令和元年度報告
毒物劇物指定のための有害性情報の収集・評価

物質名：3-スルファニルプロパン酸

CAS No.：107-96-0

国立医薬品食品衛生研究所
安全性予測評価部

令和 2 年 3 月

要　約

3-スルファニルプロパン酸（別名：3-MPA）の急性毒性値（LD_{50}/LC_{50} 値）は、ラット経口で 63-126 mg/kg （GHS 区分 3)、ラット吸入で 1.82 mg/L/4H（エアロゾル、GHS 区分4）であった。3-MPA の急性毒性値は、経口、および吸入において劇物に相当する。一方、 3-MPA は、皮膚および眼腐食性物質であり、GHS 区分 1（劇物相当）に該当する。以上より、3-MPA は劇物に指定するのが妥当と考えられた。本判断は、国連危険物輸送および GESTIS による GHS 分類とほぼ合致している。

1.　目的

本報告書の目的は、3-MPA 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, 2019 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、

http://www.inchem.org/pages/sids.html 、あるいはhttp://www.inchem.org/]

- 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, 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]

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、21st ed, 2019)：国連による危険物輸送に関する分類 [http://www.unece.org/trans/danger/publi/unrec/rev21/21files_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、3-MPA の国際的評価文書等として SIDS および REACH が認められた。

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

3.1. 物理化学的特性

3.1.1. 物質名

和名： 3-スルファニルプロパン酸、β-メルカプトプロピオン酸

英名：3-Mercaptopropanoic acid, β-Mercaptopropionic acid, 3-MPA

3.1.2. 物質登録番号

CAS：107-96-0

UN TDG：2922

EC (Index)：203-537-0（未収載）

3.1.3. 物性

分子式：$C_3H_6O_2S$（資料 2）

分子量：106.15（資料 2）

構造式：図 1

外観：液体（資料 5）

密度：1.22 g/cm^3 （20℃）（資料 2）

沸点：約 197℃（資料 5）

融点：16.8℃（資料 5）

引火点：93℃（資料 2）

蒸気圧：0.063 hPa (25℃)（資料 5）
相対蒸気密度（空気＝1）：―
水への溶解性：>603.7g/L (22℃)（資料 5）
オクタノール/水分配係数（Log P）：0.43（資料 5）
その他への溶解性：―
安定性・反応性：―
換算係数：1 mL/m^3 (ppm) = 4.41 mg/m^3, 1 mg/m^3 = 0.227 ppm (1 気圧、20℃)

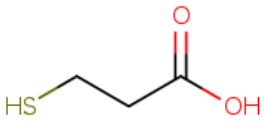

図 1

3.1.4. 用途

安定化剤、酸化防止剤、触媒、化学中間体（資料 7）

3.2. 急性毒性に関する情報

Chem ID（資料 1）、GESTIS（資料 2）、RTECS（資料 3）、HSDB（資料 4）、SIDS（資料 5）および REACH（資料 6）に記載された急性毒性情報を以下に示す。

3.2.1. ChemID（資料 1）

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	96 mg/kg	[1]

3.2.2. GESTIS（資料 2）

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	96 mg/kg	[1]

3.2.3. RTECS（資料 3）

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	96 mg/kg	[1]

3.2.4. HSDB（資料 4）

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	50-400 mg/kg #1	[2]

#1：無希釈

3.2.5. SIDS（資料 5）

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	120 mg/kg	—
ラット	吸入	1.81 mg/L/4H #1	—

#1：本物質を 4 時間暴露（エアロゾル）した。試験は OECD TG 403 に従い実施された。

3.2.6. REACH（資料 6）

動物種	投与経路	LD_{50} (LC_{50})値	文献
ラット	経口	63-126 mg/kg #1	[3]
ラット	経口	50-400 mg/kg	[2]
ラット	経口	96 mg/kg	[1]
モルモット	経皮	LDL_0：6100 mg/kg #2	[2]
ラット	吸入	1.82 mg/L/4H #3	[4]
ラット	吸入	>3200 ppm/7H (⇒ >18.7 mg/L/4H) #4	[3]

#1：1 群雌 2-3 例を用い、水を媒体として本物質を 15.8、31.6、63、126、252 mg/kg の用量で投与し、14 日間観察した。試験は OECD TG 401 に従って実施された。死亡例は、それぞれ 0/2、0/2、0/2、2/3、3/3 例であった LD_{50} 値は 63-126 mg/kg と算出された。なお、probit モデルを用いた LD_{50} 値は 120 mg/kg と算出された。

#2：LDL_0：最小致死量。無希釈の本物質をモルモットの皮膚に適用した。最低 5 mL/kg （6100 mg/kg：密度 1.22 g/cm^3 より換算） の適用から死亡（死亡例不明）が認められた。

#3：1 群雌雄各 5 例を用い、本物質を 0.86、1.35、2.053 mg/L の濃度で 4 時間暴露（エアロゾル、鼻部暴露）し 14 日間観察した。試験は OECD TG 403 に従い GLP にて実施された。死亡例は 1.35mg/L 以上で認められた。LC_{50} 値は 1.82 mg/L/4H と算出された。

#4：1 群雄各 6 例を用い、本物質を 170 、3200 ppm の名目濃度で 7 時間暴露（蒸気、全身曝露）し 14 日間観察した。それぞれ室温、125℃で生成した蒸気を用いた。死亡例はいずれの濃度でも認められなかった。LC_0 値は>3200 ppm/7H (>14.1 mg/L/7H)であった。LC_{50} 値は>14.1 mg/L/7H と推察され、4 時間暴露値は>14.1×√7/√4=>18.7 mg/L/4H と換算される。

3.2.7. PubMed

キーワードとして、[CAS No. 107-96-0 & acute toxicity]による PubMed 検索を行ったが、

急性毒性に関する新たな情報得られなかった。

3.3. 刺激性に関する情報

3.3.1. GESTIS（資料 2）

皮膚および眼の刺激性に関する情報は認められなかった。

3.3.2. RTECS（資料 3）

皮膚および眼の刺激性に関する情報は認められなかった。

3.3.3. HSDB（資料 4）

ヒトに対して刺激性がみとめられた[5]。

3.3.4 SIDS（資料 5）

- 皮膚

本物質はウサギ皮膚に対して腐食性が認められた（文献不明）。

In vitro試験によるとヒトの皮膚に対して腐食性を示す可能性が認められた（文献不明）。

3.3.5 REACH（資料 6）

- 皮膚

無希釈の本物質（純度不明）を1例のウサギ皮膚に7時間閉塞適用した。適用15分以内に紅斑や浮腫を伴う壊死および熱傷が認められた。よって、腐食性物質であると判断された[3]。

無希釈の本物質（純度99.08%）50 μLをin vitro試験（EpiDerm Skin Model）に3および60分適用し、細胞を洗浄した3時間後に細胞生存率を調べた。試験は、EU Method B.40およびOECD TG 431と類似の方法にも従いGLPで実施された。3および60分曝露ともに細胞生存率は、陰性対照（100%）に対して5.26%、5.24%であった。よって、in vivoにおいても腐食性であると推察された[6]。

- 眼

無希釈の本物質0.1g（純度不明、個体と液体の混合）を1例のウサギ眼に30秒（洗浄有）および制限なし（洗浄無し）で適用した。適用30秒後から14日間観察した。試験はOECD TG 405と類似の方法に従い実施された。重度の角膜損傷および結膜炎が適用後すぐに認められ、14日間観察された。また、洗浄の有無によらず反応は同じであった。これは、角膜への損傷は持続性があることを示した。よって、本物質は腐食性であり、眼に対して重篤な損傷を引き起こすと判断された[3]。

3.3.6 PubMed

キーワードとして、[CAS No. 107-96-0 & 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 2,8）
  2922 (CORROSIVE LIQUID, TOXIC,N.O.S.)、Class8（腐食性）、副次的危険性 Class 6.1（毒物）、Packing group（容器等級）II

- EU CLP GHS 調和分類（資料 3,9）
  本物質についての調和分類はなされていない。なお、GESTIS（資料 3）には、以下の GHS 分類が記載されている。
  Acute Tox.3（oral, H301：Toxic if swallowed）、Acute Tox.4（inhalation, H332：Harmful if inhaled）、Skin corrosion 1B（H314: Causes severe skin burns and eye damage）、Serious eye damage 1 (H318: Causes serious eye damage)

4. 代謝および毒性機序

代謝および急性毒性機序に関する情報は認められなかった。

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 3-スルファニルプロパ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	96 mg/kg	ChemID(1), GESTIS(2) RTECS(3), REACH(6)	[1]	区分 3
ラット	経口	50-400 mg/kg	HSDB(4), REACH(6)	[2]	区分 1-3
ラット	経口	120 mg/kg	SIDS(5)	—	区分 3
ラット	経口	63-126 mg/kg	REACH(6)	[3]	区分 3
モルモット	経皮	>6100 mg/kg #1	REACH(2)	[2]	区分 5 超
ラット	吸入（エアロゾル）	1.82 mg/L/4H	SIDS(5), REACH(6)	[4]	区分 4
ラット	吸入（蒸気）	>18.7 mg/L/4H #1	REACH(6)	[3]	区分 3 超

#1：試験条件が詳細不明なので代表値に採用しなかった。

以下に、得られた 3-メルカプトプロピオン酸メチル（MMP、CAS 2935-90-2）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	経皮	1905 mg/kg	SIDS(5)	—	区分 4
ラット	吸入（蒸気）	2.11 mg/L/4H	SIDS(5)	—	区分 3
ラット	吸入（蒸気）	1.8 mg/L/4H #1	SIDS(5)	—	区分 2

#1：MMP の試験結果。MMP の蒸気圧は 2.86 hPa (25℃)であることから、飽和蒸気濃度は 10^6 x 0.286 kPa / 101 kPa = 2832 ppm (= 13.9 mg/L)と計算される。試験濃度の 1.8 mg/mL は飽和蒸気濃度より低い為、MMP の吸入試験は蒸気曝露で行われたと推察される。

6.1. 経口投与

3-MPAの急性経口毒性試験によるLD_{50}値が認められた[1-3] 。LD_{50}値 96 mg/kg, 50-400, 120 mg/kgは試験内容が明らかではないので代表値には採用できない。一方、OECD TG 401と類似の方法に従い実施され、ある程度内容が明らかである試験の LD_{50}値 63-126 mg/kgを代表値とすることは妥当と考えられる。

以上より、3-MPAのラット経口投与によるLD_{50}値は 63-126 mg/kg（GHS 区分 3）であり、劇物に該当する。

6.2. 経皮投与

3-MPA の急性経皮毒性試験による LD_{50} 値が認められた（[2]）。LD_{50} 値として>6100 mg/kg が認められたが、本知見については詳細（試験動物数、試験物質の濃度、死亡状況等）が不明なことから、本知見を本物質の代表値として採用することは困難であると判断される。一方、SIDS によると構造、物理化学的性質および毒性が類似の MMP の急性経皮毒性はラットでLD_{50}値 1905 mg/kg であった。この試験は OECD TG 402 に類似の方法で実施されたことが記載されているが、文献情報が不明であり詳細を把握できない。

以上より、3-MPA の適切なラット急性経皮毒性試験は認められず、LD_{50}値は不明である。

6.3. 吸入投与

3-MPA の急性吸入毒性試験によるLC_{50}値が認められた[3, 4]。

- 蒸気暴露について

本知見（LC_{50}値 >18.7 mg/L/4H）については実際の曝露濃度が不明なこと、また現在のガイドラインに適合していない試験法で実施されていることから[3]、本知見を本物質のLC_{50}値として採用することは困難であると判断される。一方、SIDS によると MMP の急性吸入毒性はラットでLC_{50}値 1.80 および 2.11 mg/L/4H であった。この試験は OECD TG 403 に類似の方法で実施されたことが記載されているが、文献情報が不明であり詳細を把握できない。

- エアロゾル曝露について

OECD TG 403、EU Method B.2 および EPA OPPTS 870.1300 に従い GLP にて実施され、ある程度内容が明らかであるLC_{50}値 1.82 mg/L/4H [4]を代表値とすることは妥当と考えられる。

以上より、3-MPAのラット吸入曝露試験によるLC_{50}値は 1.82 mg/L/4H （GHS 区分 4）であり、毒劇物に該当しない。

6.4. 皮膚刺激性

無希釈の本物質（純度不明）を 1 例のウサギ皮膚に 7 時間適用した場合、適用 15 分以内に紅斑、浮腫を伴う壊死および熱傷が認められたので、腐食性であると判断された[3]。

また、EU Method B.40 および OECD TG 431 に類似の方法に従い実施された in vitro 皮膚腐食性試験の結果によると、本物質 50 μL を再生ヒト表皮に 3 分、60 分適用すると、3 時間後の細胞生存率は、それぞれ陰性対照に対して 5.26%、5.24%であった。この結果より、本物質は in vivo でも腐食性であると推察された[6]。

これらの知見は、GHS 区分 1 となる腐食性（不可逆的損傷）を示すものであり、皮膚刺激性の観点から、3-MPA は劇物に該当する。

6.5. 眼刺激性

OECD TG 405と類似の方法に従い実施された結果によると、無希釈の本物質0.1 g（純度不明）を1例のウサギ眼に30秒（洗浄有）適用すると、適用後すぐに重度の角膜損傷、結膜炎が認められた。また、適用時間の制限なし、眼の洗浄無しでも結果は同様であった。この結果から角膜損傷は不可逆であると認められ、本物質は腐食性であると判断された[3]。

この知見は、GHS区分1となる重篤な損傷（不可逆的損傷）を示すものであり、眼刺激性の観点から、3-MPAは劇物に該当する。

6.6. 既存の規制分類との整合性

情報収集および評価により、3-MPA の急性毒性値（LD_{50}/LC_{50} 値）は経口で 63-126 mg/kg（GHS 区分 3）、吸入で 1.81 mg/L/4H（エアロゾル、GHS 区分 4）と判断された。経皮および吸入（蒸気）の毒性知見は、代表値とすることは困難であった。また、皮膚に対しては皮膚腐食性（GHS 区分 1）および眼に対して刺激性（GHS 区分 1）と判断された。

この結果を既存の国連危険物輸送分類及び GESTIS による分類と比較し、下表に示した。今回の評価結果は、容易に比較できるように、相当する GHS 区分で示した。

3-MPA は、国連危険物輸送分類では 2922 (CORROSIVE LIQUID, TOXIC,N.O.S.)、が適用され、Class 8（腐食性）、副次的危険性 Class 6.1（毒物）、容器等級 II 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 分の皮膚への曝露で、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、毒物の容器等級 II の判定基準は、「毒性による容器等級 II の判定基準は、経口 LD_{50} 値 5～50 mg/kg、経皮 LD_{50} 値 50～200 mg/kg、吸入 LC_{50} 値は蒸気で 1000～3000 ppm/1H（= 250～750 ppm/4H、単純計

算として)、粉塵/ミストで 0.2～2.0 mg/L/1H（= 0.05～0.5 mg/L/4H)」である。一方、本物質は CLP に収載されていないため EU GHS 調和分類はなされていないが、GESTIS では、急性毒性の GHS 分類を経口に対し区分 3、吸入に対して区分4、皮膚腐食性に対し区分 1B（重篤な皮膚の薬傷及び眼の損傷)、眼腐食性に対し区分 1（重篤な眼の損傷）としている。3-MPA について認められた今回の知見は、国連危険物輸送分類について、結論（腐食性）は一致するが、判定基準には適合しなかった。一方、GESTIS による GHS 分類とは、整合していた。

以上より、今回の評価における急性経口毒性、急性吸入毒性（エアロゾル)、皮膚および眼の腐食性に基づく 3-MPA の劇物指定は、国連および GESTIS による GHS 分類と整合しており、妥当なものと判断される。

項目	今回評価（相当する GHS 区分）	国連分類	GESTIS による分類	
			Hazard Class /Category Code	Health hazard statements
急性毒性（経口）	区分 3	毒物 #1	Acute Tox. 3	Toxic if swallowed
急性毒性（経皮）				
急性毒性（吸入：蒸気）			Acute Tox. 4	Harmful if inhaled
急性毒性（吸入：エアロゾル）	区分 4		Acute Tox. 4	Harmful if inhaled
皮膚腐食性／刺激性	区分 1	腐食性	Skin Corr. 1B	Causes severe skin burns and eye damage
眼に対する重篤な損傷性／眼刺激性	区分 1		Eye Dam.1	Causes serious eye damage

#1：副次的危険性。

7. 結論

- 3-スルファニルプロパン酸の急性毒性値（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：63-126 mg/kg（GHS 区分 3)、ラット吸入：1.82 mg/L/4H（エアロゾル、GHS 区分 4)。
- 3-スルファニルプロパン酸の経皮および吸入（蒸気）急性毒性試験の知見は認められない。
- 3-スルファニルプロパン酸の急性毒性値は経口において劇物に相当する。
- 3-スルファニルプロパン酸は、皮膚および眼において腐食性物質であり、GHS 区分 1（劇物相当）に該当する。
- 以上より、3-スルファニルプロパン酸は劇物に指定するのが妥当と考えられる。

- 「3-スルファニルプロパ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

以下の各文献は、各情報源からの 2 次引用。

1. Tin Research Institute, Publication. (Middlesex, UK) 1934-76. For publisher information, see IRIPDP. (-,1,1973).
2. Patty, F. (ed.). Industrial Hygiene and Toxicology: Volume II: Toxicology. 2nd ed. New York: Interscience Publishers, 1963., p. 1809.
3. Study report Unnamed 1973.
4. Study report Unnamed 2008.
5. International Labour Office. Encyclopedia of Occupational Health and Safety. Volumes I and II. New York: McGraw-Hill Book Co., 1971., p. 31.
6. Study report Unnamed 2002.

9. 別添

- 参考資料 1
- 資料 1～9

以上