

[9] 2-プロピン-1-オール

1. 物質に関する基本的事項

(1) 分子式・分子量・構造式

物質名：2-プロピン-1-オール

(別の呼称：プロパルギルアルコール)

CAS 番号：107-19-7

化審法官報公示整理番号：2-272

化管法管理番号：

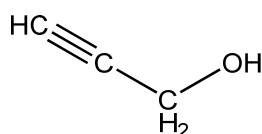
RTECS 番号：UK5075000

分子式：C₃H₄O

分子量：56.06

換算係数：1 ppm = 2.29 mg/m³ (気体、25°C)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は芳香性の無色液体である¹⁾。

融点	-51.8°C ^{2),3)} 、-52~-48°C ⁴⁾
沸点	113°C (101 kPa) ²⁾ 、114~115°C (101 kPa) ⁴⁾ 、 113.6°C (101 kPa) ³⁾ 、115°C ⁵⁾
密度	0.9478 g/cm ³ (20°C) ²⁾
蒸気圧	2.08×10 ³ Pa (25°C) ³⁾ 、1.6×10 ³ Pa (20°C) ⁵⁾
分配係数 (1-オクタノール/水) (log Kow)	-0.38 (pH 不明) ^{2),3),5),6)}
解離定数 (pKa)	13.6 (25°C) ²⁾
水溶性 (水溶解度)	1.00×10 ⁶ mg/L (20°C) ³⁾

(3) 環境運命に関する基本的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性

好氣的分解 (難分解性ではないと判断される物質⁷⁾)

分解率：BOD 95% (平均値)、TOC 97% (平均値)、HPLC 100% (平均値)

(試験期間：4週間、被験物質濃度：100 mg/L、活性汚泥濃度：30 mg/L)⁸⁾

化学分解性

OH ラジカルとの反応性 (大気中)

反応速度定数：10×10⁻¹² cm³/(分子・sec) (AOPWIN⁹⁾により推定)

半減期：0.51 ~ 5.1 日 (OH ラジカル濃度を 3×10⁶~3×10⁵ 分子/cm³¹⁰⁾と仮定し、一日を12時間として推定)

オゾンとの反応性（大気中）

反応速度定数： $0.0030 \times 10^{-17} \text{ cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$ （AOPWIN⁹⁾により推定）

半減期：0.24 ～ 1.5 年（オゾン濃度を $3 \times 10^{12} \sim 5 \times 10^{11} \text{ 分子/cm}^3$ ¹⁰⁾と仮定し推定）

加水分解性

分解性スクリーニング試験の結果、5 日後の残存率は 99%（初期濃度：5 $\mu\text{g/mL}$ 、pH = 7）¹¹⁾

生物濃縮性

生物濃縮係数(BCF)：3.2（BCFBAF¹²⁾により推定）

土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc)：1.9（KOCWIN¹³⁾により推定）

(4) 製造輸入量及び用途**① 製造輸入量等**

本物質の化審法に基づき公表された一般化学物質としての製造・輸入数量の推移を表 1.1 に示す¹⁴⁾。

表 1.1 製造・輸入数量の推移

年度	2012	2013	2014	2015	2016
製造・輸入数量(t) ^{a)}	1,000 未満	1,000 未満	1,000 未満	1,000 未満	1,000 未満
年度	2017	2018	2019	2020	2021
製造・輸入数量(t) ^{a)}	1,000 未満	1,000 未満	1,000 未満	1,000 未満	X ^{b)}

注：a) 製造数量は出荷量を意味し、同一事業者内での自家消費分を含んでいない値を示す。

b) 届出事業者が 2 社以下のため、製造・輸入数量は公表されていない。

② 用途

本物質の主な用途は、メッキ光沢剤、鉍酸中の溶出阻害剤、腐食防止剤、抗菌剤原料とされている¹⁵⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

本物質は、有害大気汚染物質に該当する可能性がある物質に選定されている。

本物質は、2023 年（令和 5 年）4 月 1 日に施行された化学物質排出把握管理促進法（化管法）対象物質見直しにより第一種指定化学物質（政令番号：379）から除外された。

2. 曝露評価

環境リスクの初期評価のため、我が国の一般的な国民の健康や水生生物の生存・生育を確保する観点から、実測データをもとに基本的には化学物質の環境からの曝露を中心に評価することとし、データの信頼性を確認した上で安全側に立った評価の観点から原則として最大濃度により評価を行っている。

(1) 環境中への排出量

本物質は、化管法の対象物質見直し前においては第一種指定化学物質であった。同法に基づき公表された2021年度の届出排出量¹⁾、届出外排出量対象業種・非対象業種・家庭・移動体^{2),3)}から集計した排出量等を表 2.1 に示す。なお、届出外排出量非対象業種・家庭・移動体の推計はなされていなかった。

表 2.1 化管法に基づく排出量及び移動量 (PRTR データ) の集計結果 (2021 年度)

	届出						届出外 (国による推計)				総排出量 (kg/年)		
	排出量 (kg/年)				移動量 (kg/年)		排出量 (kg/年)				届出 排出量	届出外 排出量	合計
	大気	公共用水域	土壌	埋立	下水道	廃棄物移動	対象業種	非対象業種	家庭	移動体			
全排出・移動量	31	0	0	0	5	15	5	-	-	-	31	5	36

業種等別排出量(割合)											総排出量の構成比(%)		
農業製造業	16 (51.6%)	0	0	0	0	0						届出	届出外
化学工業	15 (48.4%)	0	0	0	5 (100%)	15 (100%)						86%	14%
下水道業							5 (100.0%)						

本物質の2021年度における環境中への総排出量は0.036 tとなり、そのうち届出排出量は0.031 tで全体の86%であった。届出排出量はすべて大気へ排出されるとしている。この他に下水道への移動量が0.005 t、廃棄物への移動量が0.015 tであった。届出排出量の排出源は、農業製造業(52%)、化学工業(48%)であった。

表2.1に示したようにPRTRデータでは、届出外排出量の推定は媒体別には行われていないため、届出外排出量対象業種の媒体別配分は届出排出量の割合をもとに行った。届出排出量と届出外排出量を媒体別に合計したものを表2.2に示す。

表 2.2 環境中への推定排出量 (2021 年度)

媒体	推定排出量(kg)
大気	31
水域	5
土壌	0

本物質の化管法に基づき公表された排出量及び移動量の推移を表2.3に示す¹⁾。

表 2.3 化管法に基づく排出量及び移動量（PRTR データ）の推移

年度	届出						届出外（国による推計）				総排出量（kg/年）		
	排出量（kg/年）				移動量（kg/年）		排出量（kg/年）				届出 排出量	届出外 排出量	合計
	大気	公共用水域	土壌	埋立	下水道	廃棄物移動	対象業種	非対象業種	家庭	移動体			
2021	31	0	0	0	5	15	5	-	-	-	31	5	36
2020	31	0	0	0	5	95,345	5	-	-	-	31	5	36
2019	31	0	0	0	5	339	5	-	-	-	31	5	36
2018	49	0	0	0	5	220,959	5	-	-	-	49	5	54
2017	40	0	0	0	5	1,495	4	-	-	-	40	4	44
2016	48	0	0	0	4	1,077	4	-	-	-	48	4	52
2015	30	0	0	0	4	771	5	-	-	-	30	5	35
2014	31	0	0	0	5	945	4	-	-	-	31	4	35
2013	43	0	0	0	4	1,539	4	-	-	-	43	4	47
2012	26	0	0	0	4	1,213	4	-	-	-	26	4	30

(2) 媒体別分配割合の予測

本物質の環境中の媒体別分配割合は、環境中への推定排出量を基に USES3.0 をベースに日本固有のパラメータを組み込んだ Mackay-Type Level III 多媒体モデル⁴⁾を用いて予測した。予測の対象地域は、2021 年度に環境中及び大気への排出量が最大であった大分県（大気への排出量 0.016 t）、公共用水域への排出量が最大であった大阪府（公共用水域への排出量 0.005 t）とした。予測結果を表 2.4 に示す。

表 2.4 媒体別分配割合の予測結果

媒体	分配割合(%)		
	上段：排出量が最大の媒体、下段：予測の対象地域		
	環境中	大気	公共用水域
	大分県	大分県	大阪府
大気	38.5	38.5	0.1
水域	38.8	38.8	99.0
土壌	22.5	22.5	0.1
底質	0.3	0.3	0.8

注：数値は環境中で各媒体別に最終的に分配される割合を質量比として示したものの。

(3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の環境中等の濃度について情報の整理を行った。本物質の環境中等の濃度について、信頼性が確認された調査例は得られなかった（表 2.5.1、表 2.5.2）。

表 2.5.1 各媒体中の存在状況（国による調査結果）

媒体	幾何 平均値	算術 平均値	最小値	最大値	検出 下限値	検出率	調査地域	測定年度	文献
一般環境大気	μg/m ³								
室内空気	μg/m ³								

媒 体	幾何 平均値	算術 平均値	最小値	最大値	検出 下限値	検出率	調査地域	測定年度	文 献
食物	μg/g								
飲料水	μg/L								
地下水	μg/L								
土壌	μg/g								
公共用水域・淡水	μg/L								
公共用水域・海水	μg/L								
底質(公共用水域・淡水)	μg/g								
底質(公共用水域・海水)	μg/g								
魚類(公共用水域・淡水)	μg/g								
魚類(公共用水域・海水)	μg/g								
貝類(公共用水域・淡水)	μg/g								
貝類(公共用水域・海水)	μg/g								

表 2.5.2 各媒体中の存在状況（国以外の調査結果）

媒 体	幾何 平均値	算術 平均値	最小値	最大値	検出 下限値	検出率	調査地域	測定年度	文 献
一般環境大気	μg/m ³								
室内空気	μg/m ³								
食物	μg/g								
飲料水	μg/L								
地下水	μg/L								
土壌	μg/g								
公共用水域・淡水	μg/L								
公共用水域・海水	μg/L								
底質(公共用水域・淡水)	μg/g								

媒 体	幾何 平均値	算術 平均値	最小値	最大値	検出 下限値	検出率	調査地域	測定年度	文 献
底質(公共用水域・海水) µg/g									
魚類(公共用水域・淡水) µg/g									
魚類(公共用水域・海水) µg/g									
貝類(公共用水域・淡水) µg/g									
貝類(公共用水域・海水) µg/g									

(4) 人に対する曝露量の推定（一日曝露量の予測最大量）

本物質について、実測データに基づく人に対する曝露量の推定を行うことはできなかった（表 2.6）。

表 2.6 各媒体中の濃度と一日曝露量

	媒 体	濃 度	一 日 曝 露 量
平 均	大気		
	一般環境大気	データは得られなかった	データは得られなかった
	室内空気	データは得られなかった	データは得られなかった
	水質		
	飲料水	データは得られなかった	データは得られなかった
	地下水	データは得られなかった	データは得られなかった
	公共用水域・淡水	データは得られなかった	データは得られなかった
	食 物	データは得られなかった	データは得られなかった
	土 壤	データは得られなかった	データは得られなかった
	最 大 値	大気	
一般環境大気		データは得られなかった	データは得られなかった
室内空気		データは得られなかった	データは得られなかった
水質			
飲料水		データは得られなかった	データは得られなかった
地下水		データは得られなかった	データは得られなかった
公共用水域・淡水		データは得られなかった	データは得られなかった
食 物		データは得られなかった	データは得られなかった
土 壤		データは得られなかった	データは得られなかった

吸入曝露については、表 2.6 に示すとおり、一般環境大気及び室内空気の実測データが得られていないため、平均曝露濃度、予測最大曝露濃度ともに設定できなかった。

一方、化管法に基づく 2021 年度の大気への届出排出量をもとに、プルーム・パフモデル⁵⁾を用いて推定した大気中濃度の年平均値は、最大で 0.0059 µg/m³となった。

表 2.7 人の一日曝露量

媒体		平均曝露量 (µg/kg/day)	予測最大曝露量 (µg/kg/day)
大 気	一般環境大気		
	室内空気		
水 質	飲料水		
	地下水		
	公共用水域・淡水		
食 物			
土 壤			

経口曝露量については、表 2.7 に示すとおり飲料水、地下水、公共用水域・淡水、食物及び土壌の実測データが得られていないため、平均曝露量、予測最大曝露量ともに設定できなかった。

一方、化管法に基づく 2021 年度の公共用水域・淡水への届出排出量はなかったが、下水道への移動量の届出があったため、下水道への移動量から推計した公共用水域^aへの排出量を全国河道構造データベース⁶⁾の平水流量で除し、希釈のみを考慮した河川中濃度を推定すると、最大で 0.060 µg/L となり、経口曝露量を算出すると 0.0024 µg/kg/day となった。

物理化学的性状から考えて生物濃縮性は高くないと推定されることから、本物質の環境媒体から食物経由の曝露量は少ないと考えられる。

(5) 水生生物に対する曝露の推定（水質に係る予測環境中濃度：PEC）

本物質の水生生物に対する曝露の推定の観点から、水質中濃度を表 2.8 のように整理した。水質について実測データに基づく水生生物に対する曝露の推定を行うことはできなかった。

化管法に基づく 2021 年度の公共用水域・淡水への届出排出量はなかったが、下水道への移動量の届出があったため、下水道への移動量から推計した公共用水域^aへの排出量を全国河道構造データベース⁶⁾の平水流量で除し、希釈のみを考慮した河川中濃度を推定すると、最大で 0.060 µg/L となった。

表 2.8 公共用水域濃度

水 域	平 均	最 大 値
淡 水	データは得られなかった	データは得られなかった
海 水	データは得られなかった	データは得られなかった

注：公共用水域・淡水は、河川河口域を含む

^a 公共用水域への排出量は、下水道への移動量から公共用水域への移行率を考慮して算出した。公共用水域への移行率は、本物質の化管法届出外排出量の推計で用いられている値（99%超）³⁾をそのまま採用した。

3. 健康リスクの初期評価

健康リスクの初期評価として、ヒトに対する化学物質の影響についてのリスク評価を行った。

(1) 体内動態、代謝

ラット及びマウスに ^{14}C でラベルした本物質 1 mg/kg を静脈内投与した結果、両種とも高い放射活性の分布が排泄系器官（肝臓、腎臓、膀胱）、消化管でみられた。72 時間でラットは投与量の 62% を尿中へ、6.4% を糞中へ、19% を $^{14}\text{CO}_2$ として、0.5% を揮発性物質として呼気中へ排泄し、体内残留は 5.3% であった。マウスは 72 時間で投与量の 40% を尿中へ、9.6% を糞中へ、26% を $^{14}\text{CO}_2$ として、0.9% を揮発性物質として呼気中へ排泄し、体内残留は 3.4% であった。両種とも尿中排泄量の約 3/4 が 12 時間以内の排泄であった。また、胆管をカニューレ処置したラットへの 1 mg/kg の静脈内投与では、4 時間で投与した放射活性の 62% を胆汁中へ排泄したが、そのほぼすべてが 2.5 時間以内の排泄であり、高い割合で腸肝循環が行われるものと考えられた¹⁾。

ラット及びマウスに ^{14}C でラベルした本物質 50 mg/kg を単回強制経口投与した結果、72 時間でラットは投与量の 50% を尿中へ、14% を糞中へ、26% を $^{14}\text{CO}_2$ として、0.2% を揮発性物質として呼気中へ排泄し、体内残留は 5.3% であった。マウスは 72 時間で投与量の 30% を尿中へ、20% を糞中へ、22% を $^{14}\text{CO}_2$ として、0.6% を揮発性物質として呼気中へ排泄し、体内残留は 2.4% であった。ラットでは尿中排泄量の約 3/4 が 24 時間以内の排泄であったが、マウスではラットよりも排泄速度が遅く、約 3/4 が 48 時間以内の排泄であった¹⁾。

ラット及びマウスに ^{14}C でラベルした本物質 1、10、100 ppm を短時間曝露させた結果、ラットはそれぞれ 0.15、1.5、14.8 mg の本物質を吸入し、そのうち 55、62、33% を吸収した。マウスはそれぞれ 0.046、0.45、4.6 mg の本物質を吸入し、そのうち 68、63、23% を吸収した。両種ともに 100 ppm の曝露では吸収率の低下がみられた。両種とも吸収量の 82~87% を 24 時間以内に排泄し、静脈内投与時や経口投与時と同様に主要な排泄経路は尿中及び CO_2 であったが、 CO_2 と同程度かそれよりも多い揮発性物質（おそらく未変化の本物質）の排泄が 6 時間後までみられた。また、24 時間後の体内残留はラットで 13~17%、マウスで 8~11% であった¹⁾。

本物質は一般的なアルコール類とは異なり、アルコール脱水素酵素の基質になりにくく、主にカタラーゼの作用によってプロパルギルアルデヒドへ代謝されると考えられた²⁾。しかし、その後の研究でカタラーゼではなく、CYP2E1 の作用によってアルデヒドへ代謝されることが明らかとなり、本物質は CYP2E1 及びアルコール脱水素酵素によってプロパルギルアルデヒドへ代謝された後にグルタチオン抱合を受けるか、アルデヒド脱水素酵素によってプロピオール酸へと代謝され³⁾、さらにプロピオール酸がグルタチオン抱合を受ける代謝経路⁴⁾ が考えられた。

^{13}C 及び ^{14}C でラベルした本物質 40 mg/kg を経口投与したラットの尿中から 6 物質、マウスの尿中から 7 物質の代謝物が検出・同定され、そのうち 3 物質が両種で共通の代謝物であった。ラットでは尿中代謝物の 27% がプロピオール酸であったが、マウスでは 2% と少なく、本物質のグルクロン酸抱合体はラットで不検出であったが、マウスでは 6% であった。両種ともに残りの代謝物はグルタチオン抱合体であったが、二重抱合体がラットで 43%、マウスで 38% と同程度であったのに対し、単抱合体はラットで 27%、マウスで 54% であり、大きな差がみられた^{4,5)}。

(2) 一般毒性及び生殖・発生毒性

① 急性毒性

表 3.1 急性毒性⁶⁾

動物種	経路	致死量、中毒量等	
ラット	経口	LD ₅₀	20 mg/kg
ラット	経口	LD ₅₀	55 mg/kg
マウス	経口	LD ₅₀	50 mg/kg
モルモット	経口	LD ₅₀	60 mg/kg
ラット	吸入	LCLo	1,250 mg/m ³ (2 hr)
ラット	吸入	LC ₅₀	1,040 ppm (2,380 mg/m ³) (1 hr)
ラット	吸入	LC ₅₀	873 ppm (2,000 mg/m ³) (2 hr)
ラット	吸入	LC ₅₀	1,800 mg/m ³ (2 hr)
マウス	吸入	LCLo	1,250 mg/m ³ (2 hr)
マウス	吸入	LC ₅₀	1,750 mg/m ³ (2 hr)
マウス	吸入	LC ₅₀	2,000 mg/m ³ (2 hr)
ウサギ	経皮	LDLo	15 mg/kg
ウサギ	経皮	LD ₅₀	88 mg/kg

注：() 内の時間は曝露時間を示す。

本物質は眼、皮膚、気道を刺激する。吸入すると咳、咽頭痛を生じ、皮膚に付くと発赤、眼に入ると痛み、重度の熱傷を生じる⁷⁾。

② 中・長期毒性

ア) Sprague-Dawley ラット雌雄各 10 匹を 1 群とし、0、0.1、1、10 mg/kg/day を 14 日間(7 日/週) 強制経口投与した結果、死亡や一般状態、体重、血液、血液生化学への影響はなかった。また、剖検で異常所見はなく、臓器の重量や組織への影響もなかった。なお、用量設定のために実施した予備試験では、100 mg/kg の投与で強い毒性がみられた⁸⁾。この結果から、NOAEL を 10 mg/kg/day 以上とする。

イ) Wistar ラット雌雄各 10 匹を 1 群とし、0、5、15、45 mg/kg/day を 28 日間(7 日/週) 強制経口投与した結果、5 mg/kg/day 以上の群の雌雄で肝臓及び腎臓の相対重量の有意な増加を認め、15 mg/kg/day 以上の群の雌雄でヘモグロビン濃度及びヘマトクリット値が用量依存的に減少し、低色素性貧血が示唆された。45 mg/kg/day 群の雄で体重増加の抑制、ALT、ALP、グルタミン酸脱水素酵素活性の上昇、雌でコリンエステラーゼ活性の阻害を認め、雌雄の肝臓で肝細胞傷害(著明な小葉辺縁帯の肝細胞核肥大、単細胞壊死など)がみられた。また、雌雄 15 匹に 50~60 mg/kg/day を 28 日間(7 日/週) 強制経口投与した結果、著明な中毒症状(感情鈍麻、緊張減退、血の混じった流涎)がみられ、3 日目に雄 1 匹が死亡し、剖検で胃粘膜の広範な出血がみられた。さらに雌雄で GGT の著明な上昇と N-メチル基分解酵素、チトクローム P-450 の有意な低下がみられた⁹⁾。この結果から、LOAEL を 5 mg/kg/day とする。

ウ) Sprague-Dawley ラット雌雄各 20 匹を 1 群とし、0、5、15、50 mg/kg/day を 13 週間(7 日/週)

強制経口投与した結果、50 mg/kg/day 群の雌雄で著明な流涎、雄で体重増加の有意な抑制を認め、雄 4 匹が死亡した。眼への影響はなかったが、50 mg/kg/day 群の雌雄で平均赤血球ヘモグロビン量、平均赤血球ヘモグロビン濃度の低下がみられ、雄ではさらにヘモグロビンの低下もみられた。15 mg/kg/day 以上の群の雄で好中球の有意な増加、50 mg/kg/day 群の雌雄で ALT、ALP の有意な上昇を認め、50 mg/kg/day 群の雄でビリルビンの増加、雌雄でコレステロール、グロブリン、クレアチニンの減少などもみられた。15 mg/kg/day 以上の群の雌雄で肝臓の絶対及び相対重量の有意な増加を認め、15 mg/kg/day 以上の群の雌で腎臓絶対重量、50 mg/kg/day 群の雄で腎臓相対重量の増加がみられた。15 mg/kg/day 以上の群の全数で肝臓の胆管増生と空胞化を伴った肝細胞の巨細胞化を認め、5 mg/kg/day 群でも肝細胞の巨細胞化は 1 匹にみられた。また、15 mg/kg/day 以上の群の雄の腎臓で尿細管上皮細胞の巨大核が用量依存的にみられ、雌でも 50 mg/kg/day 群で尿細管上皮細胞の巨大核がみられた。なお、雌雄各 10 匹を 1 群とし、同様に投与して 1 ヶ月で屠殺した試験でも、肝細胞の巨細胞化は 50 mg/kg/day 群の全数、15 mg/kg/day 群の雄 9/10 匹、雌 5/10 匹でみられた¹⁰⁾。この結果から、NOAEL を 5 mg/kg/day とする。

エ) Fischer344 ラット雌雄各 5 匹を 1 群とし、0、31.3、62.5、125、250、500 ppm を 2 週間（6 時間/日、5 日/週）吸入させた結果、250 ppm 以上の群の雄及び 500 ppm 群の雌が 1 日後に全数死亡し、125 ppm 群の雄及び 250 ppm 群の雌の全数、125 ppm 群の雌 1 匹が 5 日後までに死亡した。125、250 ppm 群で嗜眠、運動失調、異常呼吸、眼・鼻の分泌物がみられ、最終体重と体重増加は 62.5 ppm 群の雄及び 125 ppm 群の雌で有意に低く、62.5、125 ppm 群の雌で腎臓の絶対及び相対重量、125 ppm 群の雌で肝臓の絶対及び相対重量の有意な増加を認め、剖検時には 250 ppm 以上の群のほとんどで暗色化した肝臓がみられ、125 ppm 群の雄 4 匹の鼻で痂皮もみられた。早期に死亡した 250 ppm 以上の群では、雌雄全数の肝臓で主に門脈周囲に肝細胞の壊死、うっ血、クッパー細胞及び肝細胞による赤血球貪食が認められたが、125 ppm 群の雄の全数及び雌 1 匹にみられた肝細胞壊死及びうっ血は小葉中心性であり、残りの 125 ppm 群の雌 4 匹の肝臓では小葉中心性の肝細胞の空胞化のみがみられた¹¹⁾。この結果から、NOAEL を 31.3 ppm（曝露状況で補正：5.59 ppm）とする。

オ) B6C3F₁ マウス雌雄各 5 匹を 1 群とし、0、31.3、62.5、125、250、500 ppm を 2 週間（6 時間/日、5 日/週）吸入させた結果、250 ppm 以上の群の全数が 1 日目に死亡し、125 ppm 群の全数も 2～3 日目に死亡した。62.5 ppm 群の雌雄で異常呼吸、嗜眠、痩せがみられ、最終体重は有意に低かった。31.3 ppm 群の雌雄の肝臓、雌の腎臓、雄の精巣で相対重量の有意な増加、雄の胸腺で相対重量の有意な減少を認め、剖検では死亡したマウスの多くで肝臓の暗色化がみられた。肝臓では、125 ppm 以上の群の雄及び 250 ppm 群の雌の全数で門脈周囲の壊死やうっ血、赤血球貪食を認めた。125 ppm 群の雌では門脈周囲のうっ血は 1 匹、赤血球貪食は 3 匹にみられただけであったが、小葉中心性の肝細胞壊死は全数にみられた¹¹⁾。この結果から、LOAEL を 31.3 ppm（曝露状況で補正：5.59 ppm）とする。

カ) Fischer344 ラット雌雄各 10 匹を 1 群とし、0、4、8、16、32、64 ppm を 3 ヶ月間（6 時間/日、5 日/週）吸入させた結果、死亡や一般状態、体重への影響はなかったが、曝露濃度及び曝

露期間に依存した血清コリンエステラーゼ活性の有意な低下を 8 ppm 以上の群の雌及び 32 ppm 群の雄で認め、分析の結果、ブチリルコリンエステラーゼ活性が阻害されたものと考えられた。それ以外の血液、血液生化学成分では影響はなかった。16 ppm 以上の群の雄及び 64 ppm 群の雌で肝臓相対重量、32 ppm 以上の群の雄及び 64 ppm 群の雌での腎臓相対重量の有意な増加を認め、肝臓絶対重量は 64 ppm 群の雄で有意に高かった。曝露に関連した組織への影響は鼻部に限られ、4 ppm 及び 16 ppm 以上の群の雄及び 8 ppm 以上の群の雌で呼吸上皮の過形成、64 ppm 群の雌雄で嗅上皮の壊死、雌で呼吸上皮の扁平上皮化生の発生率に有意な増加を認めた。有意差はなかったものの、呼吸上皮過形成の発生率増加は 8 ppm 群の雄でもみられ、軽微だが重症度の増加もみられた¹¹⁾。この結果から、LOAEL を 4 ppm (曝露状況で補正 : 0.71 ppm) とする。

生殖影響としては、雄の精巣や精巣上体、精巣上体尾の重量、精子数、雌の性周期への影響はなかった¹¹⁾。

キ) B6C3F₁ マウス雌雄各 10 匹を 1 群とし、0、4、8、16、32、64 ppm を 3 ヶ月間 (6 時間/日、5 日/週) 吸入させた結果、各群で死亡はなかったが、8~9 日目に 64 ppm 群の雌雄で異常呼吸がみられ、8 ppm 以上の群の雄及び 32 ppm 以上の群の雌で体重増加の有意な抑制を認めた。血液への影響はなく、臓器重量にも影響はなかった。組織への影響は鼻腔に限られ、16 ppm 以上の群の雄及び 32 ppm 群の雌で腺の過形成、32 ppm 以上の群の雌雄で呼吸上皮の扁平上皮化生、嗅上皮の萎縮、鼻甲介の萎縮、32 ppm 以上の群の雌及び 64 ppm 群の雄で呼吸上皮の硝子様変性、64 ppm 群の雌雄で化膿性炎症の発生率に有意な増加を認めた。この他にも嗅上皮の壊死が 16 ppm 群の雌及び 32 ppm 群の雌雄でみられ、雌の発生率は有意に高かった¹¹⁾。この結果から、NOAEL を 4 ppm (曝露状況で補正 : 0.71 ppm) とする。

生殖影響としては、雄の精巣や精巣上体、精巣上体尾の重量、精子数への影響はなかったが、雌では性周期の有意な延長が 64 ppm 群でみられた¹¹⁾。

ク) Wistar ラット雌雄各 10 匹を 1 群とし、0、1、5、25 ppm を 90 日間 (6 時間/日、5 日/週) 吸入させた結果 (OECD TG413 準拠)、25 ppm 群の雄で体重増加、雌雄で肝臓及び腎臓の相対重量の増加がみられた。また、25 ppm 群の雌で血清のコリンエステラーゼ活性の有意な低下がみられたが、剖検及び病理組織学的検査では投与に関連した所見はなかった¹²⁾。この結果から、NOAEL を 5 ppm (曝露状況で補正 : 0.89 ppm) とする。

③ 生殖・発生毒性

ア) Wistar ラット雌 25 匹を 1 群とし、0、1、4、12 mg/kg/day を妊娠 6 日から妊娠 19 日まで強制経口投与した結果、死亡や一般状態、体重への影響はなかったが、4 mg/kg/day 以上の群で肝臓の絶対及び相対重量の有意な増加を認めた。しかし、受胎率や黄体数、着床数、着床前及び着床後の胚死亡、吸収胚などに影響はなかった。また、胎仔では体重、同腹仔数、生存数、性比などに影響はなく、外表系や骨格系、内臓系の奇形や変異の発生率にも増加はなかった¹³⁾。この結果から、NOAEL を母ラットで 1 mg/kg/day、胎仔で 12 mg/kg/day

以上とする。

④ ヒトへの影響

ヒトへの影響に関して、知見は得られなかった。

(3) 発がん性

① 主要な機関による発がんの可能性の分類

国際的に主要な機関での評価に基づく本物質の発がんの可能性の分類については、表 3.2 に示すとおりである。

表 3.2 主要な機関による発がんの可能性の分類

機 関 (年)		分 類
WHO	IARC	—
EU	EU	—
USA	EPA	—
	ACGIH	—
	NTP	—
日本	日本産業衛生学会	—
ドイツ	DFG	—

② 遺伝子傷害性に関する知見

ア) *in vitro* 試験系では、代謝活性化系 (S9) 添加の有無にかかわらずネズミチフス菌で遺伝子突然変異を誘発しなかった報告^{14,15)}、S9 無添加のネズミチフス菌で遺伝子突然変異を誘発したが、S9 添加では誘発しなかった報告^{11,16)}があった。S9 添加の有無にかかわらずチャイニーズハムスター卵巣細胞 (CHO) で染色体異常を誘発し¹⁵⁾、S9 添加のチャイニーズハムスター肺細胞 (CHL) で染色体異常を誘発したが、S9 無添加では誘発しなかった¹⁷⁾。

イ) *in vivo* 試験系では、経口投与したマウスの骨髄細胞^{15,18)}、吸入曝露したマウスの末梢血¹¹⁾で小核を誘発しなかった。

③ 実験動物に関する発がん性の知見

ア) Fischer344 ラット雌雄各 50 匹を 1 群とし、0、16、32、64 ppm を 2 年間 (6 時間/日、5 日/週) 吸入させた結果、32 ppm 以上の群の雄で生存率が有意に低下し、64 ppm 群の雄の体重は 24 週以降、一貫して低かった。発がん性については、雌雄で大顆粒リンパ球性白血病の発生率に増加傾向を認め、64 ppm 群の雄でその発生率は有意に高かった。なお、雄の包皮腺で腺腫の発生率に増加傾向がみられ、64 ppm 群の発生率は背景データを超えていたが、発生率に有意差がなく、用量反応関係もなかったことから、曝露に関連したものではないと考えられた。したがって、この試験条件下では雄で幾つかの発がん性の証拠があったが、雌では発がん性の証拠はなかったと結論できる。

非腫瘍性の影響については、組織への影響は鼻でみられ、16 ppm 以上の群の雌雄で呼吸上皮の過形成、呼吸上皮の腺の過形成、嗅上皮の基底細胞過形成、16 ppm 以上の群の雄及び32 ppm 群の雌で嗅上皮の萎縮、16 ppm 以上の群の雄及び64 ppm 群の雌で嗅上皮の呼吸上皮化生、32 ppm 以上の群の雄及び64 ppm 群の雌で慢性活動性炎症、64 ppm 群の雌雄で嗅上皮の壊死、嗅上皮の硝子滴蓄積、雄で嗅上皮の過形成、嗅上皮の腺の過形成、嗅上皮の変性の発生率に有意な増加を認めた¹¹⁾。この結果から、一般毒性の LOAEL を 16 ppm（曝露状況で補正：2.9 ppm）とする。

イ) B6C3F₁ マウス雌雄各 50 匹を 1 群とし、0、8、16、32 ppm を 2 年間（6 時間/日、5 日/週）吸入させた結果、生存率に影響はなかったが、32 ppm 群の雄の体重は最初の 1 年間は一貫して低く、2 年目に入って回復した。雌の体重は 16 ppm 群で 73 週以降、32 ppm 群で 21 週以降、一貫して低かった。発がん性については、32 ppm 群の雌雄の呼吸上皮で腺腫の発生率に有意な増加を認めた。また、8、32 ppm 群の雄のハーダー腺で腺腫の発生率に有意な増加を認め、32 ppm 群の発生率はわずかに背景データの上限を超えるものであった。したがって、この試験条件下では雌雄で幾つかの発がん性の証拠があったと結論できる。

非腫瘍性の影響については、1 年目の曝露が終わった頃から角膜の慢性活動性炎症が濃度依存的にみられるようになり、その発生率は 32 ppm 群の雌雄で有意に高く、32 ppm 群の雌では白内障の発生率も高かった。組織への影響は鼻腔でみられ、8 ppm 以上の群の雌雄で呼吸上皮の過形成、呼吸上皮の腺の過形成、鼻甲介の萎縮、8 ppm 以上の群の雄及び 16 ppm 以上の群の雌で呼吸上皮の扁平上皮化生、化膿性炎症、16 ppm 以上の群の雌雄で嗅上皮の萎縮、16 ppm 以上の群の雌及び 32 ppm 群の雄で嗅上皮の呼吸上皮化生の発生率に有意な増加を認めた¹¹⁾。この結果から、一般毒性の LOAEL を 8 ppm（曝露状況で補正：1.4 ppm）とする。

④ ヒトに関する発がん性の知見

ヒトでの発がん性に関して、知見は得られなかった。

(4) 健康リスクの評価

① 評価に用いる指標の設定

非発がん影響については一般毒性及び生殖・発生毒性等に関する知見が得られている。発がん性については動物実験で発がんの可能性を示唆する結果が得られているものの、ヒトでの知見はなく、ヒトに対する発がん性の有無については判断できない。このため、閾値の存在を前提とする有害性について、非発がん影響に関する知見に基づき無毒性量等を設定することとする。

経口曝露については、中・長期毒性イ) に示したラットの試験から得られた LOAEL 5 mg/kg/day（肝臓及び腎臓の相対重量増加）を LOAEL であることから 10 で除し、さらに慢性曝露への補正が必要なことから 10 で除した 0.05 mg/kg/day が信頼性のある最も低用量の知見と判断し、これを無毒性量等に設定する。

吸入曝露については、中・長期毒性力) に示したラットの試験から得られた LOAEL 4 ppm (鼻の呼吸上皮の過形成) を曝露状況で補正して 0.71 ppm とし、LOAEL であることから 10 で除し、さらに慢性曝露への補正が必要なことから 10 で除した 0.0071 ppm (0.016 mg/m³) が信頼性のある最も低濃度の知見と判断し、これを無毒性量等に設定する。

② 健康リスクの初期評価結果

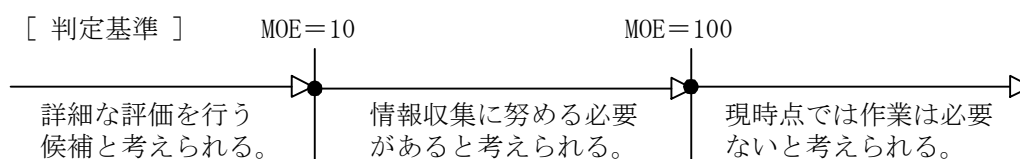
ア) 経口曝露

【予測最大曝露量に基づく Margin of Exposure (MOE) 等による健康リスクの判定】

経口曝露については、曝露濃度が把握されていないため、健康リスクの判定はできなかった。

表 3.3 経口曝露による健康リスク (MOE の算定)

曝露経路・媒体		平均曝露量	予測最大曝露量	無毒性量等	MOE
経口	飲料水	—	—	0.05 mg/kg/day ラット	—
	地下水	—	—		—



【総合的な判定】

化管法に基づく 2021 年度の下水道への移動量をもとに推定した排出先河川中濃度から算出した最大曝露量は 0.0024 µg/kg/day であり、参考としてこれと無毒性量等 0.05 mg/kg/day から、動物実験結果より設定された知見であるために 10 で除して求めた MOE は 2,100 となる。食物からの曝露量は得られていないが、環境媒体から食物経由で摂取される曝露量は少ないと推定されることから、その曝露量を加えても MOE が大きく変化することはないと考えられる。

したがって、総合的な判定としては、本物質の経口曝露については、健康リスクの評価に向けて経口曝露の情報収集等を行う必要性は低いと考えられる。

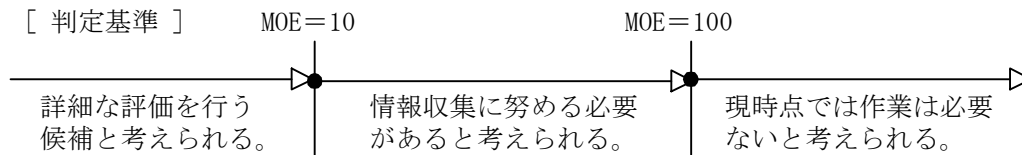
イ) 吸入曝露

【予測最大曝露濃度に基づく Margin of Exposure (MOE) 等による健康リスクの判定】

吸入曝露については、曝露濃度が把握されていないため、健康リスクの判定はできなかった。

表 3.4 吸入曝露による健康リスク (MOE の算定)

曝露経路・媒体		平均曝露濃度	予測最大曝露濃度	無毒性量等	MOE
吸入	環境大気	—	—	0.016 mg/m ³ ラット	—
	室内空気	—	—		—



【総合的な判定】

化管法に基づく 2021 年度の大気への届出排出量をもとに推定した大気中濃度（年平均値）の最大値は $0.0059 \mu\text{g}/\text{m}^3$ であり、参考としてこれと無毒性量等 $0.016 \text{mg}/\text{m}^3$ から、動物実験結果より設定された知見であるために 10 で除して算出した MOE は 270 となる。

したがって、総合的な判定としては、本物質の一般環境大気からの吸入曝露については、健康リスクの評価に向けて吸入曝露の情報収集等を行う必要性は低いと考えられる。

4. 生態リスクの初期評価

水生生物の生態リスクに関する初期評価を行った。

(1) 水生生物に対する毒性値の概要

本物質の水生生物に対する毒性値に関する知見を収集し、生物群（藻類等、甲殻類等、魚類及びその他の生物）ごとに整理すると、表 4.1 のとおりとなった。

表 4.1 水生生物に対する毒性値の概要

生物群	急性	慢性	毒性値 [µg/L]	生物名	生物分類/和名	エンドポイント /影響内容	曝露期間 [日]	試験の 信頼性	採用の 可能性	文献 No.
藻類等		○	2,560	<i>Raphidocelis subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO (RATE)	2	D	C	2)- 2021186
		○	10,900	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	NOEC GRO (RATE)	3	B	B	3)-1
	○		55,800	<i>Raphidocelis subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (RATE)	2	D	C	2)- 2021186
	○		>98,100	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (RATE)	3	B	B	3)-1
甲殻類 等	○		3,360	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	A	A	3)-2
	○		11,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	1	B	B	1)-5718
	○		32,000	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	1	B	B	1)-707
魚類	○		<u>1,440</u>	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッド ミノ	LC ₅₀ MOR	4	A	A	1)-12859
	○		1,530	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッド ミノ	LC ₅₀ MOR	4	A	A	1)-12858
	○		1,900	<i>Leuciscus idus</i>	コイ目	LC ₅₀ MOR	2	D	C	1)-547
その他	○		3,000	<i>Xenopus laevis</i>	アフリカ ツメガエル	LC ₅₀ MOR	4	B	B	1)-5363
	○		664,000	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	IGC ₅₀ POP	2	B	B	1)-8080

毒性値 (太字) : PNEC 導出の際に参照した知見として本文で言及したもの

毒性値 (太字下線) : PNEC 導出の根拠として採用されたもの

試験の信頼性 : 本初期評価における信頼性ランク

- A : 試験は信頼できる、B : 試験は条件付きで信頼できる、C : 試験の信頼性は低い、D : 信頼性の判定不可、
E : 信頼性は低くないと考えられるが、原著にあたって確認したものではない

採用の可能性 : PNEC 導出への採用の可能性ランク

- A : 毒性値は採用できる、B : 毒性値は条件付きで採用できる、C : 毒性値は採用できない、
— : 採用の可能性は判断しない

エンドポイント

EC₅₀ (Median Effective Concentration) : 半数影響濃度、IGC₅₀ (Median Growth Inhibitory Concentration) : 半数増殖阻害濃度、
LC₅₀ (Median Lethal Concentration) : 半数致死濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration) : 無影響濃度

影響内容

GRO (Growth) : 生長 (植物)、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、

POP (Population Change) : 個体群の変化 (増殖)

毒性値の算出方法

RATE : 生長速度より求める方法 (速度法)

評価の結果、採用可能とされた知見のうち、生物群ごとに急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて最も小さい毒性値を予測無影響濃度 (PNEC) 導出のために採用した。その知見の概要は以下のとおりである。

1) 藻類等

OECD テストガイドライン No. 201 に準拠して、緑藻類 *Desmodesmus subspicatus* (旧名 *Scenedesmus subspicatus*) の生長阻害試験が、GLP 試験として実施された³⁾⁻¹。設定試験濃度は 0 (対照区)、0.0152、0.0457、0.137、0.412、1.23、3.7、11.1、33.3、100 mg/L (公比 3) であった。被験物質の実測濃度は、設定濃度の±20%の範囲であった。生長阻害について、最高濃度においても 50%阻害が見られず、速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は、実測濃度に基づき 98,100 µg/L 超とされた。また、生長阻害に関する速度法による 72 時間無影響濃度 (NOEC) は、実測濃度に基づき 10,900 µg/L であった。

2) 甲殻類等

OECD テストガイドライン No.202 に準拠して、オオミジンコ *Daphnia magna* の急性遊泳阻害試験が、GLP 試験として実施された³⁾⁻²。試験は止水式で実施され、設定試験濃度は、0 (対照区)、0.2、0.39、0.78、1.56、3.13、6.25、12.5、25、50 mg/L (公比約 2) であった。試験用水には、国際標準化機構の規格 (ISO 10706) に従った M4 培地 (硬度 220~320 mg/L、CaCO₃ 換算) が用いられた。被験物質の実測濃度は、設定濃度の±20%の範囲であった。遊泳阻害に関する 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は、実測濃度に基づき 3,360 µg/L であった。

3) 魚 類

Geiger ら¹⁾⁻¹²⁸⁵⁹ は、ファットヘッドミノ *Pimephales promelas* の急性毒性試験を実施した。試験は流水式 (18 倍容量換水/日) で行われ、設定試験濃度は 0 (対照区)、0.88、1.36、2.09、3.22、4.96 mg/L (公比 約 1.5) であった。試験用水には、硬度 42.8 mg/L (CaCO₃ 換算) のスペリオル湖水又は脱塩素水道水が用いられた。分析時の回収率で補正した被験物質の平均実測濃度は、<0.20 (対照区)、1.08、1.47、2.21、3.33、5.17 mg/L であった。96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) は、実測濃度に基づき 1,440 µg/L であった。

4) その他の生物

Dawson ら¹⁾⁻⁵³⁶³ は、アフリカツメガエル *Xenopus laevis* の 5 日齢幼生を用いて急性毒性試験を実施した。試験は半止水式 (毎日換水) で行われ、設定試験濃度区は対照区及び 5~8 濃度区であった。試験には FETAX 溶液 (pH8.1) が用いられた。96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) は、設定濃度に基づき 3,000 µg/L であった。

(2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性及び慢性毒性のそれぞれについて、上記本文で示した毒性値に情報量に応じたアセスメント係数を適用し予測無影響濃度 (PNEC) を求めた。

急性毒性値

藻類等	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	72 時間 EC ₅₀ (生長阻害)	98,100 µg/L 超
甲殻類等	<i>Daphnia magna</i>	48 時間 EC ₅₀ (遊泳阻害)	3,360 µg/L
魚 類	<i>Pimephales promelas</i>	96 時間 LC ₅₀	1,440 µg/L
その他	<i>Xenopus laevis</i>	96 時間 LC ₅₀	3,000 µg/L

アセスメント係数：100 [3 生物群 (藻類等、甲殻類等、魚類) 及びその他の生物について信頼できる知見が得られたため]

これらの毒性値のうち、その他の生物を除いた最も小さい値 (魚類の 1,440 µg/L) をアセスメント係数 100 で除することにより、急性毒性値に基づく PNEC 値 14 µg/L が得られた。

慢性毒性値

藻類等	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	72 時間 NOEC (生長阻害)	10,900 µg/L
-----	--------------------------------	-------------------	-------------

アセスメント係数：100 [1 生物群 (藻類等) の信頼できる知見が得られたため]

得られた毒性値 (藻類等の 10,900 µg/L) をアセスメント係数 100 で除することにより、慢性毒性値に基づく PNEC 値 100 µg/L が得られた。

本物質の PNEC としては、魚類の急性毒性値から得られた 14 µg/L を採用する。

(3) 生態リスクの初期評価結果

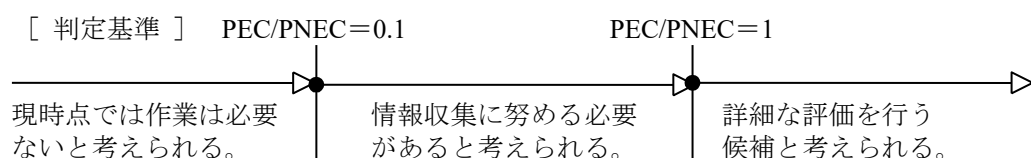
【PEC/PNEC 比による生態リスクの判定】

本物質については、予測環境中濃度 (PEC) を設定できるデータが得られなかったため、生態リスクの判定はできなかった。

表 4.2 生態リスクの判定結果

水 質	平均濃度	最大濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
公共用水域・淡水	データは得られなかった	データは得られなかった	14 µg/L	—
公共用水域・海水	データは得られなかった	データは得られなかった		—

注：公共用水域・淡水は、河川河口域を含む



【総合的な判定】

化管法に基づく 2021 年度の公共用水域・淡水への届出排出量はなかったが、下水道の移動量から推定した公共用水域への排出量を全国河道構造データベースの平水流量で除し、希釈のみを考慮した河川中濃度を推定すると、最大で 0.060 µg/L であった。この値と PNEC の比は 0.004 である。

したがって、総合的な判定としては、現時点では作業の必要はないと考えられる。

5. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 大木道則ら (1989) : 化学大辞典 東京化学同人 : 2068.
- 2) Haynes.W.M.ed. (2013) : CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, (Version 2013), CRC Press.
- 3) Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997) : Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 179.
- 4) O'Neil, M.J. ed. (2013) : The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 15th Edition, The Royal Society of Chemistry: 1447-1448.
- 5) Verschueren, K. ed. (2009) : Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 5th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).
- 6) Hansch, C. et al. (1995) : Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book: 5.
- 7) 経済産業公報(2002.3.26).
- 8) 2-プロピン-1-オール (被験物質番号 K-1537) の微生物による分解度試験 (試験番号 : 21537) 最終報告書.(J-CHECK).
- 9) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.93.
- 10) Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., and Michalenko, E.M. ed. (1991) : Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xiv.
- 11) 環境庁環境保健部環境安全課 : 化学物質分析法開発調査報告書 (平成6年度) . 化学物質データベース(Webkis-Plus).
- 12) U.S. Environmental Protection Agency, BCFBAF™ v.3.02.
- 13) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.01.
- 14) 経済産業省 : 化学物質の製造輸入数量 (http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/volume_index.html, 2023.05.15 現在).
- 15) 化学工業日報社(2018) : 実務者のための化学物質等法規制便覧 2018 年度版.

(2) 曝露評価

- 1) 経済産業省製造産業局化学物質管理課、環境省環境保健部環境安全課 : 特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律 (化学物質排出把握管理促進法) 第8条第4項に基づき事業者から届け出された化学物質の排出量・移動量及び法第9条第2項に基づき国が算出 (推計) した届出外排出量の集計結果. (https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/law/prtr/6.html, 2023.03.03 現在).
- 2) 経済産業省製造産業局化学物質管理課、環境省環境保健部環境安全課 (2023) : 届出外排出量の推計値の対象化学物質別集計結果 3.算出事項 (対象業種・非対象業種・家庭・移動体) 別の集計 表 3-1 全国,

- (https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/law/prtr/r30kohyo/shukeikekka_csv.html, 2023.03.03 現在).
- 3) 経済産業省製造産業局化学物質管理課、環境省環境保健部環境安全課 (2023) : 令和3年度 PRTR 届出外排出量の推計方法の詳細.
(<https://www.env.go.jp/chemi/prtr/result/todokedegaiR03/syosai.html>, 2023.03.03 現在).
 - 4) 国立環境研究所 (2024) : 令和5年度化学物質環境リスク初期評価等実施業務報告書.
 - 5) 経済産業省 (2019) : 経済産業省－低煙源工場拡散モデル (Ministry of Economy, Trade and Industry – Low rise Industrial Source dispersion Model) METI-LIS モデル ver.3.4.3.
 - 6) G-CIEMS (Grid-Catchment Integrated Environmental Modeling System) Ver.1.2.

(3) 健康リスクの初期評価

- 1) Dix KJ, Coleman DP, Fossett JE, Gaudette NF Jr, Stanley AP, Thomas BF, Jeffcoat AR. (2001): Disposition of propargyl alcohol in rat and mouse after intravenous, oral, dermal and inhalation exposure. *Xenobiotica*. 31: 357-375.
- 2) DeMaster EG, Dahlseid T, Redfern B. (1994): Comparative oxidation of 2-propyn-1-ol with other low molecular weight unsaturated and saturated primary alcohols by bovine liver catalase *in vitro*. *Chem Res Toxicol*. 7: 414-419.
- 3) Moridani MY, Khan S, Chan T, Teng S, Beard K, O'Brien PJ. (2001): Cytochrome P450 2E1 metabolically activates propargyl alcohol: propiolaldehyde-induced hepatocyte cytotoxicity. *Chem Biol Interact*. 130-132: 931-942.
- 4) Banijamali AR, Xu Y, Strunk RJ, Gay MH, Ellis MC, Putterman GJ, Sumner SJ. (1999): Identification of metabolites of [1,2,3-¹³C]Propargyl alcohol in rat urine by ¹³C NMR and mass spectrometry. *J Agric Food Chem*. 47: 1717-1729.
- 5) Banijamali AR, Xu Y, DeMatteo V, Strunk RJ, Sumner SJ. (2000): Identification of metabolites of [1,2,3-¹³C]Propargyl alcohol in mouse urine by ¹³C NMR and mass spectrometry and comparison to rat. *J Agric Food Chem*. 48: 4693-4710.
- 6) RTECS[®]: Registry of Toxic Effects of Chemical Substances.
- 7) IPCS (1997): International Chemical Safety Cards. 0673. Propargyl alcohol.
- 8) Komsta E, Secours VE, Chu I, Valli VE, Morris R, Harrison J, Baranowski E, Villeneuve DC. (1989): Short-term toxicity of nine industrial chemicals. *Bull Environ Contam Toxicol*. 43: 87-94.
- 9) Bayer AG. (1984): Propargyl alcohol - subacute oral toxicity tests on rats. Cited in: BG Chemie (2000): Toxicological evaluation. No. 116. Propargyl alcohol.
- 10) Toxicity Research Laboratory (1987): Rat oral subchronic toxicity study with propargyl alcohol. Cited in: US EPA (1990): Integrated Risk Information System (IRIS). Chemical assessment summary for propargyl alcohol., BG Chemie (2000): Toxicological evaluation. No. 116. Propargyl alcohol.
- 11) NTP (2008): NTP technical report on the toxicology and carcinogenesis studies of propargyl alcohol (CAS No. 107-19-7) in F344/N rats and B6C3F₁ mice (inhalation studies). NTP TR 552.

- 12) BASF AG. (1992): Study on the inhalation toxicity of propargylalkohol as a vapor in rats – 90-day test. Project No. 50I0969/88100. Cited in: BG Chemie (2000): Toxicological evaluation. No. 116. Propargyl alcohol.
- 13) European Chemical Agency: Information on registered substances. prop-2-yn-1-ol. Toxicological information, Developmental toxicity/teratogenicity.
(<https://www.echa.europa.eu/web/guest/registration-dossier/-/registered-dossier/15851/7/9/3>
2023.11.14 現在)
- 14) BASF AG. (1979): Report on the testing of propyn-1-ol-3 in the Ames test. Cited in: BG Chemie (2000): Toxicological evaluation. No. 116. Propargyl alcohol.
- 15) Blakey DH, Maus KL, Bell R, Bayley J, Douglas GR, Nestmann ER. (1994): Mutagenic activity of 3 industrial chemicals in a battery of *in vitro* and *in vivo* tests. *Mutat Res.* 320: 273-283.
- 16) Basu AK, Marnett LJ. (1984): Molecular requirements for the mutagenicity of malondialdehyde and related acroleins. *Cancer Res.* 44: 2848-2854.
- 17) Ryu JC, Kim YJ. (2004): Evaluation of the genetic toxicity of synthetic chemicals [XII] -*in vitro* chromosomal aberration assay with 11 chemicals in Chinese hamster lung fibroblast-. *Environ Mutagens & Carcinogens.* 24: 99-107.
- 18) Hoechst AG. (1990): Propargylalkohol – Micronucleus test in male and female NMRI mice after oral administration. Cited in: BG Chemie (2000): Toxicological evaluation. No. 116. Propargyl alcohol.

(4) 生態リスクの初期評価

1) U.S. EPA 「ECOTOX」

- 547 : Juhnke, I., and D. Luedemann (1978): Results of the Investigation of 200 Chemical Compounds for Acute Fish Toxicity with the Golden Orfe Test (Ergebnisse der Untersuchung von 200 Chemischen Verbindungen auf Akute Fischtoxizität mit dem Goldorfentest). *Z.Wasser-Abwasser-Forsch.* 11(5):161-164.
- 707 : Bringmann, G., and R. Kühn (1982): Results of Toxic Action of Water Pollutants on *Daphnia magna* Straus Tested by an Improved Standardized Procedure. *Z.Wasser-Abwasser-Forsch.* 15(1):1-6.
- 5363 : Dawson, D.A., T.W. Schultz, L.L. Baker, and T.S. Wilke (1990): Comparative Developmental Toxicity of Acetylenic Alcohols on Embryos and Larvae of *Xenopus laevis*. In: W.G.Landis and W.H.Van der Schalie (Eds.), *Aquatic Toxicology and Risk Assessment*, Volume 13, ASTM STP 1096, Philadelphia, PA :267-277.
- 5718 : Bringmann, G., and R. Kühn (1977): Results of the Damaging Effect of Water Pollutants on *Daphnia magna* (Befunde der Schädigung Wassergefährdender Stoffe Gegen *Daphnia magna*). *Z.Wasser-Abwasser-Forsch.* 10(5):161-166.
- 8080 : Schultz, T.W., and M. Tichy (1993): Structure-Toxicity Relationships for Unsaturated Alcohols to *Tetrahymena pyriformis*: C5 and C6 Analogs and Primary Propargylic Alcohols. *Bull.Environ.Contam.Toxicol.* 51(5):681-688.

- 12858 : Geiger, D.L., S.H. Poirier, L.T. Brooke, and D.J. Call (1986): Acute Toxicities of Organic Chemicals to Fathead Minnows (*Pimephales promelas*), Volume 3. Ctr.for Lake Superior Environ.Stud., Univ.of Wisconsin-Superior, Superior, WI :328.
- 12859 : Geiger, D.L., D.J. Call, and L.T. Brooke (1988): Acute Toxicities of Organic Chemicals to Fathead Minnows (*Pimephales promelas*), Volume 4. Ctr.for Lake Superior Environ.Stud., Volume 4, Univ.of Wisconsin-Superior, Superior, WI :355.
- 2) U.S. EPA 「ECOTOX」 以外
- 2021186 : Chen, C., K.L., Kuo, and J.W. Fan (2012): Toxicity of Propargylic Alcohols on Green Alga—*Pseudokirchneriella Subcapitata*. J. Environ. Monit.14(1): 181-186.
- 3) European Chemicals Agency : Registered Substance, Prop-2-yn-1-ol.
(<https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/15851>, 2023.07.06 現在)
1. Toxicity to aquatic algae and cyanobacteria. 001 Key Experimental result (2022).
 2. Short-term toxicity to aquatic invertebrates. 001 Key Experimental result (2006).