

厚生労働省発薬生 0301 第 79 号
平成 31 年 3 月 1 日

薬事・食品衛生審議会会長
橋田 充 殿

厚生労働大臣 根本 匠

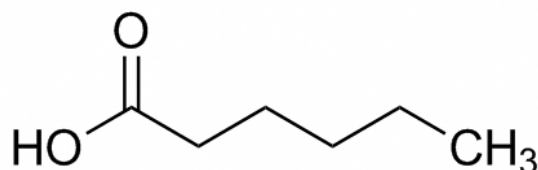
諮 問 書

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

ヘキサン酸及びこれを含有する製剤（ただし、ヘキサン酸 11%以下を含有するものを除く。）の毒物及び劇物取締法に基づく劇物の指定について

ヘキサン酸及びこれを含有する製剤（ただし、ヘキサン酸 11%以下を含有するものを除く。）の毒物及び劇物取締法に基づく劇物の指定について



$C_6H_{12}O_2$

CAS No. : 142-62-1

名称 (英語名) Hexanoic acid、Buthylacetic acid、Capronic acid、n- Capronic acid
(日本語名) ヘキサン酸、ブチル酢酸、カプロン酸、n-カプロン酸

経緯

上記化学物質は、現在、毒物及び劇物指定はなされていないが、GHSで急性毒性（経皮）が区分3、皮膚腐食性／刺激性、眼に対する重篤な損傷性／眼刺激性が区分1に分類され、危険物輸送に関する国連勧告で腐食性物質に分類されており、急性毒性及び刺激性に関する有害性情報収集を実施したところ、平成27年度第2回毒物劇物調査会で審議され、急性経皮毒性、皮膚に対する腐食性、眼等の粘膜に対する重篤な損傷から劇物相当と判断された。その後、事業者より11%製剤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、ヘキサン酸及びこれを含有する製剤（ただし、ヘキサン酸11%以下を含有するものを除く。）を劇物に指定するものである。

用途

食品添加物、香料として香料製剤の製造に使用。潤滑油の製造に使用。化粧品（歯磨き、入浴剤等）、室内芳香剤等に使用。

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

ヘキサン酸及びこれを含有する製剤（ただし、ヘキサン酸11%以下を含有するものを除く。）については、「劇物」に指定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) Hexanoic acid (日本語名) ヘキサン酸
CAS 番号	142-62-1
化学式	C ₆ H ₁₂ O ₂
分子量	116.16
物理化学的性状	
外観	特徴的な臭気のある無色、油状の液体
沸点	205.2°C (101.325 kPa)
融点	-3.4°C
密度	0.93 g/cm ³
相対蒸気密度	4.01 (空気=1)
蒸気圧	0.18 mmHg (20°C)
溶解性	水 : 10.3 g/L (25°C)、 オクタノール / 水 分配係数 (log P) : 1.92 (25°C)、 エタノール、エーテルに易溶。
引火性及び発火性	引火点 : 102°C (o.c.)
安定性・反応性	弱酸。強塩基、酸化剤と激しく反応。
換算係数	1 mL/m ³ (1 ppm) = 4.83 mg/m ³ [1,013 hPa, 20°C]
国連(UN)番号	2829 (CAPROIC ACID)
国連危険物輸送分類	Class 8 (腐食性物質)、Packing group (容器等級) III
EC / Index 番号	205-550-7 / -
EU CLP による GHS 調和分類	未収載

【別添 2】

毒性（原体）

試験の種類	供試動物等	試験結果	文献
急性経口毒性	ラット	LD ₅₀ : 1,900 mg/kg	1
急性経皮毒性* ¹	—	LD ₅₀ : >2,000 mg/kg (推定) * ²	—
急性吸入毒性 (蒸気)	ラット	LC ₅₀ : >11.6 mg/L/4hr	2
刺激性	ウサギ	<u>皮膚腐食性</u> : <u>あり</u>	3
	ウサギ	<u>眼刺激性</u> : <u>重篤な損傷</u>	4
	<i>in vitro</i> ウシ摘出角膜 (BCOP)	<u>眼刺激性</u> : <u>重篤な損傷</u>	4

* 1 : 急性毒性および刺激性に関する有害性情報収集を行ったところ、「LD₅₀ : 584mg/kg (ウサギ)」の知見（文献 2）が得られたが、一定の LD₅₀ 値を求めるために行われた試験ではなく、極めて粗い概略値であることから、本知見をデータとして採用することは不適切であると判断した。

* 2 : 「毒物劇物指定のための有害性情報の収集・評価」の資料^{※1)~3)}から、ヘキサン酸と同じ直鎖脂肪酸であるヘプタン酸 (LD₅₀:>2,000 mg/kg)、ペンタン酸 (LD₅₀:>2,000 mg/kg)、酪酸 (LD₅₀:6,083 mg/kg) については、各々、急性経皮毒性値の報告がある。

ヘプタン酸、ペンタン酸、酪酸はいずれも直鎖のモノカルボン酸で、よく似た物理的・化学的性質を持ち、代謝経路もよく似ている。急性経口毒性値は、炭素数が増えるにつれ増加している。

また、今回実施したヒト培養細胞を用いる *in vitro* 皮膚腐食性試験については「3 分間処理の生存率が 80% 未満となった濃度」は炭素数が増えるにつれ単調に増加している。

以上より、急性経口毒性試験及びヒト培養細胞を用いる *in vitro* 皮膚腐食性試験の結果から、炭素数 4 から 7 の直鎖脂肪酸の中でヘキサン酸に特異的な強度の急性毒性及び皮膚への作用があるとは考えにくい。よって、ヘキサン酸の急性経皮毒性値は、ヘキサン酸より炭素数の 1 つ少ないペンタン酸と 1 つ多いヘプタン酸の急性経皮毒性値の間になると予想される。

ヘプタン酸及びペンタン酸の急性経皮毒性値 (LD₅₀) はいずれも >2,000 mg/kg であることから、ヘキサン酸の急性経皮毒性値 (LD₅₀) も、>2,000 mg/kg と予想される。

※ 1) 平成 27 年度報告 毒物劇物指定のための有害性情報の収集・評価 物質名:n-酪酸 CAS No.: 107-92-6 国立医薬品食品衛生研究所 安全性予測評価部 平成 28 年3月

2) 平成 27 年度報告 毒物劇物指定のための有害性情報の収集・評価 物質名:吉草酸 CAS No.: 109-52-4 国立医薬品食品衛生研究所 安全性予測評価部 平成 28 年3月

3) 平成 27 年度報告 毒物劇物指定のための有害性情報の収集・評価 物質名:n-ヘプタン酸 CAS No.: 111-14-8 国立医薬品食品衛生研究所 安全性予測評価部 平成 28 年3月

文献

1. Union Carbide Data Sheet. (Union Carbide Corp. , 39 Old Ridgebury Rd. , Danbury, CT 06617) Volume 11, 2 (1971).
2. Smyth H. F. Carpenter C. P. et al, AMA Archives of Industrial Hygiene and Occupational Medicine. 10, 61 (1954).
3. Study Report, 1984-12-18, 1984. (REACH 登録資料より)
4. Study Report, 2012-02-26, 2012. (REACH 登録資料より)

毒性(11%製剤)

試験の種類	供試動物等	試験結果	備考
皮膚腐食性 (11%)	ウサギ	非腐食性	OECD TG 404 GLP 準拠
〃 (1.5%)	ウサギ	非腐食性	OECD TG 404 GLP 準拠
	<i>in vitro</i> 再生ヒト表皮 EpiDerm™ SCT (EPI-200)	非腐食性	OECD TG 431 GLP 準拠
眼刺激性 (11%)	ウサギ	中等度の刺激性	OECD TG 405 GLP 準拠