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

要　約

n-ヘプタン酸の急性毒性値（LD_{50}/LC_{50} 値）は、ラット経口で 8370 mg/kg（GHS 区分外）、ラット経皮で>2000 mg/kg（GHS 区分 5）、ラット吸入で>4.6 mg/L/4H（ミスト、GHS 区分 4/5/区分外）であった。n-ヘプタン酸の急性毒性値は、いずれの暴露経路においても毒劇物に相当しない。一方、n-ヘプタン酸はウサギ皮膚に腐食性を示し、GHS 区分 1（劇物相当）に該当する。以上より、n-ヘプタン酸は劇物に指定するのが妥当と考えられた。本判断は、既存規制分類（国連危険物輸送および EU GHS）とも合致している。

1.　目的

本報告書の目的は、n-ヘプタン酸について、毒物劇物指定に必要な動物を用いた急性毒性試験データ（特に LD_{50} 値や LC_{50} 値）ならびに刺激性試験データ（皮膚及び眼）を提供することにある。

2.　調査方法

情報・文献調査により当該物質の物理化学的特性、急性毒性値及び刺激性に関する資料、ならびに外国における規制分類情報を収集し、これらの資料により毒物劇物への指定の可能性を評価した。

情報・文献調査は、以下のインターネットで提供されるデータベース、情報あるいは成書を対象に行った。情報の検索には、原則として CAS No.を用いて物質を特定した。また、得られた LD_{50}/LC_{50} 値情報については、必要に応じ原著論文を収集し、信頼性や妥当性を確認した。情報の有無も含め、以下に示す国内外の情報源を含む約 20 の情報源を調査した。

2.1.　物理化学的特性に関する情報収集

- International Chemical Safety Cards (ICSC) : IPCS（国際化学物質安全計画）が作成する化学物質の危険有害性，毒性を含む総合簡易情報［日本語版：http://www.nihs.go.jp/ICSC/、国際英語版：http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/index.htm］
- CRC Handbook of Chemistry and Physics (CRC, 94th, 2013) : CRC 出版による物理化学的性状に関するハンドブック
- Merck Index (Merck, 14th ed., 2006) : Merck and Company, Inc.による化学物質事典

2.2. 急性毒性及び刺激性に関する情報収集

- ChemID : US NLM（米国国立医学図書館）の総合データベース TOXNET の中にある

データベースの1つで、急性毒性情報を収載[http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/chemidlite.jsp]。

- GESTIS：ドイツ IFA（労働災害保険協会の労働安全衛生研究所）による有害化学物質に関するデータベースで、物理化学的特性等に関する情報を収載[http://www.dguv.de/ifa/GESTIS/GESTIS-Stoffdatenbank/index.jsp] あるいは[http://www.dguv.de/ifa/GESTIS/GESTIS-Stoffdatenbank/index-2.jsp]
- Registry of Toxic Effects of Chemical Substances (RTECS)：US NIOSH (米国国立労働安全衛生研究所)（現在は MDL Information Systems, Inc.が担当）による商業的に重要な物質の基本的毒性情報データベース。RightAnswer.com, Inc 社などから有料で提供 [http://www.rightanswerknowledge.com/loginRA.asp]
- Hazardous Substance Data Bank (HSDB)：NLM TOXNET の有害物質データベース[http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB]。RightAnswer.com, Inc 社などから有料で提供 [http://www.rightanswerknowledge.com/loginRA.asp]

2.3. 国際的評価文書に関する情報収集

国際機関あるいは各国政府機関等で評価された物質か否かを以下について確認し、評価物質の場合には利用した。

- ACGIH Documentation of the threshold limit values for chemical substances (ACGIH , 7th edition, 2010 版)：ACGIH（米国産業衛生専門家会議）によるヒト健康影響評価文書
- ATSDR Toxicological Profile (ATSDR)：US ATSDR（毒性物質疾病登録局）による化学物質の毒性評価文書[http://www.atsdr.cdc.gov/toxprofiles/index.asp]
- Concise International Chemical Assessment Documents (CICAD) : IPCS による化学物質等の簡易的総合評価文書[http://www.who.int/ipcs/publications/cicad/pdf/en/]
- EU Risk Assessment Report (EURAR) ：EU による化学物質のリスク評価書[ECHA (European Chemical Agency、欧州化学物質庁), Information from the Existing Substances Regulation (ESR), http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/information-from-existing-substances-regulation]
- Screening Information Data Set (SIDS)：OECD の化学物質初期評価報告書[http://webnet.oecd.org/hpv/UI/Search.aspx]
- MAK Collection for Occupational Health and Safety (MAK)：ドイツ DFG（学術振興会）による化学物質の産業衛生に関する評価文書書籍[http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/3527600418/topics]
- REACH Document (REACH)：各企業により作成された REACH（欧州の化学物質規制制度）用登録提出文書 [http://echa.europa.eu/information-on-chemicals あるいは http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances]

2.4. 毒性に関する追加の情報収集

上記情報源において適切な情報が認められない場合には、以下も利用した：

- Environmental Health Criteria (EHC)：IPCS による化学物質等の総合評価文書 [http://www.inchem.org/pages/ehc.html]
- Patty's Toxicology (Patty, 5th edition, 2001, 6th edition, 2012)：Wiley-Interscience 社による産業衛生化学物質の物性ならびに毒性情報を記載した成書
- 既存化学物質毒性データベース（JECDB）：OECD における既存高生産量化学物質の安全性点検として本邦にて GLP で実施した毒性試験報告書のデータベース [http://dra4.nihs.go.jp/mhlw_data/jsp/SearchPage.jsp]
- SAX's Dangerous Properties of Industrial Materials (SAX, 11th edition, 2004, 12th edition, 2012)：Wiley-Interscience 社による産業化学物質に関する急性毒性情報書籍

また、必要に応じ最新情報あるいは引用原著論文を検索するために、以下を利用した：

- TOXLINE：US NLM の毒性関連文書検索システム（行政文書を含む） [http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?TOXLINE]
- PubMed：US NLM の文献検索システム [http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez]
- Google：Google 社によるネット情報検索サイト [http://www.google.co.jp/]

2.5. 規制分類等に関する情報収集

- Recommendation on the Transport of Dangerous Goods, Model Regulations (TDG、18th ed, 2013)：国連による危険物輸送に関する分類 [http://www.unece.org/trans/danger/publi/unrec/rev18/1files_e.html]
- EU C&L Inventory database (EUCL)：ECHA の化学物質分類・表示情報（Index 番号、EC 番号、CAS 番号、GHS 分類）提供システム [http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/cl-inventory-database]

3. 結果

認められた各資料を本報告書に添付した。なお、上記調査方法にあげた情報源の中で、n-ヘプタン酸の国際的評価文書は認められなかった。なお、REACH ならびに EPA の High Production Volume Information System（HPVIS）による情報が認められた。

情報源	収載	情報源	収載
・ ICSC (資料 1)	: あり	・ EURAR	: なし
・ CRC (資料 2)	: あり	・ SIDS	: なし
・ Merck (資料 3)	: あり	・ MAK	: なし
・ ChemID (資料 4)	: あり	・ REACH (資料 8)	: あり
・ RTECS (資料 5)	: あり	・ TDG (資料 9)	: あり
・ HSDB (資料 6)	: あり	・ EUCL (資料 10)	: あり
・ GESTIS (資料 7)	: あり	・ HPVIS (資料 11)	: あり
・ ACGIH	: なし	・ Patty (資料 12)	: あり
・ ATSDR	: なし	・	
・ CICAD	: なし	・	

3.1. 物理化学的特性

3.1.1. 物質名

和名：n-ヘプタン酸、ヘプタン酸、エナント酸

英名：n-Heptanoic acid, Heptanoic acid, Enanthic acid

3.1.2. 物質登録番号

CAS：111-14-8

UN TDG：3265

EC (Index)：203-838-7 (607-196-00-2)

3.1.3. 物性

分子式：$CH_3(CH_2)_5COOH$ / $C_7H_{14}O_2$

分子量：130.2

構造式：図 1

外観：無色澄明な油状液体

密度：0.9 g/cm^3

沸点：223℃

融点：－7.5℃

引火点：110℃（c.c.）

蒸気圧：1.43 Pa（25℃）

相対蒸気密度（空気＝1）：4.5

水への溶解性：2.8 g/L（25℃）

オクタノール/水分配係数 (Log P)：2.42

その他への溶解性：エタノール、エーテル、アセトンに可溶

安定性・反応性：－

換算係数：1 ppm = 5.41 mg/m^3, 1 mg/m^3 = 0.18 ppm (1 気圧 20℃)

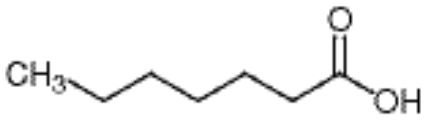

図 1

3.1.4. 用途

潤滑油の製造に用いられる。また、合成香料の原料として使われる。

3.2. 急性毒性に関する情報

ChemID（資料 4)、RTECS（資料 5)、HSDB（資料 6)、GESTIS（資料 7)、REACH（資料 8)、HPVIS（資料 11）及び Patty（資料 12）に記載された急性毒性情報を以下に示す。

3.2.1. ChemID（資料 4)

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	7000 mg/kg	1
マウス	経口	6400 mg/kg	2

3.2.2. RTECS（資料 5)

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	8370 mg/kg	資料 11
ラット	経口	7000 mg/kg	1
マウス	経口	6400 mg/kg	2
ウサギ	経皮	>2000 mg/kg	資料 11
ラット	吸入	>4.6 mg/L/4H	資料 11

#1： n-ヘプタン酸の蒸気圧が 1.43 Pa (25℃)であることから、飽和蒸気濃度は 10^6 x 0.00143 kPa / 101 kPa = 14.16 ppm (= 0.0766 mg/L)と計算される。したがって、本物質の暴露はミストによるものと推察された。

3.2.3. HSDB（資料 6)

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	7000 mg/kg	3

ラット	経口	8370 mg/kg #1	資料 11
マウス	経口	6400 mg/kg	3
ウサギ	経皮	>2000 mg/kg #2	資料 11
ラット	吸入	>4.6 mg/L/4H #3	資料 11

#1:1 群雌雄 4 例を用いた。各用量と死亡数は以下のとおり:1350 mg/kg (0/4), 4556 mg/kg (0/4), 6834 mg/kg (1/4), 10250 mg/kg (3/4), 15380 mg/kg (4/4)。

#2:雌雄各 2 例を用い、無希釈の本物質 2000 mg/kg を適用し、14 日間観察した。1 例の死亡が認められた。HSDB の表中表記は>5000 mg/kg となっているが、>2000 mg/kg の間違いと推察される。

#3:雌雄各 5 例を用い、本物質を含むミストを 5.9 mg/L（5.0 mg/L の間違いと思われる）の目標濃度で 4 時間暴露し、14 日間観察した。

3.2.4. GESTIS（資料 7）

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	7000 mg/kg	1

3.2.5. REACH（資料 8）

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	8370 mg/kg #1	4
ウサギ	経皮	>2000 mg/kg #2	5
ラット	吸入	>4.6m g /L/4H #3	6

#1：1 群雌雄各 2 例を用い、無希釈の本物質を 1350, 4556, 6834, 10250 および 15380 mg/kg の用量で投与し、14 日間観察した。死亡例はそれぞれ 0/4, 0/4, 1/4, 3/4, 4/4 であった。

#2：雌雄各 2 例を用い、無希釈の本物質 2000 mg/kg を 24 時間適用し、14 日間観察した。14 日後に 1 例の死亡が認められた。

#3：雌雄各 5 例を用い、無希釈の本物質を目標濃度 5.0 mg/L（ミスト）で 4 時間全身吸入暴露し、14 日間観察した。分析濃度は 4.6 mg/L であった。試験は OECD TG403 にしたがい、GLP にて実施した。動物を吸入チャンバーから取り出す際に 4 例（雌雄各 2 例）の死亡が認められたが、残りの動物は試験の観察期間中、生残した。

3.2.6. HPVIS（資料 11）

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	8370 mg/kg #1	4
ウサギ	経皮	>2000 mg/kg #2	5
ラット	吸入	>4.6 mg/L/4H #3	6

#1： 1 群雌雄各 2 例を用い、1350, 4556, 6834, 10250 および 15380 mg/kg を投与した。死亡例はそれぞれ 0/4, 0/4, 1/4, 3/4, 4/4 であった。

#2：雌雄各 2 例を用い、無希釈の本物質 2000 mg/kg を擦過皮膚に適用し、14 日間観察した。雄 1 例

の死亡が認められた。

#3：雌雄各 5 例を用い、目標濃度 5.0 mg/L の本物質をミストにて 4 時間暴露後、14 日間観察した。実測濃度は 4.6 mg/L であった。試験はガイドラインに従い、EPA GLP にて実施した。4 例（雌雄各 2 例）の死亡が認められた。

3.2.7. Patty（資料 12）

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	7000 mg/kg	1
マウス	経口	6400 mg/kg	2
ウサギ	経皮	>2000 mg/kg	資料 11
ラット	吸入	>4.6 mg/L/4H #1	資料 11

#1：3.2.2 項参照。

3.2.7. PubMed

キーワードとして、[CAS No. 111-14-8 & acute toxicity]による PubMed 検索を行ったところ、急性毒性に関する情報は得られなかった。

3.3. 刺激性に関する情報

3.3.1. HSDB（資料 6）

ウサギの無傷および擦過皮膚に 0.5 mL を 4 時間閉塞適用し、適用開始から 4.5、24 および 48 時間後に観察した。1 例の死亡が 48 時間の観察後に認められた。軽度～中等度の浮腫を含む強い紅斑が、すべての動物の無傷および擦過皮膚で 4.5～48 時間の観察時間にみられた。一次刺激性スコアは 6 例の動物に対し 5.6（最大スコア 8）を示し、「腐食性」と判断された（文献 7）。

3.3.2. GESTIS（資料 7）

無希釈の本物質は、ウサギ皮膚の知見に基づき、腐食性物質と分類されている（資料 6）。

3.3.3 REACH（資料 9）

- 皮膚刺激性

8 例（雄 5 例および雌 3 例）のウサギを用い、無希釈の本物質 0.5 mL を剃毛した無傷皮膚に 3 分間および 60 分間閉塞適用し、48 時間観察した。試験は、OECD TG404 に従い、GLP にて実施した。3 分間適用では、6 例の動物に対し、24 および 48 時間観察の平均値が紅斑で 3.66（最大スコア 4）、浮腫で 2.75（最大スコア 4）を示し、腐食性はみられなかった。一方、60 分間適用では、4 例の動物に対し、紅斑で 3.87（最大スコア 4）、浮腫で 3.37（最大スコア 4）を示し、6 例中 2 例で腐食性が示された。EU の分類表示では腐食性区分

1B と判断された（文献 8)。また、6 例のウサギを用い、無希釈の本物質 0.5 mL を 24 時間閉塞適用し、72 時間観察した。紅斑と浮腫に基づき、24～72 時間の一次刺激指数の平均スコアは 8（最大スコア 8）を示し、強い刺激性と判断された（文献 5)。さらに、6 例のウサギの無傷および擦過皮膚に無希釈の本物質 0.5 mL を 4 時間閉塞適用し､適用開始から 4.5、24 および 48 時間後に観察した。紅斑スコアは、全動物の各観察時間で 4（最大スコア 4）を示しで、壊死を伴っていた。また、浮腫スコアは全動物の各観察時間で 1 あるいは 2（最大スコア 4）であった。一次刺激性スコアは 5.6（最大スコア 8）で、「腐食性」と判断された（文献 7)。

- 眼刺激性

6 例のウサギを用い、無希釈の本物質 0.1 mL を適用し、14 日間観察した。24/48/72 時間の平均スコアは 72.1（最大スコア 110）を示し、強い刺激性と判断された（文献 9)。14 日間では完全な回復性は認められなかったが、腐食性の判断基準となる 21 日間では回復されない不可逆的な損傷についての知見は記されていない（文献 9)。

3.3.5 PubMed

キーワードとして、[CAS No. 111-14-8 & irritation]による PubMed 検索を行ったが、刺激性に関する新たな情報は得られなかった。

3.4. 規制分類に関する情報

- 国連危険物輸送分類（資料 9）
  3265（CORROSIVE LIQUID, ACIDIC, ORGANIC, N.O.S.)、Class 8（腐食性)、Packing group (容器等級)I/ II/III
- EU GHS 分類（資料 10）
  Skin Corr. 1B

4. 代謝および毒性機序

n-ヘプタン酸は、ß-酸化によって代謝され、ケトン体、グルコースおよびグリコーゲンを生ずる（資料 6、12)。

5. 毒物劇物判定基準

毒物及び劇物取締法における毒物劇物の判定基準では、「毒物劇物の判定は、動物における知見、ヒトにおける知見、又はその他の知見に基づき、当該物質の物性、化学製品としての特質等をも勘案して行うものとし、その基準は、原則として次のとおりとする」として、いくつかの基準をあげている。動物を用いた急性毒性試験の知見では、「原則として、得られる限り多様な暴露経路の急性毒性情報を評価し、どれか一つの暴露経路でも毒物と

判定される場合には毒物に、一つも毒物と判定される暴露経路がなく、どれか一つの暴露経路で劇物と判定される場合には劇物と判定する」とされ、以下の基準が示されている：

(a) 経口	毒物：LD_{50} が 50 mg/kg 以下のもの
	劇物：LD_{50} が 50 mg/kg を越え 300 mg/kg 以下のもの
(b) 経皮	毒物：LD_{50} が 200 mg/kg 以下のもの
	劇物：LD_{50} が 200 mg/kg を越え 1,000 mg/kg 以下のもの
(C) 吸入(ガス)	毒物：LC_{50} が 500 ppm (4hr)以下のもの
	劇物：LC_{50} が 500 ppm (4hr)を越え 2,500 ppm(4hr)以下のもの
吸入(蒸気)	毒物：LC_{50} が 2.0 mg/L (4hr)以下のもの
	劇物：LC_{50} が 2.0 mg/L (4hr)を越え 10 mg/L (4hr)以下のもの
吸入(ﾀﾞｽﾄ､ﾐｽﾄ)	毒物：LC_{50} が 0.5 mg/L (4hr)以下のもの
	劇物：LC_{50} が 0.5 mg/L (4hr)を越え 1.0 mg/L (4hr)以下のもの

また、皮膚腐食性ならびに眼粘膜損傷性については、以下の基準が示されている：

皮膚に対する腐食性	劇物：最高 4 時間までのばく露の後試験動物 3 匹中 1 匹以上に皮膚組織の破壊、すなわち、表皮を貫通して真皮に至るような明らかに認められる壊死を生じる場合
眼等の粘膜に対する重篤な損傷（眼の場合）	劇物:ウサギを用いた Draize 試験において少なくとも 1 匹の動物で角膜、虹彩又は結膜に対する､可逆的であると予測されない作用が認められる､または、通常 21 日間の観察期間中に完全には回復しない作用が認められる。または、試験動物 3 匹中少なくとも 2 匹で、被験物質滴下後 24、48 及び 72 時間における評価の平均スコア計算値が角膜混濁≧3 または虹彩炎＞1.5 で陽性応答が見られる場合。

なお、急性毒性における上記毒劇物の基準と GHS 分類基準（区分 1～5、動物はラットを優先するが、経皮についてはウサギも同等）とは下表の関係となっている：

暴露経路	急性毒性値（LD_{50}, LC_{50}）				
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5
経口 (mg/kg)	5	50	300	2000	5000
経皮 (mg/kg)	50	200	1000	2000	
吸入(4h)：気体 (ppm)	100	500	2500	20000	
吸入(4h)：蒸気 (mg/L)	0.5	2.0	10	20	
吸入(4h)：粉塵･ミスト (mg/L)	0.05	0.5	1.0	5	
	毒物		劇物		

また、刺激性における上記毒劇物の基準と GHS 分類基準（区分 1～2/3）とは下表の関係にあり、GHS 区分 1 と劇物の基準は同じである：

皮膚	区分 1	区分 2	区分 3
	腐食性 （不可逆的損傷）	刺激性 （可逆的損傷）	軽度刺激性 （可逆的損傷）
眼	区分 1	区分 2A	区分 2B
	重篤な損傷 （不可逆的）	刺激性（可逆的損傷、21 日間で回復）	軽度刺激性（可逆的損傷、7 日間で回復）
	劇物		

6. 有害性評価

以下に、得られた n-ヘプタン酸の急性毒性値をまとめる：

動物種	経路	LD_{50} (LC_{50})値	情報源 (資料番号)	文献	GHS 分類
ラット	経口	7000 mg/kg	ChemID(4), RETCS(5), HSDB(6), GESTIS(7), Patty(12)	1, 3	区分外
ラット	経口	8370 mg/kg	RTECS(5), HSDB(6), REACH(8), HPVIS(11)	4	区分外
マウス	経口	6400 mg/kg	ChemID(4), RETCS(5), HSDB(6), Patty(12)	2, 3	区分外
ウサギ	経皮	>2000 mg/kg	RTECS(5), HSDB(6), REACH(8), HPVIS(11), Patty(12)	5	区分外
ラット	吸入 (ミスト)	>4.6 mg/L/4H	RTECS(5), HSDB(6), REACH(8), HPVIS(11), Patty(12)	6	区分 4/5/区分外

6.1. 経口投与

n-ヘプタン酸の急性経口 LD_{50} 値は 3 件（ラット 2 件およびマウス 1 件）が認められたが、いずれも 5000 mg/kg を超えていた（GHS 区分外）。2 件（ラットおよびマウス各 1 件）の内容は全く不明のため、一番大きい LD_{50} 値を示すものの、内容が確認できたラットの知見（LD_{50} 値 8370 mg/kg）を代表値とするのは妥当と考えられる。

以上より、n-ヘプタン酸のラット経口投与による LD_{50} 値は 8370 mg/kg（GHS 区分外）であり、毒物劇物には該当しない。

6.2. 経皮投与

n-ヘプタン酸の急性経皮毒性試験による LD_{50} 値は、ウサギによる 1 件が認められ、>2000 mg/kg であった。2000 mg/kg で 4 例中 1 例の死亡が認められたものである。本知見は原著による確認ができないため、信頼性および妥当性を評価できない。しかしながら、本物質の経口毒性は低いこと、ならびに、経皮投与による知見はこの 1 件しかないことから、これを代表値とするのは妥当と考えられる。

以上より、n-ヘプタン酸の経皮投与による LD_{50} 値は、ウサギで>2000 mg/kg（GHS 区分 5）であり、毒物劇物には該当しない。

6.3. 吸入投与

n-ヘプタン酸の急性吸入毒性試験による LC_{50} 値は、ラットによる 1 件が認められ、ミスト暴露による>4.6 mg/L/4H であった。本試験は、OECD TG403 に従い、GLP にて実施されており、信頼性および妥当性は高いと判断される。

以上より、n-ヘプタン酸の吸入投与による LC_{50} 値は、ラットで>4.6 mg/L/4H（ミスト、GHS 区分 4/5/区分外）であり、毒物劇物には該当しない。

6.4. 皮膚・眼刺激性

n-ヘプタン酸は、OECD TG404 に従い、GLP にて実施した皮膚刺激性/腐食性試験で、ウサギに対し 60 分間の適用で腐食性を示した（資料 8）。

本知見は、GHS 区分 1 となる皮膚腐食性（不可逆的影響）を示すものであり、皮膚刺激性の観点から、n-ヘプタン酸は劇物に該当する。なお、ウサギの眼に対する強い刺激性が示されているが、21 日間で回復しない重篤な眼の損傷性についてのデータは認められていない（資料 8）。

6.5. 既存の規制分類との整合性

情報収集および評価により、n-ヘプタン酸の急性毒性値（LD_{50}/LC_{50} 値）は経口で 8370 mg/kg（GHS 区分外）、経皮で>2000 mg/kg（GHS 区分 5）、吸入で>4.6 mg/L/4H（ミスト、GHS 区分 4/5/区分外）と判断された。n-ヘプタン酸は、国連危険物輸送分類では UN 3265 (CORROSIVE LIQUID, ACIDIC, ORGANIC, N.O.S.)、Class 8（腐食性）、容器等級 I/II/III とされている。腐食性による容器等級 II の判定基準は、「3～60 分の皮膚への暴露で、14 日間の観察期間中に当該部位に完全な壊死をきたすもの」である。また、EU GHS 分類では、皮膚腐食性区分 1B に分類されている。n-ヘプタン酸の 60 分間暴露によりウサギ皮膚で認められた知見は、これらの分類が妥当であることを示している。以上より、今回の評価における皮膚刺激性に基づく n-ヘプタン酸の劇物指定は、国連危険物輸送分類、EU GHS 分

類とも整合しており、妥当なものと判断される。

7. 結論

- n-ヘプタン酸の急性毒性値（LD_{50}/LC_{50}値）ならびにGHS分類区分は以下のとおりである；ラット経口：8370 mg/kg（GHS区分外）、ウサギ経皮：>2000 mg/kg（GHS区分5）、ラット吸入：>4.6 mg/L/4H（ミスト、GHS区分4/5あるいは区分外）。
- n-ヘプタン酸の急性毒性値は、経口、経皮、吸入いずれの暴露経路においても毒劇物に相当しない。
- n-ヘプタン酸はウサギ皮膚に腐食性を示し、GHS 区分1（劇物相当）に該当する。
- 以上より、n-ヘプタン酸は劇物に指定するのが妥当と考えられる。
- 「n-ヘプタン酸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（案）」を参考資料1にとりまとめた。

8. 文献

いずれの文献も入手できなかった。

1. Food & Drug Research Laboratories, Inc., Papers. Vol. 123, Pg. ,1976.
2. Biochemical Journal. Vol. 34, Pg. 1196, 1940.
3. Lewis, R.J. Sr. (ed) Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials. 11th Edition. Wiley-Interscience, Wiley & Sons, Inc. Hoboken, NJ. 2004., p. 1906
4. Harrison W.A. (1976a) Acute Oral Toxicity Studies with heptanoic acid (SN1767). Industrial Biotest Laboratories, P.O. No. 045-858-76. Private Communication to FFHPVC. Unpublished report (Study report, 1976-06-24).
5. Harrison W.A. (1976b) Acute Dermal Toxicity Studies with heptanoic acid (SN1767). Industrial Biotest laboratories, P.O. No. 045-858-76. Private Communication to FFHPVC. Unpublished report (Study report, 1976-06-24).
6. Hoffman G. (1990) Acute inhalation toxicity study of heptanoic acid in the rat. Project No. 89-8215. Unpublished report to FFHPVC (Study report, 1990-05-03).
7. HOECHST CELANESE CORP; Primary Dermal Irritation Study with Heptanoic Acid in Rabbits (Project Report); 7/30/79; EPA Doc No. 88-920004544; Fiche No. OTS0536963 (Study report, 1979-07-29, 1979).
8. Study report, 1994-06-29, 1994.
9. Study report, 1976-06-24, 1976.

9. 別添（略）

- 参考資料 1
- 資料 1～12

以上