

物質名	吉草酸アルデヒド			DB-14												
別名	ペンタナール、 <i>n</i> -バレルアルデヒド		構造式 $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH=O}$													
CAS番号	110-62-3															
PRTR番号	-															
化審法番号	2-494															
分子式	$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$	分子量	86.14													
沸点	103°C (760 mmHg) ¹⁾	融点	-91.5°C ¹⁾													
蒸気圧	26 mmHg (20°C、実測値) ²⁾	換算係数	1 ppm = 3.52 mg/m ³ (25°C)													
分配係数 (log P _{ow})	1.31 (推定値) ³⁾	水溶性	1.17×10 ⁴ mg/L (25°C、実測値) ⁴⁾													
急性毒性																
<table border="1" style="width: 100%;"> <thead> <tr> <th>動物種</th> <th>経路</th> <th colspan="2">致死量、中毒量等</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>ラット</td> <td>経口</td> <td>LD₅₀</td> <td>4,590 mg/kg⁵⁾</td> </tr> <tr> <td>ラット</td> <td>吸入</td> <td>LC₅₀</td> <td>14,000 mg/m³ (4hr)⁶⁾</td> </tr> </tbody> </table>					動物種	経路	致死量、中毒量等		ラット	経口	LD ₅₀	4,590 mg/kg ⁵⁾	ラット	吸入	LC ₅₀	14,000 mg/m ³ (4hr) ⁶⁾
動物種	経路	致死量、中毒量等														
ラット	経口	LD ₅₀	4,590 mg/kg ⁵⁾													
ラット	吸入	LC ₅₀	14,000 mg/m ³ (4hr) ⁶⁾													
中・長期毒性																
<p>・ラットに0、30、100、300、1,000 mg/kg/dayを90日間強制経口投与した結果、100 mg/kg/day以上の群の雄及び300 mg/kg/day以上の群の雌で、前胃の扁平上皮のび慢性過形成がみられた。なお、30 mg/kg/day以上の群で一般状態、体重、血液・尿検査結果等への影響はなかった⁷⁾。この結果から、NOAELを30 mg/kg/dayとする。</p>																
生殖・発生毒性																
情報は得られなかった。																
ヒトへの影響																
<p>・眼、皮膚、気道を刺激し、眼に入ると発赤、痛み、皮膚に付くと発赤、経口摂取すると吐き気、嘔吐、下痢、吸入すると咳、咽頭痛を生じる⁸⁾。</p> <p>・ボランティア実験で、本物質の水溶液の臭気閾値は60.6 ppbであった⁹⁾。</p>																
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 ¹⁰⁾	TLW-TWA 50 ppm (176 mg/m ³)													
		日本産業衛生学会	-													
暫定無毒性量等の設定																
<p>経口ばく露については、ラットの中・長期毒性試験から得られたNOAEL 30 mg/kg/day (前胃の扁平上皮のび慢性過形成)を採用し、試験期間が短いことから10で除した3 mg/kg/dayを暫定無毒性量等に設定する。</p> <p>吸入ばく露について、暫定無毒性量等は設定できなかった。</p>																

引用文献

- 1) Lide, D.R. (ed.) (1990-1991): CRC Handbook of Chemistry and Physics. 71st ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 3-215.
- 2) Flick, E.W. (ed.) (1991): Industrial Solvents Handbook 4 th ed. Noyes Data Corporation., Park Ridge, NJ ~~8-6~~
- 3) Meylan, W.M. and P.H. Howard (1995): Atom/fragment contribution method for estimating octanol-water partition coefficients. J. Pharm. Sci. 84: 83-92.
- 4) Yalkowsky, S.H. and R.M. Dannenfelser (1992): Aquasol Database of Aqueous Solubility. Ver.5. College of Pharmacy, University of Arizona, Tucson, AZ.
- 5) Smyth, H.F. Jr., C.P. Carpenter, C.S. Weil, U.C. Pozzani, J.A. Striegel and J.S. Nycum (1969): Range-finding toxicity data: List VII. Am. Ind. Hyg. Assoc. J. 30: 470-476.
- 6) US National Institute for Occupational Safety and Health Registry of Toxic Effects of Chemical Substances (RTECS) Database.
- 7) 食品安全委員会(2008): 添加物評価書. バレラルデヒド.
- 8) IPCS (2002): International Chemical Safety Cards. 1417. Valeraldehyde.
- 9) Amoore, J.E., L.J. Forrester and P. Pelosi (1976): Specific anosmia to isobutyraldehyde: the malty primary odor. Chem. Senses Flavor 2: 17-25.
- 10) ACGIH (2001): Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices.