

化学物質安全性(ハザード)評価シート(要約版)

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	
<p>市場で流通している商品(代表例)¹⁾</p> <p>純 度 : 99%以上</p> <p>不純物 : モノメチルオクタノール、ジメチルヘプタノール</p> <p>添加剤または安定剤：無添加</p>					
<p>物理・化学的性状データ</p> <p>外 観：無色液体²⁾</p> <p>融 点：-70²⁾</p> <p>沸 点：193~202²⁾</p> <p>引 火 点：93 (o.c.)²⁾、79 (c.c.)³⁾</p> <p>発 火 点：文献なし</p> <p>爆発限界：文献なし</p> <p>比 重：0.83²⁾</p> <p>蒸気密度：4.97(空気 = 1)</p> <p>蒸 気 圧：30 Pa(0.23 mmHg)(20²⁾)</p> <p>分配係数：log Pow；3.42(実測値)⁴⁾、3.11(計算値)⁵⁾</p> <p>加水分解性：加水分解を受けやすい化学結合なし</p> <p>解離定数：文献なし</p> <p>スペクトル：主要マススペクトルフラグメント m/z 57(基準ピーク,1.0)、41(0.31)、56(0.29)⁶⁾</p> <p>吸脱着性：文献なし</p> <p>粒度分布：該当せず</p> <p>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⁾</p> <p>換算係数：1 ppm = 6.00 mg/m³ (気体, 20²⁾) 1 mg/m³ = 0.167 ppm</p>					

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、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