

既存化学物質安全性(ハザード)評価シート(要約版)

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 ₄ H ₁₀ O		分子 量	74.12	
<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 : 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²⁾</p> <p>融 点 : 25.6^{3,2)}</p> <p>沸 点 : 82.41^{3,2)}</p> <p>引 火 点 : 11⁴⁾</p> <p>発 火 点 : 478⁴⁾</p> <p>爆発限界 : 2.4-8.0 %⁴⁾</p> <p>比 重 : d₄²⁰ 0.78581²⁾</p> <p>蒸気密度 : 2.55(空気 = 1)⁵⁾</p> <p>蒸 気 圧 : 4.13 kPa(31 mmHg)(20)⁶⁾、5.60 kPa(42 mmHg)(25)⁶⁾、 7.47 kPa(56 mmHg)(30)⁶⁾</p> <p>分配係数 : log Pow ; 0.37(実測値)⁶⁾、0.47(計算値)⁷⁾</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)⁸⁾</p> <p>吸脱着性 : 土壌吸着係数 K_{oc} = 37(計算値)⁹⁾</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⁵⁾。</p> <p>換算係数 : 1 ppm = 3.08 mg/m³ (気体, 20) 1 mg/m³ = 0.325 ppm</p>					

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酪酐、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酪酐、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“C Log P”, 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).