

化学物質安全性(ハザード)評価シート

整理番号	2001 - 61	官報公示 整理番号	2 - 217(化審法) 1 - 223(化学物質管理促進法)	CAS 番号	3452 - 97 - 9
名 称	3,5,5-トリメチル-1-ヘキサノール 別名：3,5,5-トリメチルヘキサノ-1-オール		構造式	$ \begin{array}{ccccccc} & & \text{CH}_3 & & \text{CH}_3 & & \\ & & & & & & \\ \text{H}_3\text{C} & - & \text{C} & - & \text{CH}_2 & - & \text{CH} & - & \text{CH}_2 & - & \text{CH}_2 & - & \text{OH} \\ & & & & & & & & & & & & \\ & & \text{CH}_3 & & & & & & & & & & \end{array} $	
分子式	C ₉ H ₂₀ O		分子量	144.25	
市場で流通している商品(代表例) ¹⁾ 純 度 : 99%以上 不純物 : モノメチルオクタノール、ジメチルヘプタノール 添加剤または安定剤：無添加					
1. 物理・化学的性状データ 外 観：無色液体 ²⁾ 融 点：-70 ²⁾ 沸 点：193~202 ²⁾ 引 火 点：93 (o.c.) ²⁾ 、79 (c.c.) ³⁾ 発 火 点：文献なし 爆発限界：文献なし 比 重：0.83 ²⁾ 蒸気密度：4.97(空気 = 1) 蒸 気 圧：30 Pa(0.23 mmHg)(20 ²⁾) 分配係数：log Pow；3.42(実測値) ⁴⁾ 、3.11(計算値) ⁵⁾ 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：文献なし スペクトル：主要マススペクトルフラグメント m/z 57(基準ピーク,1.0)、41(0.31)、56(0.29) ⁶⁾ 吸脱着性：文献なし 粒度分布：該当せず 溶解性：水に不溶 ²⁾ メタノール、アセトン、ベンゼンなどの有機溶媒に可溶 ³⁾ 換算係数：1 ppm = 6.00 mg/m ³ (気体, 20 ²⁾) 1 mg/m ³ = 0.167 ppm					

2. 発生源・暴露レベル

製造量等：平成 10 年度 1,547 t(製造 1,547 t 輸入 0 t)⁷⁾

放出・暴露量：文献なし

用途：可塑剤原料、界面活性剤原料、香料、溶剤¹⁾

3. 環境運命

1) 分解性

好氣的

難分解⁴⁾ (化審法)

試験期間	被験物質	活性汚泥
2 週間	100 mg/L	30 mg/L
BOD から算出した分解度		
4%		

嫌氣的

報告なし。

非生物的

OH ラジカルとの反応性

対流圏大気中では、速度定数 = $1.059 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{分子} \cdot \text{sec}$ (25)⁸⁾、OH ラジカル濃度を $5 \times 10^5 \sim 1 \times 10^6 \text{ 分子}/\text{cm}^3$ とした時の半減期は 1~2 日と計算される。

2) 濃縮性

低濃縮⁴⁾ (化審法)

脂質含量	試験期間	
4.1% (Av.)	6 週間	
	試験濃度	濃縮倍率
第 1 区	0.1 mg/L	3.9 ~ 8.1
第 2 区	0.01 mg/L	4.0 ~ 6.3

3) 環境分布・モニタリングデータ

報告なし。

4. 生態毒性データ

分類	生物名	LC ₅₀ (mg/L) (暴露時間)	EC ₅₀ (mg/L) (暴露時間) : 影響指標	毒性区分* ⁹⁾
藻類	<i>Selenastrum capricornutum</i> ¹⁰⁾ (セテナストラム)		> 50.0(72-h) : 増殖阻害	
甲殻類	<i>Daphnia magna</i> ¹⁰⁾ (オオミジンコ) <i>Daphnia magna</i> ¹⁰⁾ (オオミジンコ)		6.77(48-h) : 遊泳阻害 1.46(21-d) : 繁殖 NOEC	急性カテゴリー2 に相当
魚類	<i>Oryzias latipes</i> ¹⁰⁾ (メダカ) <i>Oryzias latipes</i> ¹⁰⁾ (メダカ) <i>Pimephales promelas</i> ¹¹⁾ (ファットヘッドミノー)	27.7(96-h) > 100(14-d) 5.7(96-h)	- - -	急性カテゴリー3 に相当 急性カテゴリー2 に相当

* : OECD 分類基準に基づく区分
- : データなし

5. ほ乳動物毒性データ

1) 急性毒性

	マウス	ラット	ウサギ
経口 LD ₅₀	-	2,980-6,400 mg/kg ¹¹⁾	-
吸入 LC ₅₀	-	> 730 ppm(6h) ¹¹⁾	-
経皮 LD ₅₀	-	-	> 3,160 mg/kg ¹¹⁾

ラットに本物質 2,000 mg/kg(40 w/v%で 5 mL/kg)を単回強制経口投与した実験で、投与日に自発運動の抑制、投与後 14 日目までに体重増加の抑制が認められたが、死亡は認められていない¹²⁾。

2) 刺激性・腐食性

報告なし。

3) 感作性

報告なし。

4) 反復投与毒性

(1) 経口投与

雄 Wistar ラット(12 匹/群)に本物質 144 mg/kg/day を 14 日間強制経口投与した実験で、影響はみられていない¹³⁾。

SD ラット(12 匹/性/群)に本物質(純度 92.7%)12、60、300 mg/kg/day を、雄には交配前 14

日間及び交配期間を含む 46 日間、雌には交配前 14 日間及び交配期間、妊娠期を通じて分娩後 3 日目まで強制経口投与した反復投与毒性・生殖発生毒性併合試験で、60 mg/kg/day 以上の群の雌雄では、肝臓の相対重量の増加、雌では腎臓に軽度の尿細管上皮の脂肪変性、雄では腎臓に相対及び絶対重量の増加、褪色、軽度から中等度の尿細管上皮の再生及び顆粒円柱がみられ、肝臓に軽度の小葉周辺性脂肪化がみられている¹²⁾。さらに、300 mg/kg/day 群の雌雄では流涎、外尿道口周囲の被毛汚染、肝臓の絶対重量の増加がみられ、雄では腎臓の腫大、甲状腺の濾胞上皮の円柱化及びコロイドの減少、雌では体重増加の抑制、腎臓の相対重量の増加、胸腺の萎縮、肝臓の黄白色化、肝臓の軽度から中等度の小葉周辺性脂肪化、さらには死亡(1/12 例)がみられ、妊娠 14-19 日には衰弱により 3/12 例が屠殺されている¹²⁾。衰弱屠殺例では、屠殺前に体重及び摂餌量の減少がみられ、肝臓の小葉周辺性脂肪化、腎臓の尿細管上皮の脂肪変性が認められた。また、死亡例にも肝臓の小葉周辺性脂肪化がみられている。なお、雄にのみ行った血液検査、血液生化学検査及び尿検査で、300 mg/kg/day 群に尿量の増加、ヘマトクリット値及びヘモグロビンの減少、尿素窒素及び塩素の減少が認められている。以上のことから、反復投与毒性に関する NOEL は雌雄ともに 12 mg/kg/day と推定されている¹²⁾。

5) 変異原性・遺伝毒性

試験方法		使用細胞種・動物種	結果*
in vitro	復帰突然変異試験	ネズミチフス菌、 TA 98、TA1535、15.6-500 µg/plate S9(-/+) ¹²⁾ TA 100、TA1537、6.25-200 µg/plate S9(-/+) ¹²⁾ 大腸菌、 WP2uvrA、15.6-500 µg/plate S9(-/+) ¹²⁾	-
	染色体異常試験	CHL 細胞、0.025-0.1 mg/mL S9(-/+) ¹²⁾	-

* - : 陰性

6) 発がん性

報告なし。

7) 生殖・発生毒性

(1) 経口投与

SD ラット(12 匹/性/群)に本物質(純度 92.7%)12、60、300 mg/kg/day を、雄には交配前 14 日間及び交配期間を含む 46 日間、雌には交配前 14 日間から交配期間及び妊娠期を通じて分娩後 3 日目まで強制経口投与した反復投与毒性・生殖発生毒性併合試験で、60 mg/kg/day 以上の投与群で、母動物の着床率の減少に伴う出産出生児数の減少及び哺育 4 日目までの生育児数の減少、300 mg/kg/day 群の母動物で発情休止期の継続(4 例)、体重増加の抑制、衰弱による 3 例の屠殺例に呼吸緩除及び外尿道口周囲の被毛汚染、膣口からの出血(1 例)、1 例の死亡、新生児の体重の低値、哺育 1 日目の 2 例で全哺育児死亡がみられている¹²⁾。なお、雄の生殖能に影響はみられていない¹²⁾。親動物の生殖に対する NOEL は、雄及び雌でそれぞれ 300 mg/kg/day 及び 60 mg/kg/day であり、児の発生に対する NOEL は 12 mg/kg/day と推定

されている¹²⁾。

6. ヒトへの影響

1) 急性影響

報告なし。

2) 慢性影響

報告なし。

3) 発がん性^{14, 15, 16)}

機 関	分 類	基 準
EPA	-	1999年現在発がん性について評価されていない。
EU	-	1999年現在発がん性について評価されていない。
NTP	/	1999年現在発がん性について評価されていない。
IARC	-	1999年現在発がん性について評価されていない。
ACGIH	-	2000年現在発がん性について評価されていない。
日本産業衛生学会	-	2001年現在発がん性について評価されていない。

ヒトでの発がん性に関する報告はない。

4) 許容濃度^{15, 16)}

機関名	許容濃度	経皮吸収性
ACGIH(2000年)	記載なし	-
日本産業衛生学会(2001年)	記載なし	-

7. 生体内運命

本物質の報告はないが、分岐鎖をもつ飽和アルコールはアルコール脱水素酵素によって、速やかに対応するアルデヒドに酸化され、次いでアルデヒド脱水素酵素によりカルボン酸に代謝されると考えられている¹⁷⁾。

8. 分 類(OECD 分類基準)

区 分	分 類* ⁹⁾
急性毒性	カテゴリ-5 または分類基準外(経口のデータによる)
水圏生態毒性	急性カテゴリ-2(甲殻類及び魚類のデータによる)

* 本調査範囲内のデータを適用した場合の分類であり、最終的なものではない。
急性毒性分類：OECDの急性毒性分類カテゴリに基づき、より強い毒性を示す経路での値を用いて分類

水圏生態毒性分類：OECD の急性毒性分類カテゴリーに基づき、最も強い毒性を示す水圏環境生物種での値を用いて分類

9. 総合評価

1) 危険有害性の要約

ヒトへの影響に関する報告はない。

実験動物では、急性毒性は弱く、経口投与による自発運動の抑制、体重増加抑制が観察されている。刺激性及び感作性に関する報告はない。反復経口投与毒性では、肝臓、腎臓への影響がみられている。変異原性・遺伝毒性では復帰突然変異試験、*in vitro* 染色体異常試験のみが行われており、いずれも陰性である。発がん性に関する報告はない。生殖・発生毒性では、経口投与により母動物への影響がみられる用量において、着床率の減少に伴う出産出生児数の減少、新生児に体重の低値、哺育 1 日目の哺育児死亡などがみられている。

本物質は環境中に放出された場合、水圏では生分解されにくいだが、濃縮性は低い。環境省のモニタリングデータはない。水圏環境生物に対する急性毒性は甲殻類及び魚類に対しては強い。

2) 指摘事項

- (1) 動物実験で、反復経口投与により肝臓、腎臓への影響がみられている。
- (2) 化学物質管理促進法の第一種指定化学物質に指定されており、排出量の管理が必要である。

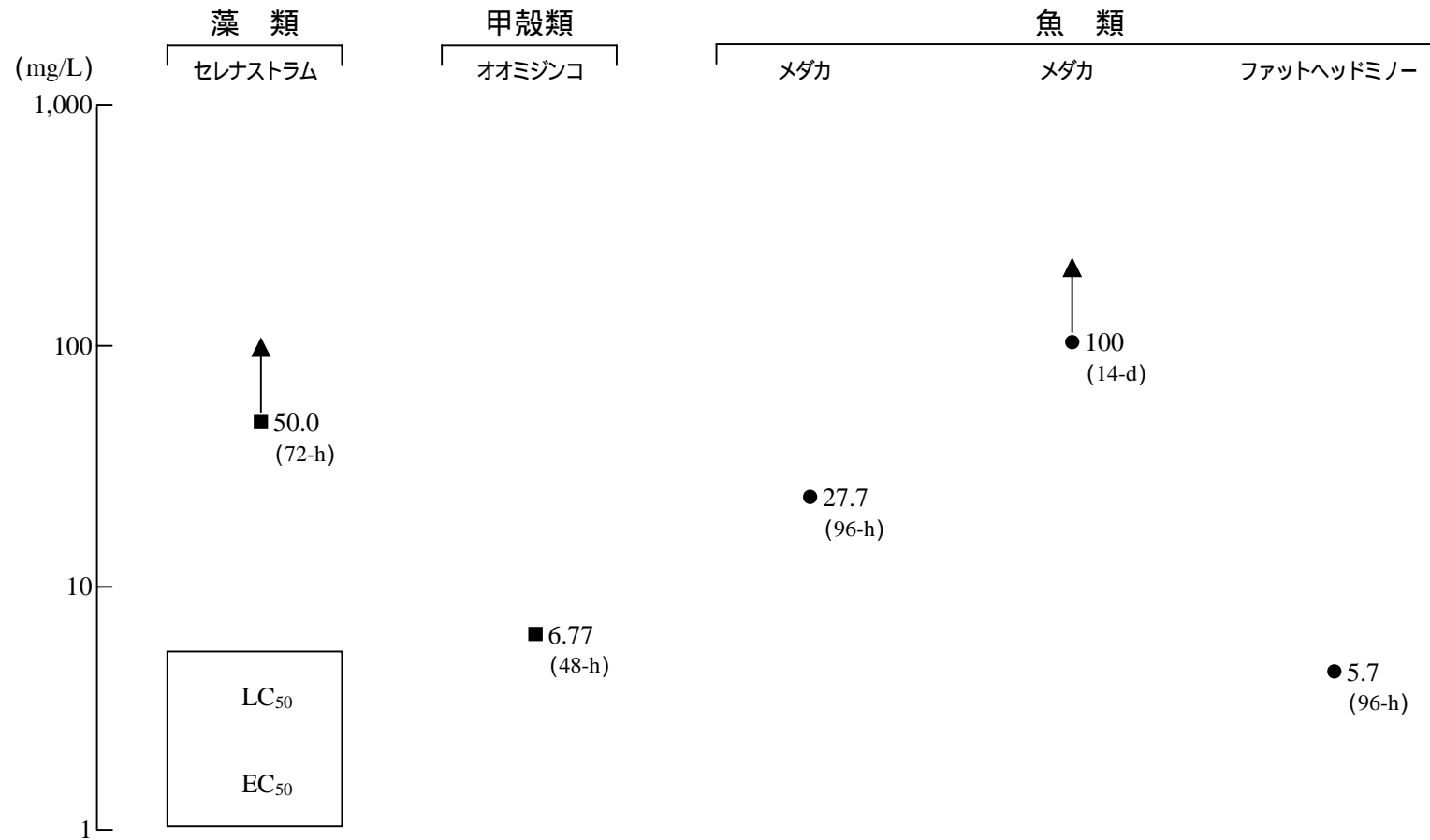
参考資料

- 1) (社)日本化学工業協会調査資料(2002).
- 2) IPCS, International Chemical Safety Cards(1989).
- 3) 13901 の化学商品, 化学工業日報社(2001).
- 4) (財)化学品検査協会, 化審法の既存化学物質安全性点検データ(1996).
- 5) KowWin ver 1.66, Syracuse Research Corporation(2001).
- 6) NIST Library of 54K Compounds(1998).
- 7) 平成 10 年度 既存化学物質の製造・輸入量に関する実態調査, 通商産業省(1999).
- 8) AOPWIN ver1.86, Syracuse Research Corporation(2001).
- 9) OECD, Harmonised integrated Classification System for Human Health and Environmental Hazards of Chemical Substances and Mixtures. OECD Series on Testing and Assessment No. 33(2001).
- 10) 平成 8 年度環境庁化学物質の生態影響試験事業, 環境庁環境保健部環境安全課(1997).
- 11) IUCLID(International Uniform Chemical Information Data Base)Data Set, EU(2000).
- 12) 厚生省生活衛生局企画課生活化学安全対策室・化学物質点検推進連絡協議会, 化学物質毒性試験報告, 5, 641-672(1997).
- 13) Rhodes et al., The Absence of Testicular Atrophy and *in vivo* and *in vitro* Effects on Hepatocyte Morphology and Peroxisomal Enzyme Activities in Male Rats following the Administration of several Alkanols. Toxicol. Letts., **21**, 103-109(1984).
- 14) JETOC, 発がん性物質の分類とその基準, 発がん性評価物質一覧表, 第 4 版(1999).
- 15) ACGIH, Booklet of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices(2000).
- 16) 許容濃度等の勧告, 産業衛生学雑誌, **43**, 96-101(2001).
- 17) WHO, Evaluation of Certain Food Additives and Contaminants, Tech. Rep. Ser. **884**, 1-96(1999).

別添資料

- 1) 生態毒性図
- 2) ほ乳動物毒性図

生態毒性図



引用文献

- 1) 平成 8 年度環境庁化学物質の生態影響試験事業, 環境庁環境保健部環境安全課 (1997).
- 2) IUCLID(International Uniform Chemical Information Data Base)Data Set, EU(2000).

ほ乳動物毒性図(経口投与)

反復		生殖・発生
ラット	ラット	ラット
14d	46d	46d

mg/kg/day

1,000

100

10

1

◆ 144
精巣萎縮、肝臓腫大、
ペルオキシゾームの
増生なし

◆ 300
肝臓重量増加、腎臓腫大、
甲状腺濾胞上皮の円柱化及
びコロイドの減少、肝臓の
黄白色化、胸腺の萎縮、肝臓
の小葉周辺性脂肪化、死亡

◆ 60
肝臓/腎臓重量増加、尿細管
上皮の脂肪変性、肝臓の小
葉周辺性脂肪化、腎臓の褪
色、尿細管上皮の再生、顆
粒円柱

◆ 12
NOEL

◆ 300
NOEL(雄親)体重増加抑制、
衰弱、膣口からの出血、死亡、
発情休止期の継続、新生児体
重減少、全哺育児死亡(2例)

◆ 60
NOEL(雌親)着床率、出産生
児率、生育児数減少

◆ 12
NOEL(児)