

物質名	4-ヒドロキシ-4-メチル-2-ペンタノン			DB-43
別名	4-ヒドロキシ-2-ケト-4-メチルペンタン、ジアセトンアルコール	構造式 $\text{CH}_3-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_2-\overset{\text{CH}_3}{\underset{\text{CH}_3}{\text{C}}}-\text{OH}$		
CAS番号	123-42-2			
PRTR番号	—			
化審法番号	2-587			
分子式	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	分子量	116.16	
沸点	167.9°C <sup>1)</sup>	融点	-44°C <sup>1)</sup>	
蒸気圧	1.71 mmHg (25°C) <sup>2)</sup>	換算係数	1 ppm = 4.75 mg/m <sup>3</sup> (25°C)	
分配係数 (log P <sub>ow</sub> )	-0.34 (推定値) <sup>3)</sup>	水溶性	1×10 <sup>6</sup> mg/L (25°C、実測値) <sup>4)</sup>	

### 急性毒性

動物種	経路	致死量、中毒量等	
マウス	経口	LD <sub>50</sub>	3,000 mg/kg <sup>5)</sup>
マウス	経口	LD <sub>50</sub>	3,950 mg/kg <sup>5)</sup>
ラット	経口	LD <sub>50</sub>	2,520 mg/kg <sup>5)</sup>
ラット	経口	LD <sub>50</sub>	4,000 mg/kg <sup>5)</sup>
マウス	吸入	LCL <sub>0</sub>	23,000 mg/m <sup>3</sup> <sup>5)</sup>
ラット	吸入	LCL <sub>0</sub>	1,000 ppm (4,750 mg/m <sup>3</sup> ) (4hr) <sup>5)</sup>

### 中・長期毒性

- ・ラットに 0.001、0.004%の濃度で 30 日間飲水投与した結果、0.004%群で腎臓への影響がみられたとの報告<sup>6)</sup>があるが、詳細は不明である。
- ・ラットに 0、30、100、300、1,000 mg/kg/day を交配前 2 週から雄には計 44 日間、雌には哺育 3 日まで強制経口投与した結果、300 mg/kg/day 以上の群の雌雄で自発運動の低下、音や接触刺激に対する反応の低下がみられ、1,000 mg/kg/day 群の雌で 1/10 匹が分娩中に瀕死状態となり、屠殺された。雄では、100 mg/kg/day 以上の群で尿細管上皮の硝子滴の沈着の増加、300 mg/kg/day 以上の群で尿細管の好塩基性化、腎臓重量の増加傾向、1,000 mg/kg/day 群で尿細管の拡張、副腎及び肝臓重量の増加を認めた。雌では 300 mg/kg/day 以上の群で尿細管上皮の脂肪変性、1,000 mg/kg/day 群の雌で体重増加の抑制（交尾前）、肝臓重量の増加を認めた。また、300 mg/kg/day 群の雄及び 1,000 mg/kg/day 群の雌で副腎皮質束状帯細胞の空胞化、1,000 mg/kg/day 群の雌雄で肝細胞肥大もみられた<sup>7)</sup>。この結果から、NOAEL を雄で 30 mg/kg/day、雌で 100 mg/kg/day とする。
- ・ラットに 0、50、225、1,000 ppm を 6 週間（6 時間/日、5 日/週）吸入させた結果、225 ppm 以上の群で肝臓重量の増加、1,000 ppm 群でばく露時の軽微な嗜眠、腎臓重量の増加、体重増加の抑制（雌）、血清 LDH の増加（雌）、尿細管の組織の変性（雄）がみられた<sup>8)</sup>。この結果から、NOAEL を 50 ppm (238 mg/m<sup>3</sup>、ばく露状況で補正：42 mg/m<sup>3</sup>) とする。

### 生殖・発生毒性

- ・ラットに 0、30、100、300、1,000 mg/kg/day を交配前 2 週から雄には計 44 日間、雌には哺育 3 日まで強制経口投与した結果、1,000 mg/kg/day 群で受胎率、着床率、分娩率の低下がみられ、雌 1/10 匹が分娩中に瀕死状態となり、屠殺された。仔では、1,000 mg/kg/day 群で総出産

仔数、新生仔数、哺育4日生存率の減少がみられた。なお、投与に関連した奇形はなかった<sup>7)</sup>。この結果から、親ラット及び仔のNOAELを300 mg/kg/dayとする。

### ヒトへの影響

- ・眼、皮膚、気道を刺激する。眼に入ると、発赤、痛み、皮膚に付くと発赤、皮膚の乾燥、吸入すると咳、咽頭痛を生じる。液体を飲み込むと、肺に吸い込んで化学性肺炎を起こすことがある。許容濃度をはるかに超えてばく露すると、意識低下を生じることがある。長期または反復して液体が皮膚に付くと、皮膚の脱脂を起こす<sup>9)</sup>。
- ・100 ppmに15分間ばく露させたボランティア実験で、ばく露中に眼、鼻、喉の刺激があり、被験者の多くは不快な臭いと味覚も訴えた<sup>10)</sup>。

### 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 <sup>11)</sup>	50 ppm (238 mg/m <sup>3</sup> )
日本産業衛生学会	—

### 暫定無毒性量等の設定

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（尿細管上皮の硝子滴の沈着）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。

吸入ばく露については、ラットの中・長期毒性試験から得られたNOAEL 238 mg/m<sup>3</sup>（肝臓重量の増加）を採用し、ばく露状況で補正して42 mg/m<sup>3</sup>とし、試験期間が短いことから10で除した4.2 mg/m<sup>3</sup>を暫定無毒性量等に設定する。

### 引用文献

- 1) SRC, Syracuse Research Corporation (2007): SRC PhysProp Database, (<http://esc.syrres.com./interkow/physdemo.htm>)
- 2) Daubert, T.E. and R.P. Danner (1989): Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Taylor and Francis. Washington, DC.
- 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) Riddick, J.A., W.B. Bunger and T.K. Sakano (1985): Techniques of Chemistry 4th ed., Volume II. Organic Solvents. New York, NY: John Wiley and Sons.
- 5) US National Institute for Occupational Safety and Health Registry of Toxic Effects of Chemical Substances (RTECS) Database.
- 6) Smyth, H.F. and C.P. Carpenter (1948): Further experience with the range finding test in the industrial toxicology laboratory. J. Ind. Hyg. Toxicol. 30: 63-68.
- 7) 化学物質点検推進連絡協議会(1997): ジアセトンアルコ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: 479-490.
- 8) SHELL Research Ltd. (1979): The inhalation toxicity of Diacetone alcohol following six weeks's exposure to rats. Cited in: IUCLID (International Uniform Chemical Information Data Base) Data Set. Year 2000 CD-Rom edition.
- 9) IPCS (2005): International Chemical Safety Cards. 0647. Diacetone Alcohol.
- 10) Silverman, L., H.F. Schulte and M.W. First (1946): Further studies on sensory response to certain industrial

solvent vapors. J. Ind. Hyg. Toxicol. 28: 262-266.

11) ACGIH (2001): Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices.