

## 既存化学物質安全性(ハザード)評価シート

整理番号	96 - 31	官報公示 整理番号	2 - 3049	CAS番号	75 - 65 - 0
名 称	tert-ブチルアルコール 別名：tert-ブタノール 2-メチル-2-プロパノール トリメチルカルビノール		構 造 式	$  \begin{array}{c}  \text{CH}_3 \\    \\  \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{OH} \\    \\  \text{CH}_3  \end{array}  $	
分子式	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O		分子 量	74.12	
<p>市場で流通している商品(代表例)<sup>1)</sup></p> <p>純 度 : 99%以上</p> <p>不純物 : 水分、遊離酸</p> <p>添加剤又は安定剤：無添加</p>					
<p>1. 物理・化学的性状データ</p> <p>外 観：無色固体<sup>2)</sup></p> <p>融 点：25.6<sup>3,2)</sup></p> <p>沸 点：82.41<sup>3,2)</sup></p> <p>引 火 点：11<sup>4)</sup></p> <p>発 火 点：478<sup>4)</sup></p> <p>爆発限界：2.4-8.0%<sup>4)</sup></p> <p>比 重：d<sub>4</sub><sup>20</sup> 0.78581<sup>2)</sup></p> <p>蒸気密度：2.55(空気 = 1)<sup>5)</sup></p> <p>蒸気圧：4.13 kPa(31 mmHg)(20 )<sup>6)</sup>、5.60 kPa(42 mmHg)(25 )<sup>6)</sup>、 7.47 kPa(56 mmHg)(30 )<sup>6)</sup></p> <p>分配係数：log Pow；0.37(実測値)<sup>6)</sup>、0.47(計算値)<sup>7)</sup></p> <p>加水分解性：文献なし</p> <p>解離定数：解離基なし</p> <p>スペクトル：主要マススペクトルフラグメント m/z 59(基準ピーク, 1.0)、41(0.22)、31(0.33)<sup>8)</sup></p> <p>吸脱着性：土壌吸着係数 K<sub>oc</sub>=37(計算値)<sup>9)</sup></p> <p>粒度分布：該当せず</p> <p>溶解性：水；自由に混和 アルコール、アセトン、ベンゼン等の溶媒と自由に混和<sup>5)</sup>。</p> <p>換算係数：1 ppm = 3.08 mg/m<sup>3</sup> (気体, 20 ) 1 mg/m<sup>3</sup> = 0.325 ppm</p>					

2. 発生源・暴露レベル

製造量等：平成5年度 267,716t(製造 248,075t 輸入 19,641t)<sup>10)</sup>

排出・暴露量：文献なし

用途：医薬・農薬合成原料(*tert*-ブチル化剤)、香料・香水原料、浮遊選鉱剤、塗料用溶媒(アルキド樹脂用)、反応溶媒、ガソリン添加剤<sup>1)</sup>

3. 環境運命

1) 分解性

好氣的

難分解<sup>11)</sup>(化審法)

試験期間	被験物質	活性汚泥
4週間	100mg/ℓ	100mg/ℓ
BODから算出した分解度		
2.5%		

嫌氣的

土壤微生物を植種源とした試験で、試料濃度が 100mg/ℓ、6mg/ℓの時の 100日後の分解度はそれぞれ 54%、30%との報告がある<sup>12)</sup>。

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 =  $1.09 \times 10^{12} \text{ cm}^3/\text{分子} \cdot \text{sec}$ (22<sup>13)</sup>)、OHラジカル濃度 =  $5.0 \times 10^6 \sim 1 \times 10^6 \text{ 分子}/\text{cm}^3$ のときの半減期は 7.4~14.7日と計算される。

2) 濃縮性

低濃縮<sup>11)</sup>(化審法)

脂質含量	試験期間	
-	週間	
	試験濃度	濃縮倍率
第1区	6mg/ℓ	<0.5
第2区	0.6mg/ℓ	<5

3) 環境分布・モニタリングデータ<sup>14)</sup>

実施年度(昭)	検出例と検出範囲			
	水質 ppb	底質 ppm	魚類 ppm	その他 ppb
	B/A 検出範囲 (検出限界)	B/A 検出範囲 (検出限界)	B/A 検出範囲 (検出限界)	B/A 検出範囲 (検出限界)
54	0/30 - (100~1,000)	0/30 - (1.0~10.0)	調査データなし	調査データなし

B/Aは検出数/検体数を表す。

4. 生態毒性データ

分類	生物名	LC <sub>50</sub> (mg/ℓ) (暴露時間)	EC <sub>50</sub> (mg/ℓ) (暴露時間):影響指標	OECD 分類基準(案)
藻類	<i>Scenedesmus subspicatus</i> <sup>12)</sup> (セネデスムス)	/	1,200(8-d):増殖阻害	(分類基準適用外)
甲殻類	<i>Artemia salina</i> <sup>15)</sup> (ブラインシュリンプ)	/	3,800(24-h):遊泳阻害	分類基準なし
	<i>Daphnia magna</i> <sup>12)</sup> (オオミジンコ)	/	5,504(48-h):遊泳阻害	分類基準適用外
魚類	<i>Pimephales promelas</i> <sup>12)</sup> (ファットヘッドミノー)	6,410(96-h)	/	分類基準適用外

分類基準なし : 試験生物種が OECD 分類基準の対象生物種以外

分類基準適用外 : 毒性値が OECD 分類基準値以上

( )内分類 : OECD 分類基準値が適用できると仮定した時の分類

## 5. ほ乳動物毒性データ

### 1) 急性毒性<sup>13, 15, 16, 17)</sup>

	ラット	マウス	ウサギ
経口 LD <sub>50</sub>	3,500 mg/kg	2,600 mg/kg	3,559 mg/kg
吸入 LC <sub>50</sub>	-	-	-
経皮 LD <sub>50</sub>	-	-	-
腹腔内 LD <sub>50</sub>	1,000 mg/kg	933 mg/kg	-
静脈内 LD <sub>50</sub>	-	1,538 mg/kg	-

本物質の暴露により、酩酊、運動失調がみられる。

### 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<sup>13, 15, 17, 18)</sup>

#### (1) 経口投与

マウスに 3,400 mg/kg(125 ml/l) を 7 日間混餌投与した実験で、回避行動の低下がみられている。

マウスに 13 週間飲水投与した実験で、3,940-6,430 mg/kg/day (20 mg/ml) において体重増加の抑制、膀胱の移行上皮の過形成や炎症、8,210-11,620 mg/kg/day (40 mg/ml) において死亡がみられている。2 年間飲水投与した実験では、510-540 mg/kg/day (5 mg/ml) において甲状腺濾胞細胞の過形成、2,070-2,110 mg/kg/day (20 mg/ml) において膀胱の慢性炎症、移行上皮の過形成、体重増加の抑制、生存率の低下がみられている。

ラットに液体飼料で(20ml)4-20日間混餌投与した実験で、退薬症候として筋硬直、尾のねじれ、歩行失調、振戦、易刺激性、前肢の自発性痙攣、聴原性痙攣がみられ、痙攣を起こしたものには死亡がみられている。また、ラットに3000 mg/kgを90日間混餌投与した実験でも退薬症候がみられている。

ラットに13週間飲水投与した実験で、230-290 mg/kg/day(25 mg/ml)では腎臓の相対重量の増加や腎症の重篤化、490-590 mg/kg/day(5 mg/ml)では肝臓の相対重量の増加、840-850 mg/kg/day(10 mg/ml)では体重増加の抑制、尿量の減少、尿比重の増加、腎臓の鉍質沈着の増加、1,520-1,560 mg/kg/day(20 mg/ml)では膀胱の移行上皮の過形成、炎症、3,610-3,620 mg/kg/day(40 mg/ml)では死亡がみられている。

ラットに2年間飲水投与した実験で、90 mg/kg/day(125 mg/ml)では体重増加の抑制、腎臓の絶対及び相対重量の増加、尿細管の限局性過形成、移行上皮の過形成、腎症の重篤化、330-420 mg/kg/day(5 mg/ml)では尿量の減少、尿比重の増加、腎臓の鉍質沈着の増加、生存率の低下がみられている。

(2) 吸入暴露

ラットを2,000 ppmに3日間、500 ppmに5日間暴露した実験で、腎臓でチトクロームP-450の増加がみられている。

(3) 腹腔内投与

ラットに300 mg/kgを4日間隔で2回に分けて投与した実験で高血糖と体温低下がみられている。

ラット、モルモットに総量800 mg/kgを8時間間隔で4日間投与した実験で身体的依存がみられている。

5) 変異原性・遺伝毒性<sup>13, 15, 16, 17, 18)</sup>

*In vitro* ではネズミチフス菌を用いる復帰突然変異試験、CHO細胞を用いる染色体異常試験及び姉妹染色分体交換試験、マウスリンフォーマを用いる遺伝子突然変異試験でいずれも陰性と報告されている。

*In vivo* ではマウスに本物質を13週間飲水投与した例で末梢血の小核の増加は認められていない。

6) 発がん性<sup>18, 19, 20, 21, 22)</sup>

機 関	分 類	基 準
EPA	-	1996年現在発がん性について評価されていない。
EU	-	1996年現在発がん性について評価されていない。
NTP		1996年現在発がん性について評価されていない。
IARC	-	1996年現在発がん性について評価されていない。
ACGIH(1996年)	A4	ヒトへの発がん性物質として分類できない物質。
日本産業衛生学会	-	1996年現在発がん性について評価されていない。

## (1) 経口投与

NTPで実施した B6C3F<sub>1</sub> マウスの雄に 540, 1,040, 2,070 mg/kg/day、雌に 510, 1,020, 2,110 mg/kg/day を 2年間飲水投与した実験で、雌の 2,110 mg/kg/day 群で甲状腺の濾胞細胞腺腫の発生率が有意に増加している。

同様に NTPで実施した F344/N ラットの雄に 90, 200, 420 mg/kg/day、雌に 180, 330, 650 mg/kg/day を 2年間飲水投与した実験では、雄の投与群で腎臓の腺腫または癌の発生率が用量に相関して増加している。

7) 生殖・発生毒性<sup>15, 18)</sup>

## (1) 経口投与

マウスでは、0.5, 0.75 及び 1.0%を妊娠 6日目から 20日目までの 15日間経口投与した実験で産児数と体重の減少がみられ、778 mg/kgを妊娠 6日目から 18日目までの 13日間経口投与した実験で吸収胚が増加しているが、奇形は出現していない。

ラットでは、600, 1,440, 2,160 及び 2,690 mg/kgを出生後 4日目から 7日目までの 4日間経口投与した実験で小頭症が出現している。

## (2) 吸入暴露

ラットを 2,000, 3,500 及び 5,000 ppmに 7時間/日、妊娠 1日目から 19日目までの 19日間暴露した実験で胎児体重が減少したが、奇形は出現しなかった。

6. ヒトへの影響<sup>15, 16, 21, 22)</sup>

## 1) 急性影響

中枢神経系に対する影響として頭痛、筋無力化、めまい、運動失調、錯乱を生じ、消化管に対する影響として吐き気、嘔吐、下痢がみられる。本物質の蒸気や液体は皮膚、眼、喉に対して刺激性を有する。また、ヒトのパッチテストで陽性を示し、アレルギー性皮膚炎を起こす可能性がある。

## 2) 慢性影響

報告なし。

## 3) 発がん性

ヒトの発がん性に関する十分なデータはない。

## 4) 許容濃度

機関名	許容濃度	経皮吸収性
ACGIH(1996年)	100 ppm(303 mg/m <sup>3</sup> )	-
日本産業衛生学会(1996年)	50 ppm(150 mg/m <sup>3</sup> )	-

7. 生体内運命<sup>15, 16)</sup>

tert-ブチルアルコールは肺及び消化管から吸収されるが、経皮吸収性の有無については明白でない。本物質はアルコールデヒドロゲナーゼやカタラーゼによる過酸化反応を受けないため、代謝速度は遅い。水酸基を介したグルクロン酸抱合による代謝経路が考えられ、摂取された量の24%までが尿中にグルクロン酸化合物として排泄され、10%程度は呼気あるいは尿中にアセトンや二酸化炭素として排泄される。

## 8. 分類(OECD分類基準・案)

- 1) ほ乳動物に対する急性毒性は、ラット、マウス、ウサギともに経口投与でクラス5に分類される。
- 2) 水圏環境生物に対する急性毒性は、藻類、甲殻類および魚類に対して分類基準適用外である。

## 9. 総合評価

## 1) 危険有害性の要約

tert-ブチルアルコールは、ヒトにめまい、運動失調、吐き気、下痢などの急性中毒症状を生ずる。また、刺激性を持ち、アレルギー性皮膚炎を誘発する可能性がある。実験動物においては他のアルコール類と同様に酩酊、運動失調を呈することが報告されている。実験動物では、経口投与により、主として腎臓に対する影響が知られている。In vitro 及び in vivo とも変異原性は示さないが、実験動物に甲状腺の濾胞細胞腺腫や腎臓の腺腫や癌を発生させる。ヒトでの暴露と発がんとの関連性を示唆するデータはないため、ヒトにおける発がん性の可能性については分類できないとされている。実験動物で奇形の出現はみられていない。

本物質は環境中に放出された場合、物理化学的性状から考えて水中および大気圏に分布するものと予想される。水中に直接放出された場合、微生物によっては分解されにくく残留することが予想されるが、生物への蓄積性は低い。対流圏大気中での本物質の半減期は7.4~14.7日と計算され、主な分解機構はOHラジカルとの反応である。環境庁のモニタリングでは水質、底質には検出例はなく、大気中のデータはない。水圏環境生物に

対しては、OECD分類基準(案)では藻類、甲殻類及び魚類に対して分類基準適用外である。水質、底質には検出例がなく、水圏環境生物に対する毒性も低い。

2)指摘事項

- (1) 急性影響としては他のアルコール類と同様に酩酊、運動失調を呈することが報告されており、反復投与では主として腎臓に対する影響が認められる。
- (2) 実験動物において甲状腺の濾胞細胞腺腫や腎臓の腺腫や癌の発生率増加が報告されている。

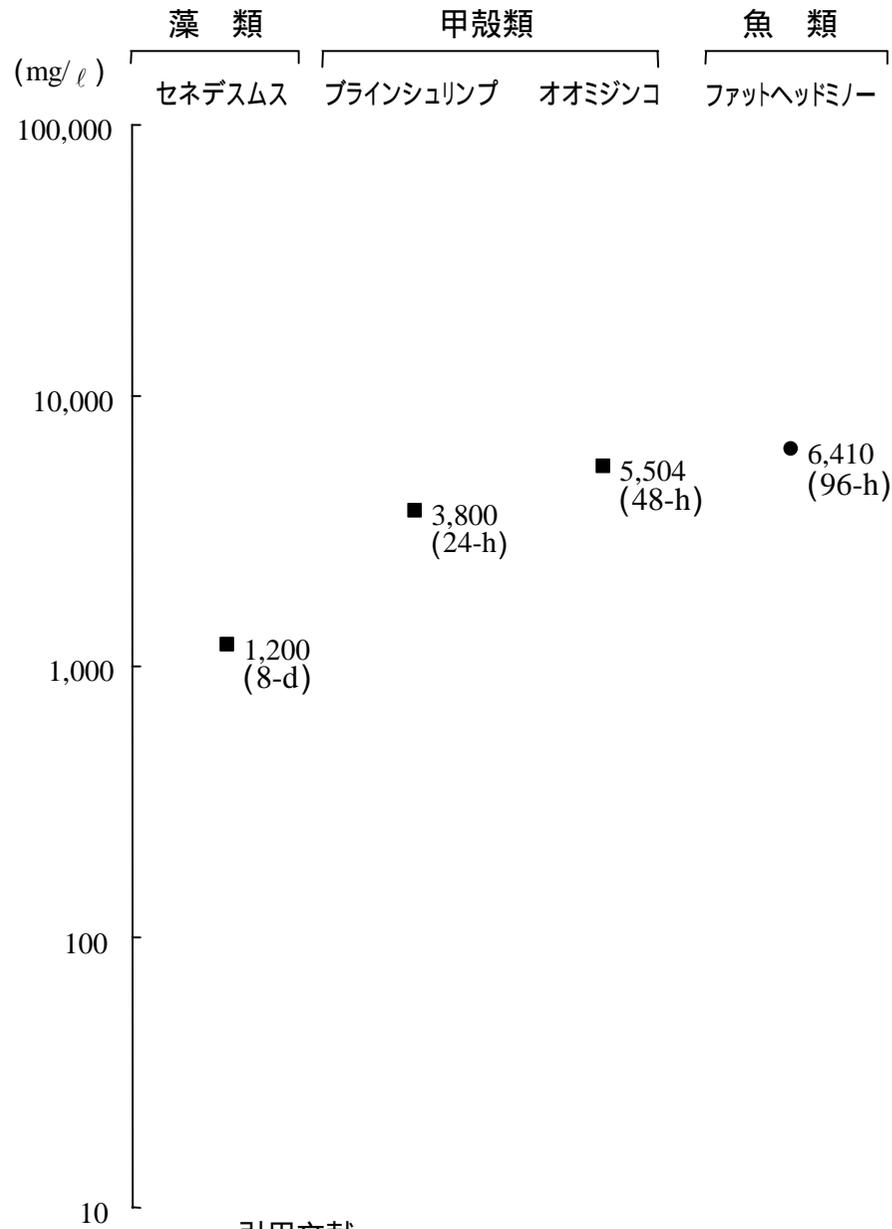
## 参考資料

- 1) (社)日本化学工業協会調査資料(1996).
- 2) 環境庁環境化学物質研究会編, 環境化学物質要覧, 丸善(1988).
- 3) The Merck Index, 11th Ed., Merck & Co., Inc.(1989).
- 4) IPCS, International Chemical Safety Cards(1989).
- 5) Richardson, M. L. et. al., The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry(1992).
- 6) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(1983).
- 7) 分配係数計算用プログラム“CLogP”, アダムネット(株).
- 8) NIST Library of 54K Compounds.
- 9) 化学物質安全情報研究会編, 化学物質安全性データブック, オーム社(1995).
- 10) 平成5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.
- 11) 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).
- 12) IUCLID(International Uniform Chemical Information Data Base), EU.
- 13) Hazardous Substances Data Bank(HSDB), U.S. National Library of Medicine(1995).
- 14) 環境庁環境保健部環境安全課監修, 化学物質と環境(1996).
- 15) IPCS, Environmental Health Criteria **65**(1987).
- 16) ACGIH, Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices(1991).
- 17) Registry of Toxic Effects of Chemical Substances(RTECS), US NIOSH(1996).
- 18) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of *t*-Butyl Alcohol in F344/N Rats and B6C3F1 Mice, **436**(1995).
- 19) 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3版(1997).
- 20) ACGIH, Booklet of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices(1996).
- 21) 産業衛生学雑誌, **38**, 172-181(1996).

## 別添資料

- 1) 生態毒性図
- 2) ほ乳動物毒性シート
- 3) ほ乳動物毒性図

生態毒性図



引用文献

- 1) IUCLID (International Uniform Chemical Information Date Base), EU.
- 2) IPCS, Environmental Health Criteria **65** (1987).

ほ乳動物毒性シート(発がん性)

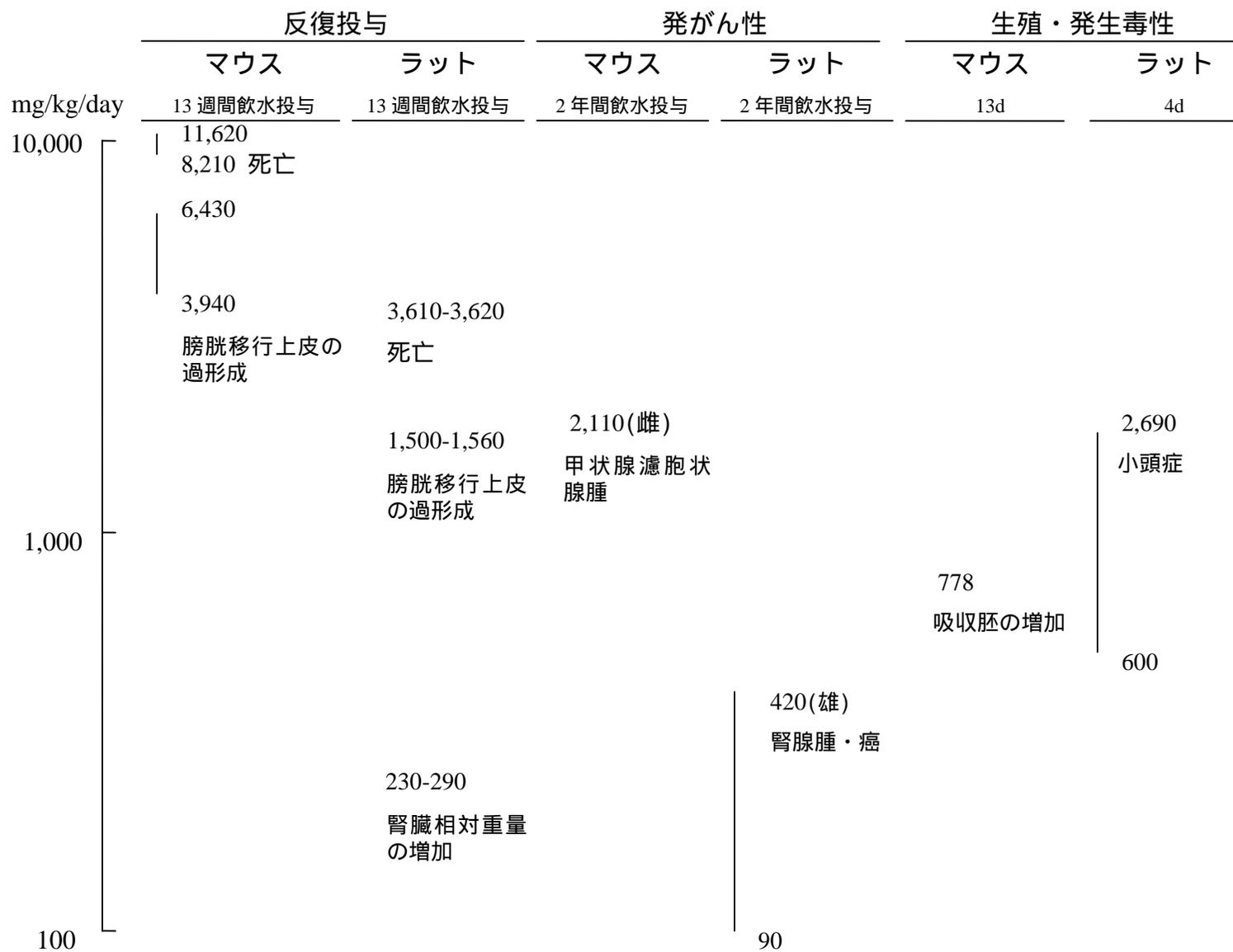
(*tert*-ブチルアルコール)10

動物種・系統	投与経路	試験条件	試験結果(腫瘍部位、発生頻度、タイプなど)								文献
			雄				雌				
マウス(B6C3F <sub>1</sub> )	経口 (飲水)	用量：雄 540、1,040、2,070 雌 510、1,020、2,110 mg/kg/day 投与期間：2年間	(mg/kg/day) 0 540 1,040 2,070 0 510 1,020 2,110								1)
			甲状腺 濾胞状腺腫				2/58 3/60 2/59 9/59				
ラット(F344/N)	経口 (飲水)	用量：雄 90、200、420 雌 180、330、650 mg/kg/day 投与期間：2年間	(mg/kg/day) 0 90 200 420 0 180 330 650								1)
			腎臓 腺腫/癌				8/50 13/50 19/50 13/50				

引用文献

- 1) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of *t*-Butyl Alcohol in F344/N Rats and B6C3F1 Mice, **436**(1995).

ほ乳動物毒性図(経口投与)



ほ乳動物毒性図(吸入暴露)

