

厚生労働省発薬食 0427 第 6 号
平成 23 年 4 月 27 日

薬事・食品衛生審議会会長
望月 正隆 殿

厚生労働大臣 細川 律夫

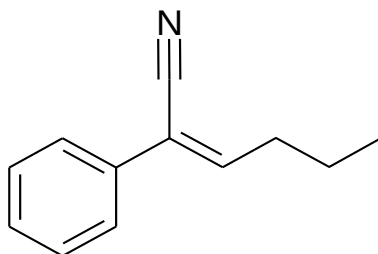
諮 問 書

下記の事項について、毒物及び劇物取締法（昭和 25 年法律第 303 号）第 23 条の 2 の規定に基づき、貴会の意見を求めます。

記

（2 Z）－2－フェニル－2－ヘキセンニトリル及びこれを含有する製剤の毒物及び劇物取締法に基づく劇物からの除外について

(2Z)-2-フェニル-2-ヘキセンニトリル及びこれを含有する製剤の毒物及び劇物取締法に基づく劇物からの除外について



$C_{12}H_{13}N$

CAS No. : 130786-09-3

名称 (英 語 名) (2Z)-2-Phenyl-2-hexenenitrile、Butylidene(phenyl)acetonitrile
(日本語名) (2Z)-2-フェニル-2-ヘキセンニトリル、ブチリデン (フェニル) アセトニトリル

経緯

上記化学物質は、毒物及び劇物指定令（昭和40年政令第2号）第2条第1項第32号の有機シアン化合物及びこれを含有する製剤に該当し、劇物となるものであるが、今般、事業者より、原体の毒性データが提出され、劇性を持たないものであることが判明したことにより、劇物から除外するものである。

用途

香粧品用香料の調合原料

物理的・化学的性質

別添1を参照

毒性

別添2を参照

事務局案

(2Z)-2-フェニル-2-ヘキセンニトリル及びこれを含有する製剤を、「劇物」から除外することが適当である。

【別添 1】

物理的・化学的性質（原体）

項目	
名称	(英 語 名) (2Z)-2-Phenyl-2-hexenenitrile (日本語名) (2 Z) - 2 - フェニル - 2 - ヘキセンニトリル
CAS 番号	130786-09-3
化学式	C ₁₂ H ₁₃ N
分子量	171.24
物理化学的性状	
外観	液体
臭気	特徴的香気
沸点	270±2℃
融点	-20±0.5℃
密度	—
相対蒸気密度	—
比重	(d _{20/20}) 0.971 (規格値 0.969～0.975)
蒸気圧	5.9×10 ⁻¹ Pa (25℃)
溶解性	水：不溶
引火性及び発火性	引火点：127±2℃
安定性・反応性	—
換算係数	—
国連(UN)番号	3082 (ENVIRONMENTALLY HAZARDOUS SUBSTANCE, LIQUID, N.O.S.)
国連危険物輸送分類	Class 9 (その他の危険性物質及び物品環境有害物質を含む)、Packing group (容器等級) III
EC / Index 番号	—
EU-Annex I 分類	未収載

【別添 2】

毒性（原体）

試験の種類	供試動物等	試験結果	備考
急性経口毒性	ラット	300 mg/kg < LD ₅₀ < 2,000 mg/kg ^{*1}	OECD TG 420 GLP 準拠
急性経皮毒性	ラット	LD ₅₀ : >2,000 mg/kg	OECD TG 402 GLP 準拠
急性吸入毒性 (ダスト、ミスト)	ラット	LC ₅₀ : >4.792 mg/L/4hr ^{*2}	OECD TG 403 GLP 準拠
刺激性	ウサギ	皮膚腐食性：なし（軽度の刺激性） ^{*3}	OECD TG 404 GLP 準拠
	ウサギ	眼刺激性：軽度の刺激性 ^{*4}	OECD TG 405 GLP 準拠

* 1 : 類似構造物質のラット LD₅₀ : ♂ 683.88 mg/kg（別添資料参照）を引用。

当該試験結果の範囲が広いが、類似構造を有するものは同様の物理化学的性質を持つことから、類似構造物質の急性経口毒性の値に近いものと推察される。

* 2 : 類似構造物質の LC₅₀ : >4.792 mg/L/4hr（別添資料参照）を引用。

類似構造を有するものは同様の物理化学的性質を持つことから、類似構造物質の急性吸入毒性の値に近いものと推察される。

当該物質の蒸気圧は、 5.9×10^{-1} Pa (25℃) と高く揮発性が低いことから、当該物質の急性吸入毒性については、問題ないと推察される。

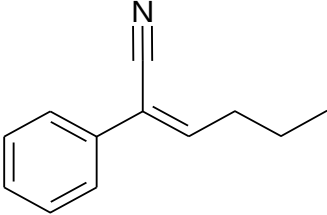
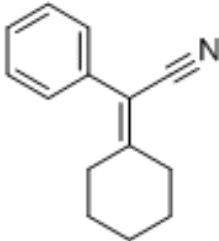
* 3 : 一次刺激指数は 0.3 であり、軽度な刺激性物質に分類された。腐食性は認められなかった。

* 4 : 群平均スコアの最大値は 11.7 であり、軽度な刺激性物質（クラス 4、スケールは 1～8）に分類された。

【別添資料】

○ 類似構造物質

- ・有機シアン化合物における劇物除外に収載されている類似構造を持つ物質との比較表

項目	当該物質	類似構造物質
有機シアン化合物における劇物除外の収載名	－	毒物及び劇物指定令（昭和 40 年政令第 2 号）第 2 条第 1 項第 32 号（79） 2－シクロヘキシリデン－2－フェニルアセトニトリル
名称 （英語名）	(2Z)-2-Phenyl-2-hexenenitrile	2-Cyclohexylidene-2-phenylacetonitrile、Benzeneacetonitrile, .alpha.-cyclohexylidene-
〃 （日本語名）	（２Ｚ）－２－フェニル－２－ヘキセンニトリル	２－シクロヘキシリデン－２－フェニルアセトニトリル
構造式		
CAS 番号	130786-09-3	10461-98-0
化学式	C ₁₂ H ₁₃ N	C ₁₄ H ₁₅ N
分子量	171.24	197.27
外観	無色～淡黄色液体	無色～淡黄色液体
沸点	270±2℃	118℃
融点	－20±0.5℃	25℃
比重	(d ₂₀ /20) 0.971 (規格値 0.969～0.975)	(d ₂₀ /20) 1.031
急性経口毒性	300 mg/kg < LD ₅₀ < 2,000 mg/kg	LD ₅₀ : (ラット) ♂ 683.88 mg/kg
急性吸入毒性	－	LC ₅₀ : (ラット) >4.792 mg/L/4hr

・参照データベース

RIFM－Research Institute of Fragrance Materials のデータベース

<http://www.rifm.org/>

NITE-CHRIP

NITE 化学物質総合情報提供システム