

物質名	3,5,5-トリメチル-1-ヘキサノール		DB-42
別名	2,2,4-トリメチルヘキサノール	構造式 $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \quad \quad \text{CH}_3 \\ \quad \quad \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	
	イソノニルアルコール		
3,5,5-トリメチルヘキサノール			
CAS番号	3452-97-9		
PRTR番号	第1種 223		
化審法番号	2-217		
分子式	C ₉ H ₂₀ O	分子量	144.25
沸点	190 °C ¹⁾	融点	-30 °C ¹⁾
蒸気圧	113 mmHg (150°C) ¹⁾	換算係数	1 ppm = 5.90 mg/m ³ (25°C)
分配係数 (log P _{ow})	3.11 (計算値) ²⁾	水溶性	500 mg/L (20°C) ¹⁾

急性毒性

動物種	経路	致死量、中毒量等	
ラット	経口	LD ₅₀	> 2,000 mg/kg ³⁾
ラット	経口	LD ₅₀	2,980~6,400 mg/kg ⁴⁾
ラット	吸入	LC ₅₀	> 730 ppm (4,307 mg/m ³ (6hr) ⁴⁾

中・長期毒性

- ラットに0、12、60、300 mg/kg/dayを雄には交配前2週から交配後まで計46日間、雌では交配前2週から哺育3日目まで強制経口投与した結果、300 mg/kg/day群では雌雄で流涎、外尿道口付近の被毛の汚れがみられ、雌で妊娠期間中に1匹が死亡し、3匹が衰弱したために屠殺された。また、60 mg/kg/day以上の群の雌雄で肝臓相対重量、腎臓の絶対及び相対重量の増加、300 mg/kg/day群の雌雄で肝臓絶対重量の増加、雄でヘモグロビン濃度及びヘマトクリット値の減少、尿素窒素量及び塩素濃度の減少、雌で体重増加の抑制に有意差を認めた。さらに、雄では60 mg/kg/day以上の群で尿細管上皮の再生の有意な増加及び腎臓の顆粒円柱の増加傾向を認め、300 mg/kg/day群で甲状腺濾胞の不整形及び濾胞上皮の円柱化、60 mg/kg/day以上の群で肝臓の小葉周辺性脂肪変性がみられ、雌では60 mg/kg/day以上の群で尿細管上皮の脂肪変性、300 mg/kg/day群で肝臓の小葉周辺性脂肪変性及び胸腺萎縮がみられた。なお、12 mg/kg/day以上の群の雄で尿細管上皮の硝子滴沈着及び好酸性小体の有意な増加を認めたが、この病変はα_{2u}グロブリン腎症で雄ラット特有の症状と考えられた。この結果から、NOAELは12 mg/kg/dayであった^{3,5)}。
- 雄ラットに0、144 mg/kg/dayを14日間強制経口投与し、肝臓及び睾丸への影響を調べた試験では、144 mg/kg/day群で肝臓への影響はみられなかった⁶⁾。

生殖・発生毒性

- ラットに0、12、60、300 mg/kg/dayを雄には交配前2週から交配後まで計46日間、雌には交配前2週から哺育3日目まで強制経口投与した結果、母ラットでは300 mg/kg/day群で4匹に発情休止期の継続がみられ、哺育異常として2匹に全哺育仔死亡がみられた。仔では60 mg/kg/day以上の群で着床率の低下及び出生仔数の減少、300 mg/kg/day群で出生仔の低体重、4日生存率の低下に有意差を認めた。この結果から、NOAELは12 mg/kg/dayであった^{3,5)}。
- 雄ラットに0、144 mg/kg/dayを14日間強制経口投与し、肝臓及び睾丸への影響を調べた試験では、144 mg/kg/day群で睾丸への影響はみられなかった⁶⁾。

ヒトへの影響

・短期間の暴露によって眼、皮膚、気道を刺激し、急性症状として、咳、咽頭痛、眼の発赤や痛み、皮膚の発赤やざらつき、経口摂取により吐き気、嘔吐も現れる。長期間または反復暴露により、肝臓、腎臓に影響を与えることがある⁷⁾。

発がん性

IARCの発がん性評価：評価されていない。

許容濃度

ACGIH	—
日本産業衛生学会	—

暫定無毒性量等の設定

経口暴露については、ラットの中・長期毒性試験から得られた NOAEL 12 mg/kg/day（肝臓相対重量、腎臓絶対・相対重量の増加）を採用し、試験期間が短かったことから 10 で除した 1.2 mg/kg/day を暫定無毒性量等に設定する。

吸入暴露について、暫定無毒性量等は設定できなかった。

引用文献

- 1) Kyowa Hakko Kogyo CO. Ltd. (2004): 共和発酵ケミカル株式会社. 取り扱い製品.
<http://www.kyowachemical.co.jp/products.html>
- 2) SRC's EPIWIN Estimation Software. EPI Suite Version 3.12 (August 17, 2004) KowWin v1.67.
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/docs/episuitd1.htm>
- 3) OECD (2002): SIDS Initial Assessment Report for SIAM 14. 3,5,5-Trimethyl-1-hexanol.
- 4) IUCLID (International Uniform Chemical Information Data Base) Data Set. Year 2000 CD-Rom edition.
- 5) 化学物質点検推進連絡協議会(1997): 3,5,5-トリメチルヘキサン-1-オールのラットを用いる反復経口投与毒性・生殖発生毒性併合試験. 化学物質毒性試験報告. 5: 643-659.
- 6) Rhodes C, Soames T, Stonard MD, Simpson MG, Vernall AJ, Elcombe CR.(1984): 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 Lett. 21: 103-109.
- 7) IPCS (1997): International Chemical Safety Cards. 0608. 3,5,5-Trimethylhexanol.