

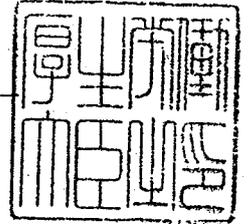
大

資料 1

厚生労働省発薬食第 1107065 号
平成 20 年 11 月 7 日

薬事・食品衛生審議会会長
望月正隆 殿

厚生労働大臣 舛添要一



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

亜硝酸ブチ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毒物又は劇物の指定について

亜硝酸ブチ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毒物又は劇物の指定について



CAS: 544-16-1

名称 (英語名) n-Butyl nitrite; Butyl nitrite; Nitrous acid, n-butyl ester
(日本名) 亜硝酸 n-ブチル、亜硝酸ブチル

経緯

上記化学物質は、現在毒劇物指定はなされていないが薬事法の指定薬物に指定されている（脱法ドラッグ）。国立医薬品食品衛生研究所において、急性毒性ならびに刺激性に関する有害性情報収集を行ったところ別紙の結果が得られた。

用途

試薬。ジアゾ化合物の合成に使用。

物理化学的性状

別紙 1 を参照。

毒性

別紙 2 を参照。

事務局案

亜硝酸ブチル及びこれを含有する製剤は、「毒物」として取り扱うことが適当と思われる。

【別紙 1】

物理的・化学的性質 (原体)

項目	
名称	(英語名) n-Butyl nitrite; Butyl nitrite; Nitrous acid, n-butyl ester (日本名) 亜硝酸 n-ブチル; 亜硝酸ブチル
CAS 番号	544-16-1
化学式	
示性式	CH ₃ (CH ₂) ₃ ONO
分子式	C ₄ H ₉ NO ₂
分子量	103.1
物理化学的性状	
性状	特徴的臭気のある黄色の油性液体
沸点 (°C)	78.2°C
融点 (°C)	—
相対蒸気密度	3.6 (空気=1)
相対比重	0.91 (4°C、水=1)
蒸気圧	81.3 mmHg (= 10.8 kPa, 25°C、推定)
溶解性	水に難溶 (sparingly soluble, 推定 0.1 g/100mL (25°C))、 エタノール、エーテルに可溶
引火性及び発火性	引火性 (引火点: 10°C、closed cup)
安定性・反応性	空気と反応しやすく、水で分解
換算係数	1 mL/m ³ (1 ppm) = 4.29 mg/m ³ (4.29 µg/L)
国連(UN)番号	UN2351 (Butyl nitrites として)
国連危険物輸送分類	Class 3(引火性液体)、容器等級 II、III
EU-Annex I 分類	F; R11 (Highly flammable)、 T; R23/25 (Toxic by inhalation and if swallowed)
NFPA 分類	—

【別紙 2】

毒性（原体）

試験の種類	供試動物	試験結果	文献
急性経口毒性	ラット	LD ₅₀ : 83mg/kg	1
	マウス	LD ₅₀ : 171 mg/kg	2
急性経皮毒性	—	—	—
急性吸入毒性 (ガス)	ラット	LC ₅₀ : 420 ppm/4H (= 1.80 mg/L/4H)	3
		LC ₅₀ : 918 ppm/1H (= 459 ppm/4H = 1.97 mg/L/4H)	4
	マウス	LC ₅₀ : 567 ppm/1H (= 284 ppm/4H = 1.21 mg/L/4H)	5
		LC ₅₀ : 949 ppm/0.5H (= 337 ppm/4H = 1.45 mg/L/4H)	6
刺激性	実験動物	—	—
	ヒト	軽度皮膚刺激性/気管気管支刺激性の可能性*	7

* : 亜硝酸 n-ブチル含有製品として

文献

1. Wood RW and Cox C, Acute oral toxicity of butyl nitrite, Journal of Applied Toxicology. 1(1), 30-31, 1981.
2. McFadden DP and Maickel RP, Butyl nitrites – An example of hazardous, noncontrolled recreational drugs, Research Communications in Substances Abuse, 3 (2), 233-236, 1982.
3. Klonne DR, Ulrich CE, Weissmann J and Morgan AK, Acute inhalation toxicity of aliphatic (C1-C5) nitrites in rats, Fundamental and Applied Toxicology, 8, 101-106, 1987.
4. Orzel RA, Seabaugh VM, Weiss LR: Comparative toxicity of analogues of amyl nitrite (an) after inhalation and oral administration in rats, Federation Proceedings, Federation of American Societies for Experimental Biology, 41, 1583, 1982 (abstract).
5. McFadden DP, Carlson GP and Maickel RP, The role of methemoglobine in acute butyl nitrite toxicity in mice, Fundamental and Applied Toxicology, 1, 448-451, 1981.
6. Rees DC, Coggeshall EM, Dragan Y, Breen TJ and Balster RL, Acute effects of some volatile nitrites on motor performance and lethality in mice, Neurobehav Toxicol Teratol. 8(2), 139-142, 1986.
7. Wood RW, The acute toxicity of nitrite inhalants, In NIDA (National Institute on Drug Abuse) Research Monograph 83 (Health hazards of nitrite inhalants, Eds: Haverkos HW and Dougherty JA), pp.28-38, 1988.

名称資料

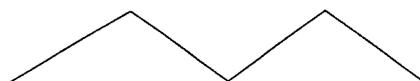
亜硝酸ブチル



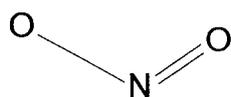
Butyl nitrite

<命名根拠>

IUPAC A-1. 2のブチル (butyl) $\text{CH}_3 - (\text{CH}_2)_2 - \text{CH}_2 -$



亜硝酸 (nitrite) ONO



との結合なので、

Butyl nitrite

日本語に字訳すると、

亜硝酸ブチル

資料

2

厚生労働省発薬食第1107066号

平成20年11月7日

薬事・食品衛生審議会会長

望月正隆 殿

厚生労働大臣 舩添要一



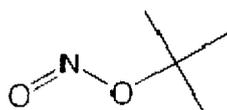
諮 問 書

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

亜硝酸3級ブチ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毒物又は劇物の指定について

亜硝酸 3 級ブチ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毒物又は劇物の指定について



$C_4H_9NO_2 / (CH_3)_3COONO$

CAS: 540-80-7

名称 (英語名) tert-Butyl nitrite; Nitrous acid, tert-butyl ester;
Nitrous acid 1,1-dimethyl ether ester
(日本名) 亜硝酸第 3 級ブチル、亜硝酸 tert-ブチル、亜硝酸 t-ブチル

経緯

上記化学物質は、現在毒劇物指定はなされていないが薬事法の指定薬物に指定されている（脱法ドラッグ）。国立医薬品食品衛生研究所において、急性毒性ならびに刺激性に関する有害性情報収集を行ったところ別紙の結果が得られた。

用途

ジェット燃料。

物理化学的性状

別紙 1 を参照。

毒性

別紙 2 を参照。

事務局案

亜硝酸 3 級ブチル及びこれを含有する製剤は、「劇物」として取り扱うことが適当と思われる。

【別紙 1】

物理的・化学的性質（原体）

項目	
名称	(英語名) tert-Butyl nitrite; Nitrous acid, tert-butyl ester; Nitrous acid 1,1-dimethyl ether ester (日本名) 亜硝酸第3級ブチル; 亜硝酸 tert-ブチル; 亜硝酸 t-ブチル
CAS 番号	540-80-7
化学式	
示性式	(CH ₃) ₃ OCONO
分子式	C ₄ H ₉ NO ₂
分子量	103.1
物理化学的性状	
性状	澄明な黄色の液体
沸点 (°C)	63°C
融点 (°C)	—
蒸気密度	3.6 (空気=1)
比重	0.87 g/mL (20°C)
蒸気圧	—
溶解性	水に難溶 (slightly soluble)、 エタノール、エーテル、クロロホルムに可溶
引火性及び発火性	引火性 (引火点: -11°C、closed cup)
安定性・反応性	常態で安定、光で分解、酸化性あり
換算係数	1 mL/m ³ (1 ppm) = 4.29 mg/m ³ (4.29 µg/L)
国連(UN)番号	UN2351 (Butyl nitrites として)
国連危険物輸送分類	Class 3(引火性液体)、容器等級 II、III
EU-Annex I 分類	F : R11 (Highly flammable)、 Xn: R20/22 (Harmful by inhalation and if swallowed)
NFPA 分類	—

【別紙 2】

毒性 (原体)			
試験の種類	供試動物	試験結果	文献
急性経口毒性	マウス	LD ₅₀ : 307 mg/kg*	1
急性経皮毒性	—	—	—
急性吸入毒性 (ガス)	マウス	LC ₅₀ : 10852 ppm/1H (= 5426 ppm/4H)	2
刺激性	実験動物	—	—
	ヒト	軽度皮膚/眼/気管気管支刺激性の可能性**	3

* : 95%信頼性限界区間 : 220-426 mg/kg

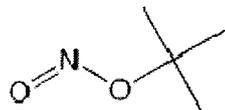
** : アルキル亜硝酸類として

文献

1. McFadden DP and Maickel RP, Butyl nitrites – An example of hazardous, noncontrolled recreational drugs, *Research Communications in Substances Abuse*, 3 (2), 233-236, 1982.
2. McFadden DP, Carlson GP and Maickel RP, The role of methemoglobine in acute butyl nitrite toxicity in mice, *Fundamental and Applied Toxicology*, 1, 448-451, 1981.
3. Wood RW, The acute toxicity of nitrite inhalants, In NIDA (National Institute on Drug Abuse) Research Monograph 83 (Health hazards of nitrite inhalants, Eds: Haverkos HW and Dougherty JA), pp.28-38, 1988.

名称資料

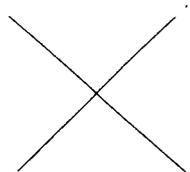
亜硝酸3級ブチル



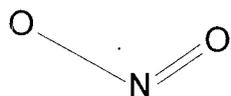
3級 Butyl nitrite

<命名根拠>

IUPAC C-16. 11 の3級ブチル (3級 butyl) $(\text{CH}_3)_3\text{CO}-$



亜硝酸 (nitrite) ONO



との結合なので、

3級 Butyl nitrite

日本語に字訳すると、

亜硝酸3級ブチル

資料

3

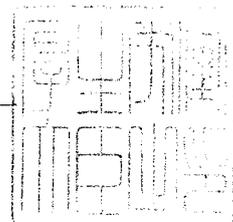
厚生労働省発薬食第 1107067 号

平成 20 年 1 月 7 日

薬事・食品衛生審議会会長

望月正隆 殿

厚生労働大臣 舛添要一



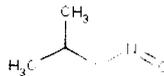
諮 問 書

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

亜硝酸イソプロピ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毒物又は劇物の指定について

亜硝酸イソプロピ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毒物又は劇物の指定について



$C_3H_7NO_2 / (CH_3)_2CHONO$

CAS: 541-42-4

名称 (英語名) Isopropyl nitrite; Nitrous acid, isopropyl ester;
2-Propanol nitrite; Nitrous acid 1-methylethyl ester
(日本名) 亜硝酸イソプロピル

経緯

上記化学物質は、現在毒劇物指定はなされていないが薬事法の指定薬物に指定されている(脱法ドラッグ)。国立医薬品食品衛生研究所において、急性毒性ならびに刺激性に関する有害性情報収集を行ったところ別紙の結果が得られた。

用途

ジェット燃料。医薬品中間体。

物理化学的性状

別紙 1 を参照。

毒性

別紙 2 を参照。

事務局案

亜硝酸イソプロピル及びこれを含有する製剤は、「毒物」として取り扱うことが適当と思われる。

【別紙 1】

物理的・化学的性質 (原体)

項目	
名称	(英語名) Isopropyl nitrite: Nitrous acid, isopropyl ester: 2-Propanol nitrite: Nitrous acid 1-methylethyl ester (日本名) 亜硝酸イソプロピル
CAS 番号	541-42-4
化学式	
示性式	(CH ₃) ₂ CHONO
分子式	C ₃ H ₇ NO ₂
分子量	89.1
物理化学的性状	
性状	淡黄色の油性液体
沸点 (°C)	40°C
融点 (°C)	—
相対蒸気密度	— (空気=1)
相対比重	0.84 (25°C、水=1)
蒸気圧	—
溶解性	水に不溶、 エタノール、エーテルに可溶
引火性及び発火性	—
安定性・反応性	—
換算係数	1 mL/m ³ (1 ppm) = 3.64 mg/m ³ (3.64 µg/L)
国連(UN)番号	—
国連危険物輸送分類	—
EU・Annex I 分類	—
NFPA 分類	—

【別紙 2】

毒性（原体）

試験の種類	供試動物	試験結果	文献
急性経口毒性	—	—	—
急性経皮毒性	—	—	—
急性吸入毒性 (蒸気)	ラット マウス	LC ₅₀ : 1250 mg/m ³ /4H (= 1.25 mg/L/4H) LC ₅₀ : 2800 mg/m ³ (= 2.8 mg/L) (暴露時間不明)	1 2
刺激性	実験動物 ヒト	— 軽度皮膚/呼吸器支刺激性の可能性*	— 3,4,5

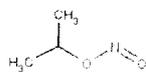
* : アルキル亜硝酸類として

文献

1. "Toxicometric Parameters of Industrial Toxic Chemicals Under Single Exposure," Izmerov, N.F., et al., Moscow, Centre of International Projects, GKNT, 1982Vol. -, Pg. 79, 1982. 'Toxicometric Parameters of Industrial Toxic Chemicals Under Single Exposure,' Izmerov, N.F., et al., Moscow, Centre of International Projects, GKNT, 1982 (-,79,1982)] (入手不可)
2. Gigiena Truda i Professional'nye Zabolevaniya (Labor Hygiene and Occupational Diseases), 10(10), 29-, 1966. (入手不可)
3. Bulpitt DC; Noble-Nesbitt D; Carreira J. Effects of exposure to isopropyl nitrite, Occupational medicine, 48(5), 345-346, 1998.
4. Haverkos HW, Kopstein AN, Wilson H and Drotman P, Nitrite Inhalants: History, Epidemiology, and Possible Links to AIDS, Environ Health Perspect, 102, 858-861, 1994.
5. Wood RW, The acute toxicity of nitrite inhalants, In NIDA (National Institute on Drug Abuse) Research Monograph 83 (Health hazards of nitrite inhalants, Eds: Haverkos HW and Dougherty JA), pp.28-38, 1988.

名称資料

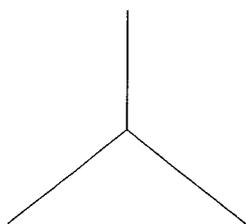
亜硝酸イソプロピル



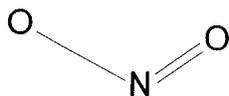
isopropyl nitrite

<命名根拠>

IUPAC C-2. 25 のイソプロピル (isopropyl) $(\text{CH}_3)_2-\text{CH}-$



亜硝酸 (nitrite) ONO



との結合なので、

isopropyl nitrite

日本語に字訳すると、

亜硝酸イソプロピル

資料

4

厚生労働省発薬食第1107068号

平成20年11月7日

薬事・食品衛生審議会会長
望月正隆 殿

厚生労働大臣 舩添 要



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

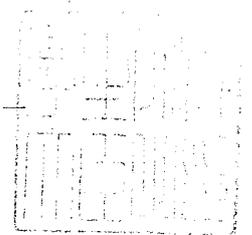
1 - (4-メトキシフェニル) ピペラジン (4MPP) 及びこれを含有する製剤の毒物及び劇物取締法に基づく毒物又は劇物の指定について

厚生労働省発薬食第1107069号

平成20年11月7日

薬事・食品衛生審議会会長
望月正隆 殿

厚生労働大臣 舩添要一



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

1 - (4-メトキシフェニル) ピペラジン-塩酸塩（4MP P-塩酸塩）及びこれを含む製剤の毒物及び劇物取締法に基づく毒物又は劇物の指定について



厚生労働省発薬食第1107070号
平成20年11月7日

薬事・食品衛生審議会会長
望月正隆 殿

厚生労働大臣 舩添 要



諮 問 書

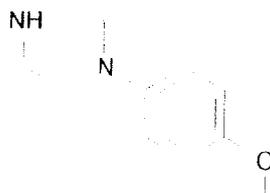
下記の事項について、毒物及び劇物取締法（昭和25年法律第303号）第23条の2の規定に基づき、貴会の意見を求めます。

記

1 - (4-メトキシフェニル) ピペラジン二塩酸塩（4MP P二塩酸塩）及びこれを含む製剤の毒物及び劇物取締法に基づく毒物又は劇物の指定について

1-(4-メトキシフェニル)ピペラジン (4MPP) 類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毒物又は劇物の指定について

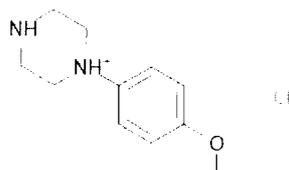
1. 4MPP



$C_{11}H_{16}N_2O$
CAS: 38212-30-5

名称 (英語名) 1-(4-Methoxyphenyl)piperazine; 4-Methoxyphenylpiperazine;
N-(4-Methoxyphenyl)piperazine; Paraperazine; MeOPP, 4MPP
(日本名) 1-(4-メトキシフェニル)ピペラジン、4MPP

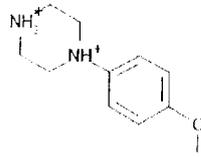
2. 4MPP 一塩酸塩



$C_{11}H_{16}N_2O \cdot HCl$
CAS: 34145-43-7

名称 (英語名) 1-(4-Methoxyphenyl)piperazinium chloride; 4MPP HCl
(日本名) 1-(4-メトキシフェニル)ピペラジン一塩酸塩、4MPP 一塩酸塩

3. 4MPP 二塩酸塩



$C_{11}H_{16}N_2O \cdot 2HCl$

CAS: 38869-47-5

名称 (英語名) 1-(4-Methoxyphenyl)piperazin-1,4-diylium dichloride;
1-(4-Methoxyphenyl)piperazine dihydrochloride; 4MPP 2HCl
(日本名) 1-(4-メトキシフェニル)ピペラジン二塩酸塩、4MPP 二塩酸塩

経緯

上記化学物質は、現在毒劇物指定はなされていないが薬事法の指定薬物に指定されている(脱法ドラッグ)。国立医薬品食品衛生研究所において、急性毒性ならびに刺激性に関する有害性情報収集を行ったところ別紙の結果が得られた。

用途

試薬。脱法ドラッグ。正規用途不明。

物理化学的性状

別紙 1 を参照。

毒性

別紙 2 を参照。

事務局案

1-(4-メトキシフェニル)ピペラジン (4MPP) 類及びこれを含有する製剤は、「劇物」として取り扱うことが適当と思われる。

【別紙 1】

物理的・化学的性質（原体）

項目	4MPP	4MPP 一塩酸塩	4MPP 二塩酸塩
名称	英語名： 1-(4-Methoxyphenyl)piperazine: 4-Methoxyphenylpiperazine: MeOPP, 4MPP 日本名： 1-(4-メトキシフェニル)ピペラジン、4MPP	英語名： 1-(4-Methoxyphenyl)piperazinium chloride: 4MPP HCl 日本名： 1-(4-メトキシフェニル)ピペラジン一塩酸塩、4MPP 一塩酸塩	英語名： 1-(4-Methoxyphenyl)piperazin-1,4-diylidium dichloride: 4MPP 2HCl 日本名： 1-(4-メトキシフェニル)ピペラジン二塩酸塩、4MPP 二塩酸塩
CAS 番号	38212-30-5	34145-43-7	38869-47-5
分子式	C ₁₁ H ₁₆ N ₂ O	C ₁₁ H ₁₆ N ₂ O.HCl	C ₁₁ H ₁₆ N ₂ O.2HCl
分子量	192.3	228.8	265.2
外観	黄色～褐色の固体（液体との記載もあり）	—	淡褐色～褐色の粉末
沸点（℃）	130-133℃	—	—
融点（℃）	40-42℃、42-47℃ (261-262℃の記載もあり)	—	248-250℃
相対蒸気密度	—（空気=1）	—（空気=1）	—（空気=1）
相対比重	—（水=1）	—（水=1）	—（水=1）
蒸気圧	—	—	—
溶解性	水に可溶（一部情報）	水に可溶（推察）	水に可溶 (slightly sol)
引火点	>230F (>110℃)	—	—
安定性・反応性	—	—	—
換算係数	1 mL/m ³ (1 ppm) = 7.86 mg/m ³	1 mL/m ³ (1 ppm) = 9.35 mg/m ³	1 mL/m ³ (1 ppm) = 10.8 mg/m ³
国連番号	—	—	—
国連危険物 輸送分類	—	—	—
EU 分類	—	—	—
NFPA 分類	—	—	—

【別紙 2】

毒性（原体）

4MPP 類の急性毒性に関し唯一得られた知見は、以下であった。当該文献での物質名は 4MPP あるいは 1-(4-methoxyphenyl)piperazine であるが、記載内容から 4MPP 二塩酸塩 (CAS: 38869-47-5)の知見と判断した。

- ddy 雄マウスに 4MPP を 100、250 および 500 mg/kg の用量で強制経口投与したところ、500 mg/kg では死亡個体が確認された（文献 1）。
- 急性経口毒性試験法 (TG423) を参考に準じ、ddy 雄マウスを用い試験した結果、LD₅₀ クラスは 200～300 mg/kg であった。4MPP の 300 mg/kg 投与による死亡個体数は 6 例中 4 例であった（最初、3 例のマウスに 300 mg/kg を投与したところ、1 例が死亡した。再度 3 例のマウスに同用量を投与したところ、3 例全例が死亡）（文献 2）。
- マウス行動量に及ぼす作用を検討する試験において、4MPP を 25、50、100 及び 200 mg/kg の用量で投与した結果、200 mg/kg では 6 例中 4 例が死亡した（文献 2）。

上記知見をまとめると、4MPP 二塩酸塩を 200 mg/kg および 300 mg/kg の用量でマウスに経口投与したところ、それぞれ 4/6 例、4/6 例が死亡した。100 mg/kg 投与における死亡の有無については言及されておらず、死亡例はなかったものと推察される。これらの結果から、4MPP 二塩酸塩のマウス経口急性毒性(LD₅₀)値は、100～200 mg/kg (150mg/kg 程度) にあると考えられる。

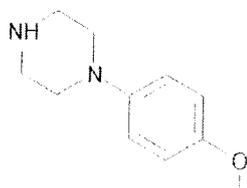
なお、4MPP 類の刺激性に関する実験動物での知見は認められなかったが、4MPP 類の MSDS には刺激性の可能性が記載されている。しかしながら、皮膚腐食性あるいは眼の重篤な損傷性を示唆するものではないと判断される。

文献

1. 厚生科学研究費補助金 医薬安全総合研究「不正流通薬物対策に関する研究(主任研究者：平井俊樹)」、平成 14 年度総括・分担研究報告書 [平成 15 年 3 月 p135～139] 「いわゆる“ケミカルドラッグ”の実験動物の行動に及ぼす影響」
2. 厚生科学研究費補助金 医薬安全総合研究「不正流通薬物対策に関する研究(主任研究者：平井俊樹)」、平成 15 年度総括・分担研究報告書 [平成 16 年 3 月 p119～122] 「新規麻薬指定成分のケミカルドラッグのマウス行動量に及ぼす作用」

名称資料

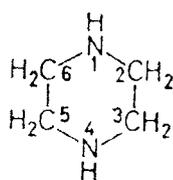
1-(4-メトキシフェニル)ピペラジン(4MPP)



1-(4-Methoxyphenyl)piperazine

<命名根拠>

IUPAC B-2. 12 のピペラジン (piperazine)



piperazine

の4位に IUPAC A-13. 1 及び C-205 のメトキシフェニルが付いている。

以上の骨格標記をまとめて、1-(4-Methoxyphenyl)piperazine と標記する。
これを日本語に字訳すると、

1-(4-メトキシフェニル)ピペラジン(4MPP)



資料 5

厚生労働省発薬食第 1107071 号
平成 20 年 11 月 7 日

薬事・食品衛生審議会会長
望月正隆 殿

厚生労働大臣 舛添要一



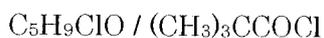
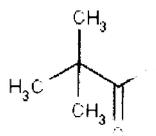
諮 問 書

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, 2-ジメチルプロパノイルクロライド（別名トリメチルアセチルクロライド）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毒物又は劇物の指定について

2,2-ジメチルプロパノイルクロライド (別名トリメチルアセチルクロライド)
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毒物又は劇物の指定について



CAS: 3282-30-2

名称 (英語名) Trimethylacetyl chloride; Pivaloyl chloride;
2,2-Dimethylpropanoyl chloride; PVCL
(日本名) トリメチルアセチルクロライド、ピバロイルクロライド、
塩化ピバロイル

経緯

上記化学物質は、平成 18 年度の調査会において、データの精査が必要との回答を得た物質である。国立医薬品食品衛生研究所において、再度、急性毒性ならびに刺激性に関する有害性情報収集を行ったところ別紙の結果が得られた。

用途

農薬や医薬品製造における反应用中間体。反应用試薬。

物理化学的性状

別紙 1 を参照。

毒性

別紙 2 を参照。

事務局案

2,2-ジメチルプロパノイルクロライド (別名トリメチルアセチルクロライド) 及びこれを含有する製剤は、「毒物」として取り扱うことが適当と思われる。

【別紙 1】

物理的・化学的性質 (原体)

項目	
名称	(英語名) Trimethylacetyl chloride; Pivaloyl chloride; 2,2-Dimethylpropanoyl chloride; PVCL (日本名) トリメチルアセチルクロライド、 ピバロイルクロライド、塩化ピバロイル
CAS 番号	3282-30-2
化学式	
示性式	(CH ₃) ₃ CCOCl
分子式	C ₅ H ₉ ClO
分子量	120.6
物理化学的性状	
性状	特徴的臭気のある無色の液体
沸点 (°C)	107°C
融点 (°C)	-56°C
相対蒸気密度	4.2 (空気=1)
相対比重	1.00 (水=1、20°C)
蒸気圧	47 mbar (= 4.7 kPa, 20°C)
溶解性	水で分解、エーテルに可溶
引火性及び発火性	引火性 (引火点: 14°C) 発火点: 455°C 爆発限界(下限—上限): 1.9—7.4 vol%
安定性・反応性	常態で安定、水と反応
換算係数	1 mL/m ³ (1 ppm) = 5.01 mg/m ³ (5.01 µg/L)
国連(UN)番号	UN2438
国連危険物輸送分類	Class 6.1(毒物)、容器等級 I、副次的危険性 Class 3(引火性液体) および 8(腐食性物質)
EU-Annex I 分類	—
NFPA 分類	—

【別紙 2】

毒性 (原体)

試験の種類	供試動物	試験結果	文献
急性経口毒性	ラット	LD ₅₀ : 約 1500 mg/kg	1, 2
		LD ₅₀ : 約 1178 mg/kg	3
		LD ₅₀ : 638 mg/kg	4
急性経皮毒性	ウサギ	LD ₅₀ : > 2010 mg/kg	4
急性吸入毒性 (蒸気)	ラット	LC ₅₀ : 100 ppm (0.5 mg/L) /4H	2
		LC ₀ (0/3 例死亡) : 96 ppm (0.48 mg/L)/4H,	5
		LC ₁₀₀ (3/3 例死亡) : 233 ppm (1.2 mg/L)/4H	5
		LC ₅₀ : 500 ppm (2.5mg/L)	4, 6
	マウス	(LC ₅₀ : 14~20 ppm (0.07~0.1 mg/L)/4H) *	6
		LC ₅₀ : 36~64 ppm (0.18~0.32 mg/L)/4H**	6
刺激性	ウサギ	皮膚腐食性、眼刺激性 (重篤な眼の損傷)***	2, 4

* : IUCLIDにおける記載 (ミスト暴露換算と推察、下と同じ文献のため、参考扱いとする。)

** : 米国 OTS 収載文書 (文献 6 のこと) における記載 (蒸気/vapor と記載)

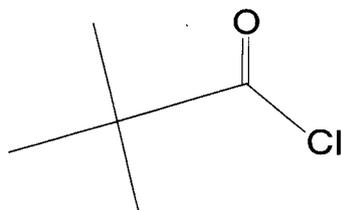
[次の知見に基づく : 0.565 mg/L/0.5H ; 1/4 例死亡、0.890 mg/L/0.5H ; 3/4 例死亡、3.129 mg/L/0.5H ; 3/4 例死亡]

*** : 具体的データはない

文献

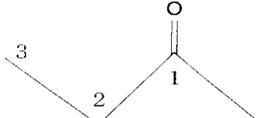
1. BASF AG; Abteilung Toxicologie, unveroeffentlichte Untersuchung, 79/626 vom 15.12.1980. (入手不能)
2. BASF AG; Abteilung Toxicologie, unveroeffentlichte Untersuchung, XVIII/370 vom 26.03.1969. (入手不能)
3. Etude SNPE/professeur G. PAULET du 20 Mars 1978. (入手不能)
4. 企業製品 MSDS (資料として入手済)
5. TSCATS; OTS0544099, Doc. I.D. 88-920005125, 12.08.1992; Sponsor: Eastman Kodak Co., Rochester, NY. (資料として入手済)
6. TSCATS; OTS0538315, Doc. I.D. 88-930000052, 16.11.1992; Sponsor: Shell Oil Co., Houston, TX. (資料として入手済)

2, 2-ジメチルプロパノイルクロライド



2,2-dimethylpropanoyl chloride

<命名根拠>

この物質はプロパノイル **propanoyl**  の1位に塩素

chloride (Cl) が付加しているので **propanoyl chloride** となる。また、**propanoyl** の2位に **methyl** 基 (-CH₃) が2つ付加しているので、**2,2-dimethylpropanoyl** となる。

以上を合わせると、**2,2-dimethylpropanoyl chloride** となる。

これを字訳すると、

2, 2-ジメチルプロパノイルクロライド となる。