

システアミンの経皮吸収性と 安全性予測法

物性データ

- 構造式 $\text{HSCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$
- 分子量 77.15
- $\text{clog}P$ -0.2518 (オクタノール/水分配係数として利用)

安全性データ

- LOAEL 37.5 mg/kg
- 暫定的NOAEL 3.75 mg/kg

システアミンの経皮吸収量の推定

Potts & Guyの皮膚透過係数予測式*

$$\text{Log } P \text{ (cm/s in } P) = -6.3 + 0.71 \times \log K_{o/w} - 0.0061 \times MW$$

上記予測式を使うことによりシステアミンの皮膚透過係数が以下のように求められる

$$\text{Log } P = -6.949 \text{ (cm/s in } P)$$

$$P = 1.12 \times 10^{-7} \text{ cm/s}$$

* Potts RO, Guy RH., Predicting skin permeability, *Pharm. Res.*, **9**: 663-669 (1992).

透過係数と経皮吸収量(速度)の関係

Fickの拡散第1法則

$$\frac{dQ}{dt} = PC_v$$

Q : 皮膚透過量 (mg/cm²)

t : 暴露時間

C_v : 暴露濃度 (mg/cm³)

上記した式で単位面積当たりの皮膚透過量(速度)が計算できる。膜透過では定常状態になるまでに時間がかかる(これをlag timeという)が、今回は定常状態で計算する。

$$\begin{aligned}\frac{dQ}{dt} &= 1.12 \times 10^{-7} \text{ cm} / \text{ s} \times 58.6 \text{ mg} / \text{ cm}^3 \\ &= 6.56 \times 10^{-6} \text{ mg} / \text{ s} / \text{ cm}^2\end{aligned}$$

18分、116 cm²暴露では **0.82 mg** が皮膚から侵入する