剤がある⁸⁾。

2. 暴露評価

環境リスクの初期評価のため、わが国の一般的な国民の健康や、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が、多数のデータが得られ、その一部に排出源周辺等のデータも含まれると考えられる場合には、95パーセンタイル値による評価を行っている。

(1) 環境中分布の予測

本物質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 本物質の各媒体間の分布予測結果

		分布量(%)
大	気	0.8
水	質	13.8
土	壌	39.1
底	質	46.3

(2) 各媒体中の存在量の概要

本物質の環境中等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 本物質の各媒体中の存在状況

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
一般環境大気	μg/m ³	< 0.006	< 0.006	0.0075	0.006	1/16	全国	1991	2
土壌	μg/g		3.9	80		3/3	群馬	1987	3
食物	μg/g	< 0.002			0.002	0/45	全国	2001	4
公共用水域・淡水	μg/L	< 0.0002	< 0.0002		0.0002	0/20	全国	2001	1
公共用水域・海水	μg/L	< 0.42	< 0.42		0.42	0/9	全国	1991	2
水質発生源周辺	μg/L		< 0.0005	1.4	0.0005	?/7	群馬	1987	3
底質(公共用水域・淡水)	μg/g	< 0.039	< 0.039		0.039	0/9	全国	1991	2
底質(公共用水域・海水)	μg/g	< 0.039	< 0.039		0.039	0/8	全国	1991	2

(3) 人に対する暴露の推定（一日暴露量の予測最大量）

一般環境大気、公共用水域淡水及び食物の実測値を用いて、人に対する暴露の推定を行った。ここで公共用水域淡水のデータを用いたのは、飲料水の分析値が得られなかったためで

ある（表 2.3）。化学物質の人による一日暴露量の算出に際しては、人の1日の呼吸量、飲水量及び食事量をそれぞれ 15 m³、2L 及び 2,000g と仮定し、体重を 50kg と仮定している。

表 2.3 本物質の各媒体中濃度と一日暴露量

	媒体	濃度	一日暴露量
平均	大気		
	一般環境大気	0.006 µg/m ³ 未満程度 (1991)	0.0018 µg/kg/day 未満程度
	室内空気	データはない	データはない
	水質		
	飲料水	データはない	データはない
	地下水	データはない	データはない
	公共用水域・淡水	0.0002 µg/L 未満程度 (2001)	0.000008 µg/kg/day 未満程度
食物	0.002 µg/g 未満程度 (2001)	0.08 µg/kg/day 未満程度	
土壌	居住地域でのデータはない	データはない。	
最大値等	大気		
	一般環境大気	0.0075 µg/m ³ 程度 (1991)	0.0023 µg/kg/day 程度
	室内空気	データはない	データはない
	水質		
	飲料水	データはない	データはない
	地下水	データはない	データはない
	公共用水域・淡水	0.0002 µg/L 未満程度 (2001)	0.000008 µg/kg/day 未満程度
食物	0.002 µg/g 未満程度 (2001)	0.08 µg/kg/day 未満程度	
土壌	居住地域でのデータはない	データはない。	

人の一日暴露量の集計結果を表 2.4 に示す。吸入暴露による一日暴露量の予測最大量は 0.002 µg/kg/day（濃度としては 0.0075 µg/m³）であった。経口暴露による一日暴露量の予測最大量は 0.080 µg/kg/day 未満であり、うち食物経由が 0.08 µg/kg/day 未満であった。全暴露経路からの一日暴露量の予測最大量は 0.082 µg/kg/day 未満であった。

表 2.4 人の一日暴露量

		平 均	予測最大量
		暴露量(μg/kg/day)	暴露量(μg/kg/day)
大気	一般環境大気	<u>0.0018</u>	0.0023
	室内空気		
水質	飲料水		
	地下水		
	公共用水域・淡水	<u>0.000008</u>	<u>0.000008</u>
食物		<u>0.08</u>	<u>0.08</u>
土壌			
経口暴露量合計		<u>0.080008</u>	<u>0.080008</u>
総暴露量		<u>0.081808</u>	<u>0.082308</u>

注：アンダーラインは不検出データによる暴露量を示す。また、総暴露量の項のアンダーラインは、不検出データによる暴露量が優位を示した総暴露量を示す。

(4) 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）

本物質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 2.5 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 0.0002 μg/L 未満程度、同海水域では 0.42 μg/L 未満程度となった。

表 2.5 水質中の本物質の濃度

媒 体	平 均	最 大 値 等
	濃 度	濃 度
水 質		
公共用水域・淡水	0.0002 μg/L 未満程度 (2001)	0.0002 μg/L 未満程度 (2001)
公共用水域・海水	0.42 μg/L 未満程度 (1991)	0.42 μg/L 未満程度 (1991)

注：公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。

3. 健康リスクの初期評価

健康リスクの初期評価として、ヒトに対する化学物質の影響（内分泌かく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) 一般毒性及び生殖・発生毒性

急性毒性¹⁾

動物種	経路	致死量、中毒量等
ラット（オス）	経口	LD ₅₀ : 1,710 ± 200 mg/kg
ラット（メス）	経口	LD ₅₀ : 1,650 ± 170 mg/kg

本物質のヒトへの作用として、血液の酸素運搬能力低下と神経系の機能低下がある。

また、ネコはメトヘモグロビン還元酵素活性が弱く、感受性が著しく強いいため、1,600 mg/kg の高用量の単回摂取で、メトヘモグロビン血症が現れたという報告がある。

中・長期毒性

ビーグル犬雌雄各 4 匹を 1 群とし、0、5、30、180、1,080 ppm を食餌に添加して 2 年間投与した結果、180 ppm 以上の群に胆汁うっ滞性肝障害を認め、1,080 ppm 群では血清アルカリフォスファターゼ上昇と肝臓重量の増加を認めた²⁾。この結果から、30 ppm を摂取量に換算した 0.75 mg/kg/day が NOEL となる。

生殖・発生毒性

CD ラット雌雄各 25 匹を 1 群とし、交配前 11 週から第三世代新生仔出生まで 0、5、50、500 mg/kg/day を混餌投与した結果、受胎率、産仔数、出生仔の大きさ、出生 4 日後の生存仔数や組織所見を観察したが、生殖・発生毒性を認めなかった²⁾。

本文献の他、妊娠ラット³⁾及び妊娠マウス⁴⁾を用いての経口投与試験の報告があるが、いずれの試験においても生殖・発生毒性を認めていない。

ヒトへの影響

ヒトに対する影響として、弱い皮膚感作性が知られているが、皮膚刺激性はない。

職場での事故による過剰暴露により結膜炎が発生したとする報告が 1 例ある。

疫学調査（発がん性を含む）や暴露状況を把握したモニタリング調査の報告はない。

(2) 発がん性

発がん性に関する知見の概要

C57BL/6 × C3H/Anf の F₁ マウス及び C57BL/6 × AKR の F₁ マウス雌雄各 18 匹を 1 群とし、生後 7 日～28 日目まで胃ゾンデにより 0、464 mg/kg/day を投与した後、0、1,206 mg/kg を食餌に添加して 78 週間投与した結果、いずれも有意な腫瘍の発生を認めなかった (IARC, 1974)。

Osborne-Mendel ラット及び B6C3F₁ マウス雌雄各 50 匹を 1 群とし、ラットの雄に 5,417、10,064 mg/kg、雌に 7,875、14,635 mg/kg を食餌に添加して、マウスでは雄に 2,606、5,213 mg/kg、

雌に 4,093、8,187 mg/kg を食餌に添加して 78 週間投与した結果、いずれも有意な腫瘍の発生を認めなかった (NCI, 1978)。

ACGIH (1992) は、これらの結果や NTP (1987) 等の報告を引用し、いずれも発がん性を示すものはなかったとしている。

発がんリスク評価の必要性

実験動物では非発がん性を示唆する結果が得られているものの、ヒトでの発がん性に関する証拠がないため、IARC の評価では 3 (ヒトに対する発がん性については分類できない) に分類されている。このため、現時点では発がん性に関する評価を行う必要はない。

(3) 無毒性量 (NOAEL) 等の設定

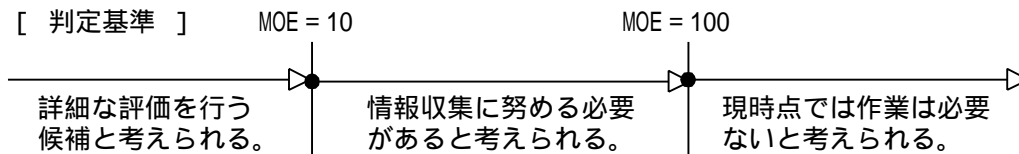
経口暴露については、イヌの中・長期毒性試験から得られた NOEL 0.75 mg/kg/day (胆汁うっ滞性肝障害) が信頼性のある最小値であることから、同値を無毒性量等として設定する。

吸入暴露については、信頼性のあるデータが得られなかった。

(4) 健康リスクの初期評価結果

表 3.2 健康リスクの初期評価結果

暴露経路	暴露量		無毒性量等		MOE
	平均値	予測最大量			
経口	0.080 µg/kg/day 未満	0.080 µg/kg/day 未満	0.75 mg/kg/day	イヌ	940 超



経口暴露については、暴露量は平均値、予測最大量ともに 0.080 µg/kg/day 未満であった。動物実験結果より設定された無毒性量等 0.75 mg/kg/day と予測最大量から求めた MOE (Margin of Exposure) は 940 を超えるため、健康リスクについては現時点では作業は必要ないと考えられる。

4. 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 4.1 のとおりとなる。

表 4.1 生態毒性の概要

生物種	急性	慢性	毒性値 [μg/L]	生物種	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			100	<i>Selenastrum capricornutum</i>	NOEC BMS	3				環境庁
			685	<i>Selenastrum capricornutum</i>	EC ₅₀ BMS	3				環境庁
			100,000 ~ 1,000,000	Phytoplankton	NR PGR	0.17				11559
甲殻類			84	<i>Daphnia magna</i>	NOEC REP	21				環境庁
			925	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ IMM	2				環境庁
			0.03	<i>Daphnia magna</i>	LOEC NR	21				344
			0.01	<i>Mysidopsis bahia</i>	LC ₅₀ MOR	4				344
			0.02	<i>Mysidopsis bahia</i>	LC ₅₀ MOR	4				344
			0.77	<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀ NR	2				344
魚類			323	<i>Oryzias latipes</i>	LC ₅₀ MOR	4				環境庁
			20,000	<i>Cyprinus carpio</i>	TLm MOR	1				5761
その他			50	<i>Lemna minor</i>	NR RSD	1162 (166週)				9146

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で、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、LOEC(Lowest Observed Effect Concentration): 最小影響濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration): 無影響濃度、TLm (Median Tolerance Limit) : 半数生存限界濃度、NR (Not Reported) : 記載無し

影響内容) BMS(Biomass) : 生物現存量、IMM(Immobilization) : 遊泳阻害、MOR(Mortality) : 死亡、PGR(Population Growth) : 個体群成長・増殖、REP (Reproduction) : 繁殖、再生産、RSD (Residue) : 残留量 (暴露後における組織内の残留量)、NR (Not Reported) : 記載無し

(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* に対する生長阻害の 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 685 μg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する遊泳阻害の 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 925 μg/L、魚類では *Oryzias latipes* の 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 323

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最も低い値（魚類の323 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3.2 μg/Lが得られた。

慢性毒性値については、藻類では *Selenastrum capricornutum* に対する生長阻害の72時間無影響濃度(NOEC)が100 μg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する繁殖阻害の21日間無影響濃度(NOEC)が84 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最も低い値（甲殻類の84 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0.84 μg/Lが得られた。

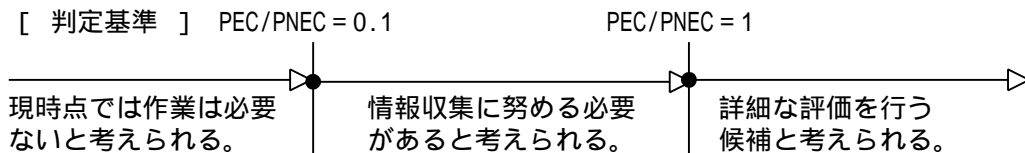
本物質のPNECとしては、以上により求められたPNECのうち低い値である、甲殻類の慢性毒性値をアセスメント係数100で除した0.84 μg/Lを採用する。

(3) 生態リスクの初期評価結果

表 4.2 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	一般環境 淡水域	0.0002 μg/L 未満程度 (2001)	0.0002 μg/L 未満程度 (2001)	0.84 μg/L	<0.0002
	一般環境 海水域	0.42 μg/L 未満程度 (1991)	0.42 μg/L 未満程度 (1991)		<0.5
	発生源周辺	散布地において最大 1.4 μg/L との報告がある	散布地において最大 1.4 μg/L との報告がある		
底質	一般環境	0.039 μg/g・dry 未満程度 (1991)	0.039 μg/g・dry 未満程度 (1991)		

注：一般環境・淡水域は、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で0.0002 μg/L未満程度、海水域で0.42 μg/L未満程度であり、いずれも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）についても同様に、いずれも検出下限値未満であった。

予測環境中濃度（PEC）と予測無影響濃度（PNEC）の比は、淡水域では0.0002未満となるため、現時点では作業は必要ないと考えられる。海水域では0.5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。

5. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) Hazardous Substances Data Bank (HSDB) (1998) U.S.National Library of Medicine
- 2) Richardson, M.L. *et al.* (1992-1995) The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry
- 3) 分配係数計算用プログラム“C Log P”, アダムネット(株)
- 4) (財)化学品検査協会 (1997) 化学物質ハザード・データ集
- 5) (財)化学品検査協会 (1982) 化審法の既存化学物質安全性点検データ集
- 6) S. Susarla, S. Masunaga and Y. Yonezawa (1996) Chemosphere, 32, 967
- 7) 化学工業日報社 (2001) 13901 の化学商品
- 8) 化学工業日報社 (1997;1998;1999;2000;2001) 13197 の化学商品, 13398 の化学商品, 13599 の化学商品, 13700 の化学商品, 13901 の化学商品

(2) 暴露評価

- 1) (財)日本環境衛生センター 平成12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4年版化学物質と環境
- 3) 用水と排水 Vol32, No.12, p3-12, 1990
- 4) (財)日本食品分析センター 平成12年度食事からの化学物質暴露量に関する調査報告書

(3) 健康リスクの初期評価

- 1) MERCK INDEX (1996)
- 2) Borzelleca, J. F. *et al.* (1971) Toxicol. Appl. Pharmacol. , 18 : 522-534.
- 3) Khera, K. S. *et al.* (1975) Toxicology 5: 117-122.
- 4) Courtney, K. D. *et al.* (1976) Toxicol. Appl. Pharmacol. 35: 239-256.

参考資料

- Environmental Health Criteria 41, IPCS (1984) .
- IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans, Volume 5 (1974) ; Supplement 7 (1987) .
- Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices, Sixth Edition, Pentachloronitrobenzene, ACGIH (1992) .

(4) 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)
- 344:Office of Pesticide Programs (1995): Environmental Effects Database (EEDB). Environmental Fate and Effects Division, U.S. EPA, Washington, D.C.
- 5761:Hashimoto,Y. and Y.Nishiuchi (1981): Establishment of Bioassay Methods for the Evaluation of Acute Toxicity of Pesticides to Aquatic Organisms. J. Pestic. Sci. 6(2): 257-264 (JPN) (ENG ABS).
- 9146:Schauerte,W., J.P.Lay, W.Klein, and F.Korte (1982): Long-Term Fate of Organochlorine Xenobiotics in Aquatic Ecosystems. Distribution, Residual Behavior, and Metabolism of

- Hexachlorobenzen. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 6:560-569.
- 11559:Somashekar,R.K. and K.P.Sreenath (1984): Effect of Fungicides on Primary Productivity. *Indian. J. Environ. Health* 26(4): 355-357.
- 3) 環境庁 (2000) : 平成 11 年度 生態影響試験実施事業報告