

環境 毒性	魚類への急性 毒性	96hLC50=0.27mg/L(OE CD-TG-203, メダカ)		
	ミジンコへの急 性毒性	48hr-EC50=0.38 (OECD-TG-202, Daphnia magna)		
	藻類への毒性	72hErC50=1.2(OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata) 72hEbC50= 0.64 (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata)		
	微生物への毒 性	—	—	—
	水生生物への 慢性毒性	21dNOEC=0.02 mg/L(OECD TG 211, Daphnia magna; reproduction) 72hNOEC=0.045、 72hNOEC=0.18mg/L		
	陸生生物への 毒性	—	—	—
	物理的影響の モニタリング	—	—	—
	生体内変換と動 態	—	—	—

4-2-2-1. 環境中での動態

好氣的生分解性試験が2, α -および4, α -ジクロロトルエンの2つの異性体で実施されており、28日間の分解度はBODベースで0%である。2, α -ジクロロトルエンでは本質的生分解性試験が行われており、生分解性ありとの判断であった。2つの異性体について行われた好氣的生分解性試験においては、加水分解産物であるそれぞれ o -クロロベンジルアルコールおよび p -クロロベンジルアルコールが検出され、さらにその酸化物であるクロロベンズアルデヒドおよびクロロ安息香酸が残存した。3- α -ジクロロトルエンについては実測値の報告はなかった。なお、2, α -ジクロロトルエンの純水中で半減期は33時間 (pH7) であり、

自然環境中でも比較的速やかに加水分解される物質であると判断される。

生物蓄積性については、不安定な物質であるため実測値はなく、構造類似物の分配係数から推定されている。

以上から、本カテゴリーに属する3異性体は水環境中で不安定でそれぞれの加水分解物を生じた後、いくつかの分解過程産物、もしくは最終分解産物は分解性バクテリアによる生分解を受ける、また生態濃縮性は低いことから、連続的な環境排出が続かない限り長期慢性毒性の懸念は低く、環境中では主に土壌、次いで水中に分布すると予測された(表17)。

表17. Fugacity モデル (Level III) によるジクロロトルエン
予測環境分布 (%)

大気	4.3	3.9	4.9
水	12	12	13
土壌	83	83	81

底質	0.8	0.8	0.5
----	-----	-----	-----

4-2-2-2. 水生生物への有害性情報

2, α -ジクロロトルエンの生態毒性試験(表16)はOECDテストガイドラインに準拠して実施されたが、OECDガイダンスドキュメント23(OECD, 2000)発表前に実施された試験であるためいくつかの点でその信頼性に疑問がある。すなわち本物質の水溶解性は試験実施において溶解助剤の使用の必要がなかったものの、当該試験では界面活性作用を有する分散助剤を用いている。また、藻類生長阻害試験、ミジンコ繁殖試験および魚類急性毒性試験においては被験物質濃度が試験期間中十分に維持されず、かつ、加水分解産物が生じたと考えられるがその同定がされていない、被験物質(親物質)と加水分解産物のどちらに

毒性があったか明らかにできていない、等の点である。分解産物は、 α -クロロベンジルアルコール)、 α -クロロベンズアルデヒドおよび α -クロロ安息香酸であると推測されるが、この3つの化学物質については構造活性相関より毒性が親物質より低いと推測されている(OECD-HPVプログラム)。

表16に示す以外に3つの異性体に毒性学上の有意な差異があるかどうかを示す実測値は入手できなかった。ただし、表18に示すそれぞれの水生生物に対する推定毒性値からすると、差異があるとの根拠は見いだせなかった。

表18. 定量的構造活性相関による水生生物に対する毒性値予測
(ECOSAR v0.99h)

(mg/L)

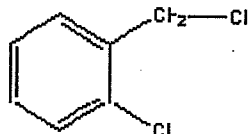
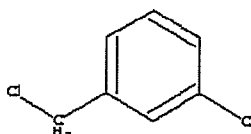
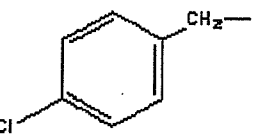
魚類急性	96hLC50	0.18	0.18	0.18
甲殻類急性	48hEC50	0.18	0.18	0.18
藻類急性	96hEC50	0.18	0.18	0.18
魚類慢性	30dChV	-	-	-
魚類慢性	90dChV	-	-	-
甲殻類慢性	21dChV	-	-	-
藻類慢性	96hChV	-	-	-

4-2-2-3. カテゴリーアプローチ適用可能性の考察

本カテゴリーに属する3つの異性体は、水環境中での挙動および生態毒性について類似した特性を有しており、カテゴリーアプローチを適用して有害性評価を行うことは可能である。生態毒性に関するテストプランとしては、表19に示すが、すでに情報のある2, α -ジクロロトルエンを含めて信頼性の高いデータを再度入手した方がよい。

新たな試験の実施については、試験溶液中での被験物質(親物質)の不安定性を考慮し、保存溶液は用いないこと(試験直前に試験用液を調整すること)、藻類生長阻害試験にあつてはpHの変動により加水分解速度が異なる可能性が高いため初期藻類濃度を下げること、さらに可能ならば、分解産物の濃度を測定すること、等について留意すること。

表19. ジクロロトルエンのカテゴリーアプローチのテストプラン

物質情報	物質名	2, α -ジクロロトルエン	3, α -ジクロロトルエン	4, α -ジクロロトルエン
	CAS No.	611-19-8	620-20-2	104-83-6
				

環境運命	安定性	既存情報あり	構造類似物である2, α -ジクロロトルエンから類推	加水分解性については構造類似物である2, α -ジクロロトルエンから類推。 生分解性試験における既存情報あり
	3-2.モニタリングデータ	—	—	—
	3-3.好氣的生分解	既存情報あり(難分解)	構造類似物である2, α -ジクロロトルエンから推定(難分解)	既存情報あり(難分解)
	3-4.BOD5、COD	—	—	—
	3-5.生物濃縮	分解産物であるo-クロロベンジルアルコール(低濃縮性)から類推。	構造類似物である2, α -ジクロロトルエンから推定:m-クロロジェンジルアルコールの分配係数より推定	構造類似物である2, α -ジクロロトルエンから推定:p-クロロジェンジルアルコールの分配係数より推定
4 環境毒性	4-1.魚類への急性毒性	既存情報(参考値)	構造類似物である2, α -ジクロロトルエン(参考値)および/もしくは4, α -ジクロロトルエンの結果より類推	試験実施(2, α -ジクロロトルエンの既存情報と比較)
	4-2.ミジンコへの急性毒性	48hr-EC50=0.38 (OECD-TG-202, Daphnia magna)	構造類似物である2, α -ジクロロトルエン(参考値)および/もしくは4, α -ジクロロトルエンの結果より類推	試験実施(2, α -ジクロロトルエンの既存情報と比較)
	4-3.藻類への毒性	既存情報(参考値)	構造類似物である2, α -ジクロロトルエン(参考値)および/もしくは4, α -ジクロロトルエンの結果より類推	試験実施(2, α -ジクロロトルエンの既存情報と比較)
	4-4.微生物への毒性	—	—	—
	4-5.水生生物への慢性毒性	既存情報(参考値)	構造類似物である2, α -ジクロロトルエン(参考値)および/もしくは4, α -ジクロロトルエンの結果より類推	試験実施(2, α -ジクロロトルエンの既存情報と比較)
	4-6.陸生生物への毒性	—	—	—

4-7.物理的影響のモニタリング	—	—	—
4-8.生体内変換と動態	—	—	—

4-2-3. ヒト健康影響

表20にα-ジクロロトルエンのヒト健康影響に関する調査結果を示す。

表20. α-ジクロロトルエンの健康影響に関するマトリックス

試験項目	2, α-ジクロロトルエン	3, α-ジクロロトルエン	4, α-ジクロロトルエン
急性経口 LD50	ラット: ♂♀ : 350~951 mg/kg	*	マウス: 790 mg/kg *1 1, 160 mg/kg (マウス) *2 1, 080 mg/kg (ラット♂) *2 1, 700 mg/kg (ラット♀) *2 5, 620 mg/kg (モルモット) *2
急性吸入 LC50	ラット: ♂♀ 2.8 mg/L(4h) (OECD403)	*	*
急性経皮 LD50	ウサギ: ♂ 1, 700 ♀ 2, 200 mg/kg ラット: ♂♀ >2, 000 mg/kg	*	*
皮膚刺激性	有り	*	*
眼刺激性	有り	*	*
皮膚感作性	*	*	*
反復投与	ラット、強制経口 ♂: 交配前14日~45日間 ♀: 交配前14日~哺育4日 0, 2, 10, 50 mg/kg bw/day NOAEL: ♂2, ♀10 mg/kg bw/day 直接刺激による前胃の病変等 (OECD422) GLP	*	♀ラット、経口*2 2ヶ月間 0, 1.7, 17, 170 mg/kg bw/day 1.7 mg/kg bw/day
	ラット、吸入6h・4w (5d/w) 0, 0.01, 0.03, 0.10 mg/L NOAEL: ♂♀0.03 mg/L 直接刺激による気管支等の病変 (OECD412) GLP	*	
AMES	陰性(S9+), 陰性(S9-) 陰性(S9+), 弱い陽性(S9-) (OECD471) GLP	*	陽性*3
染色体	陽性(S9+), 陽性(S9-) (OECD473) GLP	*	陽性*3
<i>in vivo</i> 小核	陰性 (OECD474) GLP	*	*
発がん性	*	—	*

生殖発生	ラット、強制経口 ♂：交配前14日～45日間 ♀：交配前14日～哺育4日 0, 2, 10, 50 mg/kg bw/day NOAEL：♂♀50 mg/kg bw/day 影響なし (OECD422)GLP	*	*
その他			

*：報告なし、*1：14906の化学商品、*2：MDL Toxicity Database、*3：既存点検データ。

注：2, α-ジクロロトルエン (CAS 611-19-8) はOECD HPV (SIAM 17) にて評価済み。

4-2-3-1. 経口急性毒性

表21に経口急性毒性のデータを示す。

表21. α-ジクロロトルエンの経口急性毒性試験の概略

	試験動物	LD50	所見
2, α-ジクロロトルエン (オルト異性体)*1	ラット	♂♀：350～951 mg/kg	潮紅、流涙、流涎、軟便、 自発運動低下、歩行異常、 胃の病変
4, α-ジクロロトルエン (パラ異性体)*2	マウス	790 mg/kg	不明
	マウス	1,160 mg/kg	
	ラット	1,080 mg/kg (♂) 1,700 mg/kg (♀)	呼吸障害・傾眠
	モルモット	5,620 mg/kg	

*1：化学物質毒性試験報告, 7,489-491 (1997)

*2：RTECS in MDL Toxicity Database

オルト及びパラ異性体の経口急性毒性の報告があるが、ラットの経口急性毒性はオルト体がやや低い

値が見られているが、ほぼ同様な傾向が見られることから、メタ体も同様な毒性を示すと考えられた。

4-2-3-2. 吸入急性毒性

表22に吸入急性毒性試験の調査結果を示す。

表22. 吸入急性毒性試験の概略

	試験動物	LC50	所見
2, α-ジクロロトルエン (オルト異性体)*1	ラット	♂♀ 2.8 mg/L (4h)	喘ぎ呼吸、失調性歩行、チアノーゼ、角膜混濁等

*1：RTECS in MDL Toxicity Database

オルト異性体のみに吸入急性毒性結果があり、劇

物指定範囲の2.0～10 mg/L (4h)であった。

4-2-3-3. 経皮急性毒性

表 2 3 に経皮急性毒性の調査結果を示す。

表 2 3. 経皮急性毒性試験の概略

	試験動物	LD50	所見
2, α -ジクロロトルエン (オルト異性体) *1	ウサギ	♂ 1,700 ♀ 2,200 mg/kg	運動失調、振戦、呼吸低下、低体温、皮膚の病変等
	ラット	♂♀ >2,000 mg/kg	眼漏、軟便、自発運動低下、皮膚刺激、紅斑、浮腫、落屑等

*1 : RTECS in MDL ToxicityDatabase

オルト体のみ報告があり、ウサギとラットの急性毒性としては高い値であるが、皮膚刺激性の所見が認められている。

4-2-3-4. 皮膚・眼刺激性及び皮膚感作性

表 2 4. に皮膚・眼刺激性試験の調査結果を示す。

表 2 4. 皮膚・眼刺激性及び皮膚感作性試験の概略

試験項目	2, α -ジクロロトルエン*1 (オルト異性体)
皮膚刺激性	有り
眼刺激性	有り
皮膚感作性	—

*1 : RTECS in MDL ToxicityDatabase

オルト体のみ報告があり、皮膚・眼刺激性が疑われる。皮膚感作性については、どの異性体の報告も無かった。

4-2-3-5. 反復投与毒性

表 2 5 に反復投与毒性の調査結果を示す。

表 2 5. 反復投与毒性試験の概略

	試験動物	投与経路・期間・用量	所見	NOEL/NOAEL
2, α -ジクロロトルエン*1 (オルト異性体)	ラット	強制経口 ♂ : 交配前 14 日～45 日間 ♀ : 交配前 14 日～哺育 4 日 0, 2, 10, 50 mg/kg bw/day	前胃の病変等	♂ : 2 mg/kg bw/day ♀ : 10 mg/kg bw/day
4, α -ジクロロトルエン (パラ異性体)	♀ラット	経口 2 ヶ月間 0, 1.7, 17, 170 mg/kg bw/day	有色素性/有核赤血球細胞、CNS、アミノ基転位酵素の変化	1.7 mg/kg

*1 : 化学物質毒性試験報告 7, 492-502 (1999)

*2 : RTECS in MDL ToxicityDatabase

オルト体の反復経口投与毒性の NOEL は、雄で 2 mg/kg bw/day、雌で 10 mg/kg bw/day で、パラ異性体の NOAEL は雌で 1.7 mg/kg bw/day とほぼ同様の値

を示しているが、オルト体に比しパラ体では、血液や肝への作用が見られている。しかし、パラ体の文献の信頼性が低いことからパラ異性体の試験が望ま

れる。

4-2-3-6. 遺伝毒性

表26に遺伝毒性の調査結果を示す。

表26. 遺伝毒性試験の概略

	AMES	染色体	<i>in vivo</i> 小核
2, α -ジクロロトルエン (オルト異性体)	陰性(S9+/-)* ¹ 陰性(S9+), 弱い陽性(S9-)* ²	陽性(S9+/-)* ²	陰性* ³
4, α -ジクロロトルエン (パラ異性体)	陰性* ⁴	陽性* ⁵	

*1: RTECS in MDL ToxicityDatabase

*2: 化学物質毒性試験報告 7, 503-508 (1999)

*3: RTECS in MDL ToxicityDatabase

*4: 平成16年度 既存点検事業報告

*5: 平成16年度 既存点検事業報告

AMES試験では、オルト及びパラ体で陰性の報告があるが、オルト体のS9-の条件において弱い陽性結果が認められた。

染色体異常試験では、オルト及びパラ体ともに陽性であった。

*In vivo*小核試験では、オルト体で陰性の報告があった。

以上のことから、遺伝毒性試験に関しては、3つの異性体についてAMES試験は陰性、染色体試験では陽性である可能性が示唆された。

4-2-3-7. 生殖発生毒性

表27に生殖発生毒性試験の調査結果を示す。

表27. 生殖発生毒性試験の概略

	試験動物	投与経路・期間・用量	所見	NOAEL
2, α -ジクロロトルエン* ¹ (オルト異性体)	ラット	強制経口 ♂: 交配前14日～45日間 ♀: 交配前14日～哺育4日 0, 2, 10, 50 mg/kg bw/day	生殖発生毒性なし	50 mg/kg bw/day

*1: 化学物質毒性試験報告 7, 492-502 (1999)

オルト異性体のみ報告があり、50 mg/kg bw/dayまで生殖発生毒性は認められなかった。

以上のことから、パラ体の生殖発生毒性試験の実施が望まれる。

4-2-4. 小括

α -ジクロロトルエンの3つの異性体におけるカテゴリーアプローチの適用については、物理化学性状分野及び環境運命分野に関し、オルト異性体及びパラ異性体の蒸気圧測定、どれか一つの異性体について分

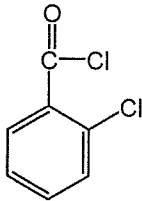
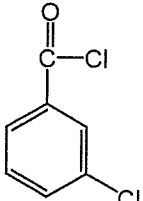
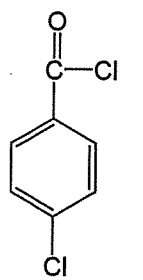
配係数の追加測定、パラ体の環境毒性試験及び反復生殖併合試験の追加試験を実施し、データギャップ補完することで可能と考えられる。

4-3. クロロベンゾイルクロリド

4-3-1. 物理化学的性状

クロロベンゾイルクロリドの調査結果を表 28 に示す。

表 28. クロロベンゾイルクロリドの物理化学性状、環境残留性

	オルト体	メタ体	パラ体
一般情報			
名称	<i>o</i> -クロロベンゾイルクロリド	<i>m</i> -クロロベンゾイルクロリド	<i>p</i> -クロロベンゾイルクロリド
別名	2-クロロベンゾイルクロリド	3-クロロベンゾイルクロリド	4-クロロベンゾイルクロリド
CAS 番号	609-65-4	618-46-2	122-01-0
構造式			
外観	液体	—	液体
物理化学性状			
融点	-4 °C (化学大辞典) -4 °C (CRC) -4 °C (SRC)	—	16 °C (化学大辞典) 16 °C (有機化合物辞典) 16 °C (CRC) 16 °C (SRC)
	計算値 32.65 °C (MPBPWIN v. 1.41)	計算値 32.65 °C (MPBPWIN v. 1.41)	計算値 32.65 °C (MPBPWIN v. 1.41)
沸点	235-238 °C (化学大辞典) 225 °C (有機化合物辞典) 238 °C (CRC) 238 °C (SRC)	225 °C (化学大辞典) 225 °C (CRC) 225 °C (HPROC) 225 °C (SRC)	220-222 °C (化学大辞典) 220-222 °C (有機化合物辞典) 222 °C (CRC) 222 °C (SRC)
	計算値 230.79 °C (MPBPWIN v. 1.41)	計算値 230.79 °C (MPBPWIN v. 1.41)	計算値 230.79 °C (MPBPWIN v. 1.41)
密度	—	—	d ₄ ²⁰ 1.367 (有機化合物辞典) d ₂₀ 1.3770 (CRC)
	計算値 一般的に認められた計算方法はない。	計算値 一般的に認められた計算方法はない。	計算値 一般的に認められた計算方法はない。
蒸気圧	—	1.40 × 10 ⁻¹ mmHg at 25 °C (HPROC、SRC)	—
	計算値 0.0514 mmHg at 25 °C (MPBPWIN v. 1.41)	計算値 0.0811 mmHg at 25 °C (MPBPWIN v. 1.41)	計算値 0.118 mmHg at 25 °C (MPBPWIN v. 1.41)
分配係数	—	—	—
	計算値	計算値	計算値

	2.08 (KOWWIN v. 1.67)	2.08 (KOWWIN v. 1.67)	2.08 (KOWWIN v. 1.67)
対水溶解度	—	—	加水分解性のため、測定不可 (既存点検)
	計算値 1969.2 mg/L at 25 °C (WATERNT v. 1.01) 972.3 at 25 °C (WSKOWWIN v. 1.41)	計算値 1969.2 mg/L at 25 °C (WATERNT v. 1.01) 972.3 mg/L at 25 °C (WSKOWWIN v. 1.41)	計算値 1969.2 mg/L at 25 °C (WATERNT v. 1.01) 972.3 mg/L at 25 °C (WSKOWWIN v. 1.41)
解離定数	解離性基なし	解離性基なし	解離性基なし
	計算値 —	計算値 —	計算値 —
環境残留性			
光分解性	—	—	—
	計算値 半減期 : 8.554 日 (AOPWIN v. 1.91)	計算値 半減期 : 18.500 日 (AOPWIN v. 1.91)	計算値 半減期 : 8.554 日 (AOPWIN v. 1.91)
加水分解性	—	—	加水分解性あり。半減期は 37 分以下 (簡易的な試験結果)。 (既存点検)
	計算値 一般的に認められた計算方法はない。	計算値 一般的に認められた計算方法はない。	計算値 一般的に認められた計算方法はない。
環境分布	—	—	—
	計算値 Air : 6.89 % Water : 27.8 % Soil : 65.2 % Sediment : 0.118 % (EPIWINNT v. 3.12)	計算値 Air : 7.85 % Water : 27.6 % Soil : 64.5 % Sediment : 0.117 % (EPIWINNT v. 3.12)	計算値 Air : 6.89 % Water : 27.8 % Soil : 65.2 % Sediment : 0.118 % (EPIWINNT v. 3.12)
ヘンリー定数	—	—	—
	計算値 $9.75 \times 10^5 \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$ at 25 °C(HENRYWIN v. 3.10)	計算値 $9.75 \times 10^5 \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$ at 25 °C(HENRYWIN v. 3.10)	計算値 $9.75 \times 10^5 \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$ at 25 °C(HENRYWIN v. 3.10)
生分解性 生分解性	—	—	BOD 分解度 : 0 % 4-クロロ安息香酸が残留 (既存点検)
	計算値 一般的に認められた計算方法はない。	計算値 一般的に認められた計算方法はない。	計算値 一般的に認められた計算方法はない。
濃縮性	—	—	—
	計算値 BCF : 7.987 (BCFWIN v. 2.15)	計算値 BCF : 7.987 (BCFWIN v. 2.15)	計算値 BCF : 7.987 (BCFWIN v. 2.15)

—はデータが入手できなかったことを示す。

本物質群において、メタ異性体の融点を得られていない。融点は沸点と異なり、異性体間で大きく異なることがあり、実測することが望ましい。密度に

関しては、パラ異性体の値のみ得られている。一般的に密度は、オルト、メタ、パラの異性体間で大きく異なる場合が多く、カテゴリー評価が可能で

あると考えられる。また、密度はOECD 高生産量
既存化学物質点検プログラム及びJ チャレンジプロ
グラムの必須項目とはされていない。

蒸気圧に関しては、メタ異性体のみ実測値が得ら
れており、他の異性体の蒸気圧は入手できていない。
このことより、オルト異性体及びパラ異性体の蒸気
圧測定も行うことが望ましい。また、分配係数に関
しては、全ての異性体において実測値が得られてい
ない。経験的に、分配係数は異性体間で大きく変動
することは少なく、どれか一つの異性体の測定が必
要であると考えられる。

環境残留性分野では、本物質群はその構造より加
水分解することが予想されるものの、正確な加水分
解半減期はどの異性体についても測定されていない。

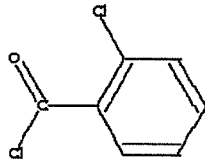
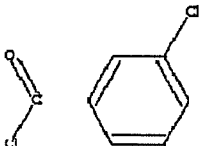
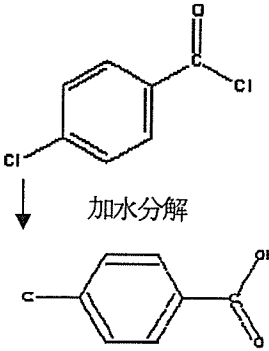
これにより、少なくともどれか一つの異性体におい
て、半減期の測定が必要である。また、生分解性
については、パラ異性体において難分解という信頼性
のあるデータが得られているものの、この他の異性
体に関してはデータが得られていない。しかしなが
ら、オルト異性体及びメタ異性体とも、パラ異性体
と同様にクロロ安息香酸に変化する経路を辿ると予
想される。これにより、生分解性はカテゴリーとし
ての評価が可能と考えられる。

以上の結果より、本物質群においては、物理化学
性状分野及び環境残留性分野に関し、幾つかの追加
測定を実施することにより、カテゴリーとしての評
価が可能と考えられる。

4-3-2. 環境運命及び環境毒性

表 29 に環境運命及び環境毒性の調査結果を示す。

表 29. クロロベンゾイルクロライドカテゴリーの環境運命及び環境毒性

物質情報	物質名	2-クロロベンゾイルクロライド	3-クロロベンゾイルクロライド	4-クロロベンゾイルクロライド
	CAS No.	609-65-4	618-46-2	122-01-0
				 加水分解 CAS 74-11-3
環境運命	安定性			・被験物質は加水分解し、4-クロロ安息香酸 (3-1424,CAS; 74-11-3) を生成し、生分解することを確認した。 ・4-クロロ安息香酸の逆転条件試験結果 (28 日後) TOC 100, 90, 100 (%) HPLC 100,100, 100 (%)
	モニタリングデータ			
	好氣的生分解			
	BOD5、COD			TOC 100%

	生物濃縮			
環境毒性	魚類への急性毒性			
	ミジンコへの急性毒性			
	藻類への毒性			
	微生物への毒性			
	水生生物への慢性毒性			
	陸生生物への毒性			
	物理的影響のモニタリング			
	生体内変換と動態			

4-3-2-1. 環境中での動態

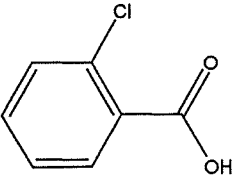
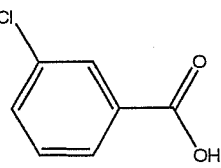
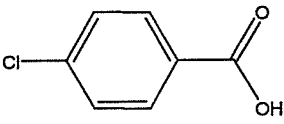
クロロベンゾイルクロライドは水中で速やかに加水分解してクロロ安息香酸と塩酸を生じる。2-クロロベンゾイルクロライドは2-クロロ安息香酸 (CAS 118-91-2)、3-クロロベンゾイルクロライドは3-クロロ安息香酸 (CAS 535-80-8)、そして4-クロロベンゾイルクロライドは4-クロロ安息香酸 (CAS 74-11-3) を生じる。したがって、環境中ではこれらクロロ安息香酸の異性体についての既存情報を以下に示す (表30)。

生分解性試験結果は4-クロロ安息香酸の逆転法による試験結果が得られており、本質的生分解性が認

められておりTOCベースで100%分解との報告がある。好氣的生分解結果は別にo-クロロ安息香酸の結果があるが、難分解と判定されている。ただし、クロロベンゾイルクロライドおよびクロロ安息香酸は、4-クロロ安息香酸の結果から本質的には生分解する物質群であると推定される (BIOWIN v4.02)。

クロロベンゾイルクロライドおよびクロロ安息香酸の生物濃縮生については、2-クロロ安息香酸でのみ実測値があり、低濃縮性と判定されている。オクタノール水分配係数からはいずれの物質も濃縮性に関する懸念は低いと推定される。

表30. クロロ安息香酸の3構造異性体の既存情報

物質情報	物質名	2-クロロ安息香酸	3-クロロ安息香酸	4-クロロ安息香酸
	CAS No.	118-91-2	535-80-8	74-11-3
	構造式			
物理化学的性状	2-1.融点	142 °C		
	2-2.沸点	287 °C		
	2-3.密度	1.544		
	2-4.蒸気圧	0.00066 mmHg	0.00233 mmHg(推定)	0.00233 mmHg(推定)
	2-5.分配係数	2.05	2.68(実測値)	2.65(実測値)

	2-6.水溶解度と解離定数	2090 mg・L(実測値) pKa=2.89(実測値)	450 mg/L(実測値) pKa=3.81(実測値)	72mg/L(実測値) pKa=3.98(実測値)
環境運命	3-1.安定性			・4-クロル安息香酸の逆転条件試験結果(28日後) TOC 100, 90, 100 (%) HPLC 100,100, 100 (%)
	3-2.モニタリングデータ			
	3-3.好氣的生分解	難分解 (BOD=5.6%, 14 日間)		TOC 100%
	3-4.BOD5、COD			
	3-5.生物濃縮	低濃縮 BCF < 10 (コイ、6週間)		

クロロベンゾイルクロライドの環境中での分布予測を表31に示す。カテゴリー構成員の3異性体は同様に分布すると予測された。

以上のように、クロロベンゾイルクロライドの3異性体は環境中で類似した挙動を示し、カテゴリーアプローチは適用できると考察される。

表31. Fugacity モデル (Level III) によるクロロベンゾイルクロライド予測環境分布 (%)

物質名	2-クロロベンゾイルクロライド	3-クロロベンゾイルクロライド	4-クロロベンゾイルクロライド
大気	6.9	7.9	6.9
水	28	28	28
土壌	65	65	65
底質	0.1	0.1	0.1

4-3-2-2. 水生生物への有害性情報

クロロベンゾイルクロライドの3異性体およびそれらの加水分解産物であるクロル安息香酸3異性体に関する水生生物に対する生態毒性値はいずれも入手できなかった。そこで、表32に定量的構想活性相関による推定値を示す。クロロベンゾイルクロライドについては魚留急性毒性のみ、クロル安息香酸については魚類、甲殻類、藻類の急性および慢性毒性が推定できた。この表で示す通り、異性体間に毒性学上の有意

な差異があるとの情報は入手できず、それぞれは類似した毒性値を示すとの予測であった。なお、クロル安息香酸についてo-クロル安息香酸の毒性値が全体として高い数値になっているのは、構造活性相関による毒性値推定の過程で用いたオクタノール水分配係数の違いを反映したものであり、毒性メカニズムそのものに起因したものではない。

表32. 定量的構想活性相関による水生生物に対する毒性値予測 (ECOSAR v0.99h)

(mg/L)

		2-クロロベンゾイルクロライド	3-クロロベンゾイルクロライド	4-クロロベンゾイルクロライド
--	--	-----------------	-----------------	-----------------

魚類急性	96hLC50	34	34	34
甲殻類急性	48hEC50	-	-	-
藻類急性	96hEC50	-	-	-
魚類慢性	30dChV	-	-	-
魚類慢性	90dChV	-	-	-
甲殻類慢性	21dChV	-	-	-
藻類慢性	96hChV	-	-	-
		2-クロル安息香酸	3-クロル安息香酸	4-クロル安息香酸
魚類急性	96hLC50	786	377	377
甲殻類急性	48hEC50	853	418	418
藻類急性	96hEC50	539	269	269
魚類慢性	30dChV	104	53	53
魚類慢性	90dChV	-	-	-
甲殻類慢性	16dChV	47	-	-
藻類慢性	96hChV	196	36	36

4-3-2-3. カテゴリーアプローチ適用可能性の考察

クロロベンゾイルクロライドカテゴリーに属する3つの異性体は、水環境中での挙動することが予測される。また、それぞれはクロル安息香酸の3異性体に急速に分解されるため、それらを含めた6つの化学物質は同じカテゴリーとして評価する事が可能である。

クロロベンゾイルクロライドは水環境中で塩酸を容易に生じることから、水生生物への生態毒性については、本物質群が一時期に大量に水中に投入されるような暴露状況ではpHの急速な低下が予想され、物理化学的影響を受ける事になる。ただし低濃度汚染の場合、その影響は環境の緩衝作用により軽減されることが予測され化学物質の真の毒性を評価するためにはクロル安息香酸の影響を評価すべきである。

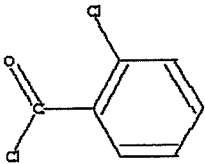
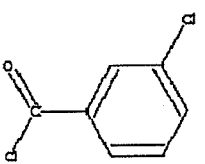
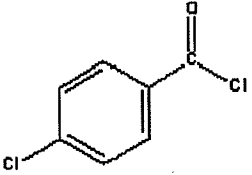
クロル安息香酸についても、酸性物質であり高濃度では著しいpHの低下が懸念されるものの（p

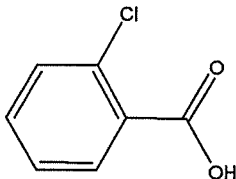
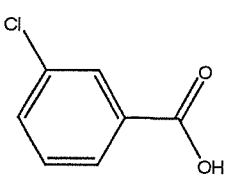
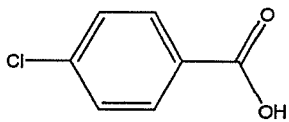
Ka=2.89-3.98）、通常環境ではクロル安息香酸イオンとして存在することが予測される。したがって、物理化学的影響（低pH）と真の毒性を分けて評価するためには、ナトリウム塩などの水中でpHの低下を起こさない適当な塩を用いて水生生物への毒性を評価すべきである。

このことから、同カテゴリーアプローチとして適用に当たっては、クロロベンゾイルクロライド、クロル安息香酸、およびクロル安息香酸塩（Na, K, などの生物への毒性が懸念されないものに限る）は同時に評価してもよい。

クロロベンゾイルクロライドのカテゴリーアプローチにおけるテストプランを表3-3に示す。ただし、クロル安息香酸およびその塩を加えたカテゴリーとしてもよいと考えられる。

表3-3. クロロベンゾイルクロライドのカテゴリーアプローチのテストプラン

物質名	2-クロロベンゾイルクロライド	3-クロロベンゾイルクロライド	4-クロロベンゾイルクロライド
CAS No.	609-65-4	618-46-2	122-01-0
			
物質名	o-クロル安息香酸	m-クロル安息香酸	p-クロル安息香酸
CAS No.	118-91-2	535-80-8	74-11-3

			
3-1.安定性	類似物質である4-クロロベンゾイルクロライドおよび o -クロル安息香酸から推定	類似物質である4-クロロベンゾイルクロライドおよび o -クロル安息香酸から推定	既存情報による
3-2.モニタリングデータ			
3-3.好氣的生分解	難分解 (BOD=5.6%, 14日間)であるが、類似物質である4-クロロベンゾイルクロライドおよび o -クロル安息香酸から推定	難分解 (BOD=5.6%, 14日間)であるが、類似物質である4-クロロベンゾイルクロライドおよび o -クロル安息香酸から推定	既存情報 TOC 100%による
3-4.BOD5、COD			
3-5.生物濃縮	既存情報、低濃縮 BCF < 10 (コイ、6週間)による	類似物質である o -クロル安息香酸(低濃縮)より推定	類似物質である o -クロル安息香酸(低濃縮)より推定

4-3-3. ヒト健康影響

表34にクロロベンジルクロライドのヒト健康影響に関する調査結果を示す。

表34. クロロベンジルクロライドの健康影響に関するマトリックス

物質名	2-クロロベンゾイルクロライド	3-クロロベンゾイルクロライド	4-クロロベンゾイルクロライド
IUPAC Name	2-chlorobenzoyl chloride	3-chlorobenzoyl chloride	4-chlorobenzoyl chloride
CAS No.	609-65-4	618-46-2	122-01-0
急性経口	*	*	LD50 マウス: 790 mg/kg ^{*1}
急性経皮	*	*	*
皮膚刺激性	有り ^{*1}	*	有り ^{*1}
眼刺激性	有り ^{*1}	*	有り ^{*1}
皮膚感作性	腐食性 ^{*1}	*	腐食性 ^{*1}
反復投与	*	*	モルモット静注 ^{*2} TDLO: 0.24 mg/kg/12W-I 過敏症、皮膚炎・刺激
遺伝毒性 (AMES)	*	*	陰性(S9±) ^{*3}
遺伝毒性 (染色体)	*	*	陰性(S9±) ^{*3}

遺伝毒性(in vivo)	*	*	*
発がん性	*	*	*
生殖発生	*	*	*
その他	*	*	*

*:報告なし

*1:14504 の化学商品 化学工業日報社 P905-6

*2: Journal of Experimental Medicine 64,625 (1936)

*3:平成 16 年度既存点検事業報告

4-3-3-1. 急性毒性試験

クロロベンゾイルクロライドの急性毒性試験については4-クロロベンゾイルクロライドのみに報告があり、2-クロロベンゾイルクロライドの経口急性毒性試験の実施が望まれる。

4-3-3-2. 皮膚・眼刺激性及び皮膚感作性

皮膚・眼刺激性に関しては、皮膚及び眼粘膜への刺激性及び皮膚感作性において2-クロロベンゾイルクロライドと4-クロロベンゾイルクロライドに報告があり、3-クロロベンゾイルクロライドにも同様な作用が考えられる。

4-3-3-3. 反復投与毒性

モルモットの静脈内投与の報告のみであり、信頼性も低いことから、2-クロロベンゾイルクロライドと4-クロロベンゾイルクロライドの経口反復投与試験の実施が望まれる。

4-3-3-4. 遺伝毒性

4-クロロベンゾイルクロライドでの AMES 試験及び染色体試験の報告があり、ともに陰性との結果であるが、その他異性体についての報告が無いことから、2-クロロベンゾイルクロライドの試験実施が望まれる。

4-3-3-5. 発がん性

発がん性試験について全ての化合物群において報告はなかった。

4-3-3-6. 生殖発生毒性

生殖発生毒性試験について全ての化合物群において報告は無いことから、2-クロロベンゾイルクロライドと4-クロロベンゾイルクロライドの生殖発生毒性試験の実施が望まれる。

4-3-4. 小括

クロロベンゾイルクロライドの異性体に関しては、情報が少なくデータギャップも多いことから、現在の情報からはカテゴリーアプローチを行うことは出来ない。今後の対応として下記の試験を追加すること

・物理化学的性状

3-クロロベンゾイルクロライドの融点、
2-と4-クロロベンゾイルクロライドの蒸気圧で可能性になると思われる。

どれか一つの化合物の分配係数

どれか一つの化合物の加水分解半減期

・健康影響

2-クロロベンゾイルクロライドの経口急性毒性試験

2-と4-クロロベンゾイルクロライドの反復経口・生殖発生併合試験

2-クロロベンゾイルクロライドの AMES 試験及び染色体試験

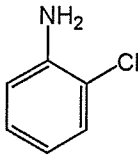
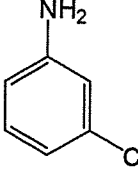
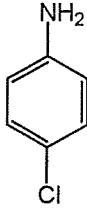
4-4. クロロアニリン

4-4-1. 物理化学的性状

クロロアニリンの調査結果を以下の表 3 5 に示す。

表 3 5. クロロアニリンの物理化学性状、環境残留性

	オルト体	メタ体	パラ体
一般情報			
名称	<i>o</i> -クロロアニリン	<i>m</i> -クロロアニリン	<i>p</i> -クロロアニリン

別名	2-クロロアニリン	3-クロロアニリン	4-クロロアニリン
CAS 番号	95-51-2	108-42-9	106-47-8
構造式			
外観	液体	液体	固体
物理化学性状			
融点	-2 °C (化学大辞典) -1.94 °C (化学辞典) -2 °C (有機化合物辞典) -1.94 °C (MERCK) -1.9 °C (CRC) -1.94 °C (HPROC) -14 °C (HSDB) -14 °C (SRC)	-10.4 °C (化学大辞典) -10.4 °C (化学辞典) -10.4 °C (MERCK) -10.28 °C (CRC) -10.3 °C (HPROC) -10.4 °C (HSDB) -10.4 °C (SRC)	70・71 °C (化学大辞典) 72.5 °C (化学辞典) 70・71 °C (有機化合物辞典) 72.5 °C (MERCK) 70.5 °C (CRC) 69.5 °C (HAWLEY) 72.5 °C (HPROC) 72.5 °C (HSDB) 72.5 °C (SRC)
	計算値 24.41 °C (MPBPWIN v. 1.41)	計算値 24.41 °C (MPBPWIN v. 1.41)	計算値 24.41 °C (MPBPWIN v. 1.41)
沸点	208.8 °C (化学大辞典) 208.8 °C (化学辞典) 208.8 °C (有機化合物辞典) 208.84 °C (MERCK) 208.8 °C (CRC) 208.84 °C (HPROC) 208.8 °C (HSDB) 208.8 °C (SRC)	230.5 °C (化学大辞典) 230.5 °C (化学辞典) 230.5 °C (MERCK) 230.5 °C (CRC) 230.5 °C (HPROC) 230.5 °C (HSDB) 230.5 °C (SRC)	232 °C (化学大辞典) 232 °C (化学辞典) 232 °C (有機化合物辞典) 232 °C (MERCK) 232 °C (CRC) 232 °C (HPROC) 232 °C (HSDB) 232 °C (SRC)
	計算値 216.05 °C (MPBPWIN v. 1.41)	計算値 216.05 °C (MPBPWIN v. 1.41)	計算値 216.05 °C (MPBPWIN v. 1.41)
密度	d ₄ ²⁰ 1.21253 (化学大辞典) d ₄ ²⁰ 1.2125 (化学辞典) d ₄ ²⁰ 1.21253 (有機化合物辞典) d ₄ ²² 1.2114 (MERCK) d ₄ ²⁰ 1.213 (HAWLEY) d ₄ ²² 1.2114 (有機化合物辞典)	d ₁₅ ¹⁵ 1.2225 (化学大辞典) d ₄ ²² 1.2150 (化学辞典) d ₄ ²² 1.2150 (MERCK) d ₄ ²⁰ 1.2161 (CRC) d ₄ ²² 1.2150 (HSDB)	d ₁₉ 1.427 (化学大辞典) d ₄ ¹⁹ 1.427 (有機化合物辞典) d ₄ ⁷⁷ 1.169 (MERCK) d ₁₉ 1.429 (CRC) d 1.17 (HAWLEY) d ₄ ⁷⁷ 1.169 (HSDB)
	計算値 一般的に認められた計算方法はない。	計算値 一般的に認められた計算方法はない。	計算値 一般的に認められた計算方法はない。
蒸気圧	2.04 × 10 ⁻¹ mmHg at 25 °C (HPROC、HSDB、SRC)	5.40 × 10 ⁻² mmHg at 20 °C (HPROC) 0.066 mmHg at 25 °C	2.70 × 10 ⁻² mmHg at 26 °C (HPROC、SRC) 0.071 mmHg at 25 °C

		(HSDB、SRC)	(HSDB)
	計算値 0.232 mmHg at 25 °C (MPBPWIN v. 1.41)	計算値 0.0762 mmHg at 25 °C (MPBPWIN v. 1.41)	計算値 0.0237 mmHg at 25 °C (MPBPWIN v. 1.41)
分配係数	1.90 (HPROC、HSDB、SRC)	2.03 (既存点検) 1.88 (HPROC、HSDB、SRC)	1.88 (既存点検) 1.83 (HPROC) 1.83 (HSDB、SRC)
	計算値 1.72 (KOWWIN v. 1.67)	計算値 1.72 (KOWWIN v. 1.67)	計算値 1.72 (KOWWIN v. 1.67)
対水溶解度	水に不溶 (化学大辞典) 水に不溶 (化学辞典) 水に不溶 (有機化合物辞典) Practically insoluble in water (MERCK) Insoluble in water (CRC) 8.17 × 10 ³ mg/L at 25 °C (HPROC、HSDB) 8160 mg/L at 25 °C (SRC)	水に不溶 (化学大辞典) Practically insoluble in water (MERCK) Insoluble in water (CRC) 5.40 × 10 ³ mg/L at 20 °C (HPROC、HSDB、SRC) 4.0 g/L at 25 °C (既存点検)	熱水に可溶 (化学大辞典) 熱水に可溶 (化学辞典) Soluble in water (CRC) Soluble in hot water (HAWLEY) 3.90 × 10 ³ mg/L at 25 °C (HPROC、HSDB、SRC) 3.4 g/L at 25 °C (既存点検)
	計算値 5232.4 mg/L at 25 °C (WATERNT v. 1.01) 2241 mg/L at 25 °C (WSKOWWIN v. 1.41)	計算値 5232.4 mg/L at 25 °C (WATERNT v. 1.01) 2331 mg/L at 25 °C (WSKOWWIN v. 1.41)	計算値 5232.4 mg/L at 25 °C (WATERNT v. 1.01) 2572 mg/L at 25 °C (WSKOWWIN v. 1.41)
解離定数	2.66 at 25 °C (HPROC、HSDB、SRC)	3.52 (HPROC、HSDB、SRC) 3.50 at 26 °C (既存点検)	3.98 at 25 °C (HPROC、HSDB、SRC) 3.96 at 26 °C (既存点検)
	計算値 2.67 (SPARC v. 3.1)	計算値 3.73 (SPARC v. 3.1)	計算値 4.06 (SPARC v. 3.1)
環境残留性			
光分解性	—	—	—
	計算値 半減期 : 0.340 日 (AOPWIN v. 1.91)	計算値 半減期 : 0.141 日 (AOPWIN v. 1.91)	計算値 半減期 : 0.340 日 (AOPWIN v. 1.91)
加水分解性	—	—	—
	計算値 一般的に認められた計算方法はない。	計算値 一般的に認められた計算方法はない。	計算値 一般的に認められた計算方法はない。
環境分布	—	—	—
	計算値 Air : 0.532 % Water : 33.2 % Soil : 66.2 % Sediment : 0.115 % (EPIWINNT v. 3.12)	計算値 Air : 0.221 % Water : 33.7 % Soil : 66 % Sediment : 0.114 % (EPIWINNT v. 3.12)	計算値 Air : 0.376 % Water : 34.6 % Soil : 64.9 % Sediment : 0.112 % (EPIWINNT v. 3.12)
ヘンリー定数	—	1.0 × 10 ⁻⁶ atm.m ³ /mol at 25 °C (HSDB、SRC)	—

	計算値 1.41 × 10 ⁶ atm・m ³ /mol at 25 °C(HENRYWIN v. 3.10)	計算値 1.41 × 10 ⁶ atm・m ³ /mol at 25 °C(HENRYWIN v. 3.10)	計算値 1.41 × 10 ⁶ atm・m ³ /mol at 25 °C(HENRYWIN v. 3.10)
生分解性 生分解性	BOD 分解度：2.7 % (既存 点検) 分解性有り及び無しの複 数の試験結果 (HSDB)	BOD 分解度：1 % (既存点 検) 分解性有り及び無しの複 数の試験結果 (HSDB)	BOD 分解度：0 % (既存点 検) 分解性有り及び無しの複 数の試験結果 (HSDB)
	計算値 一般的に認められた計算 方法はない。	計算値 一般的に認められた計算 方法はない。	計算値 一般的に認められた計算 方法はない。
濃縮性	BCF: 2.0, 3.7 with carp (HSDB) BCF: 15.3 with zebra-fish (HSDB) BCF: 5.4 – 9.0 at 0.1 mg/L <14 – 32 at 0.01 mg/L (既存点検)	BCF: 0.8, 2.2 with carp (HSDB) BCF: 11.5 with zebra-fish (HSDB)	BCF: 0.8, 1.7 with carp (HSDB) BCF: 8.1 with zebra-fish (HSDB)
	計算値 BCF : 5.794 (BCFWIN v. 2.15)	計算値 BCF : 5.592 (BCFWIN v. 2.15)	計算値 BCF : 5.118 (BCFWIN v. 2.15)

ーはデータが入手できなかったことを示す。

本物質群については、全ての項目においてデータが入手可能であり、カテゴリ評価を行うにあたり問題はない。しかしながら、本物質群においては、パラ異性体のみが固体であり、他の異性体に比べ非常に高い融点を持つことに注意をするべきである。また、異性体間で解離定数の相違が見られることにも注意する必要がある。これは、共鳴構造の安定性により説明されると考えられる。

環境残留性分野では、全ての異性体において加水分解性のデータは得られていないが、本物質群は加水分解性を受けやすい官能基を保有しておらず、加

水分解性はないものと予想される。また、生分解性についてはオルト異性体、メタ異性体及びパラ異性体において、全て難分解であるという、信頼性のあるデータが揃っており、カテゴリ評価に問題はないと考えられる。

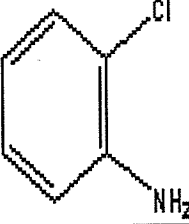
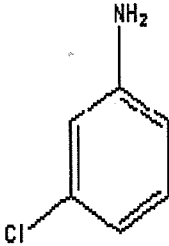
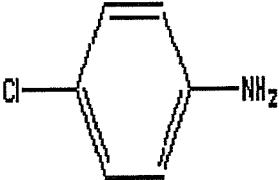
以上の結果より、本物質群においては、物理化学性・性状分野及び環境残留性分野に関し、カテゴリとしての評価が可能と考えられる。

4-4-2. 環境運命及び環境毒性

表 3 6 に環境運命及び環境毒性の調査結果を示す。

表 3 6. クロロアニリンカテゴリの環境運命及び環境毒性

物質	物質名	o-クロロアニリン	m-クロロアニリン	p-クロロアニリン
	CAS No.	95-51-2	108-42-9	106-47-8

情報				
環境運命	安定性			
	モニタリングデータ			
	好氣的生分解	2.70%	0%(HPLC)	0%(BOD,4W)
	BOD5、COD			
	生物濃縮	5.4-32(コイ)		4-8.1(ゼブラフィッシュ)
環境毒性	魚類への急性毒性	96hLC50=7.3mg/L (OECD TG 203,メダカ)	96hLC50=8.8mg/L (OECD TG 203,メダカ)	96hLC50=7.3mg/L (OECD TG 203,メダカ)
	ミジンコへの急性毒性	48hEC50=2.0mg/L (OECD TG 202, Daphnia magna)	48hEC50=0.49mg/L (OECD TG 202, Daphnia magna)	48hEC50=0.31mg/L (OECD TG 202, Daphnia magna)
	藻類への毒性	72hErC50=28mg/L (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata) 72hNOErC=3.2mg/L (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata) 72hEbC50=13mg/L (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata) 72hNOErC=3.2mg/L (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata)	72hErC50=19mg/L (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata) 72hNOErC=1.0mg/L (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata) 72hEbC50=10mg/L (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata) 72hNOErC=1.0mg/L (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata)	72hErC50=3.8mg/L (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata) 72hNOErC=0.32mg/L (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata) 72hEbC50=1.5mg/L (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata) 72hNOErC=0.32mg/L (OECD TG 201, Pseudokirchneriella subcapitata)
	微生物への毒性	—	—	—
	水生生物への慢性毒性	21dEC50=0.032mg/L (OECD TG 211, Daphnia magna)	21dEC50=0.0032mg/L (OECD TG 211, Daphnia magna)	21dEC50=0.0032mg/L (OECD TG 211, Daphnia magna)
	陸生生物への毒性	—	—	—
	物理的影響のモニタリング	—	—	—
	生体内変換と動態	—	—	—

4-4-2-1. 環境中での動態

クロロアニリンは、水中で安定で、好氣的生分解性は いずれも低く難分解性物質と判定されている。

クロロアニリンの生物濃縮生については、*o*-クロロアニリンおよび*p*-クロロアニリンの2つの異性体で実測されており何れも低濃縮と判定されているオクタノール水分配係数から判断して残る*m*-クロロアニリンもまた低濃縮と予測される。

クロロベンゾイルクロライドの環境中での分布予

測を表37に示す。カテゴリー構成員の3異性体は同様に分布すると予測され、本物質はいずれの異性体も主な分布は土壌、次いで水中と予測された。

以上のように、クロロベンゾイルクロライドの3異性体は環境中で類似した挙動を示し、カテゴリーアプローチは適用できると考察される。

表37. Fugacity モデル (Level III) によるクロロアニリン
予測環境分布 (%)

物質名	<i>o</i> -クロロアニリン	<i>m</i> -クロロアニリン	<i>p</i> -クロロアニリン
大気	0.5	0.2	0.4
水	33	34	35
土壌	66	66	65
底質	0.1	0.1	0.1

4-4-2-2. 水生生物への有害性情報

クロロアニリンの3異性体の水生生物への生態毒性値は魚類急性、ミジンコ急性および慢性、および藻類で試験が行われており、信頼性の高い毒性値が入手できる。魚類急性毒性ではメダカに対して3異性体について96h LC50の値が7.3-8.8mg/Lと極めて近い値が得られている。

オオミジンコに対してはオルト、メタ、パラクロロアニリンの48hEC50の値がそれぞれ2.0、0.49および0.31mg/Lとオルト体の毒性値が他の異性体に比べて数倍高い。これらの毒性値は同じ試験機関で同一時期に実施された試験での結果ということを考慮すると異性体の違いより感受性に違いがあるとも考えられる。さらに慢性毒性値は3つの異性体で急性毒性値と同じ傾向を示しており、21d NOECはオルト、メタ、パ

ラクロロアニリンでそれぞれ、0.032mg/L、0.0032mg/Lおよび0.0032mg/Lで、異性体間で10倍の開きがあった。

藻類への毒性においても、72h ErC50値が3.8-28mg/Lと明らかな毒性の違いを伺わせる。このようにクロロアニリンの3異性体への魚類、ミジンコおよび藻類への毒性は、それぞれ異なる傾向をしめた。

次に、毒性値そのものには信頼性が低いまたは確認ができない情報を含めて、3異性体間に毒性に違いがあるかどうかを確認するために、3異性体を比較した報告を検索した結果、表38に示す情報が得られた。

表38. クロロアニリンの3異性体の水生生物毒性値の比較 (mg/L)

	物質名	<i>o</i> -クロロアニリン	<i>m</i> -クロロアニリン	<i>p</i> -クロロアニリン	出典
	CAS No.	95-51-2	108-42-9	106-47-8	
魚類: Danio rerio	96hLC50	0.041	0.147	0.27	Zok et al (1991)
魚類: Poecilia reticulata	14dLC50	6.3	13.4	26	Maas-Diepeveen and Van Leeuwen(1986)
甲殻: Daphnia magna	48hEC50	1.8	0.35	0.31	Kuhn et al (1989)
藻類: Chlorella pyrenoidosa	96hEC50	32	21	4.1	Maas-Diepeveen and Van Leeuwen(1986)
藻類: Scenedesmus subspicatus	48hEC50	90-235	26-53	8	Kuhn et al (1989)