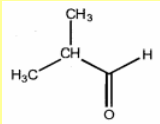
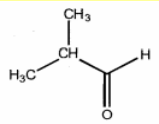


項目名	和訳結果(EU-RAR)	原文(EU-RAR)
-----	--------------	------------

1. 一般情報
GENERAL INFORMATION

1.01 物質情報
SUBSTANCE INFORMATION

CAS番号	78-84-2	78-84-2
物質名(日本語名)	イソブタナール	
物質名(英名)	Isobutanol	Isobutanol
別名等		
国内適用法令の番号		
国内適用法令物質名		
OECD/HPV名称	プロパナール、2-メチル-	Propanal, 2-methyl-
分子式	C4H8O	C4H8O
構造式		
備考	分子量: 72.11	Molecular Weight: 72.11

1.02 安全性情報収集計画書/報告書作成者に関する情報
SPONSOR INFORMATION

機関名	OECD/HPVプログラム、(SIAM5)により収集された情報 (http://cs3-hq.oecd.org/scripts/hpv/)	OECD/HPV Program, SIDS Dossier, assessed at SIAM5(28-30 October, 1996) (http://cs3-hq.oecd.org/scripts/hpv/)
代表者名		
所在地及び連絡先		
担当者氏名		
担当者連絡先(住所)		
担当者連絡先(電話番号)		
担当者連絡先(メールアドレス)		
報告書作成日		
備考	スポンサー国: アメリカ	Sponsor Country: United States of America

1.03 カテゴリー評価
DETAILS ON CHEMICAL CATEGORY

1.1 一般的な物質情報
GENERAL SUBSTANCE INFORMATION

物質のタイプ	有機化学物質	Organic
物質の色・におい・形状等の情報		
物理的状態(20°C、1013hPa)	液体	Liquid
純度(重量/重量%)	99.6%(重量%)	99.6% by weight
出典		
備考		

1.2 不純物
IMPURITIES

CAS番号		
物質名称(IUPAC)	1-ブタナール	1-Butanol
国内適用法令の番号		
適用法令における名称		
含有率(%)		
出典		
備考		

1.3 添加物
ADDITIVES

CAS番号		
物質名称(IUPAC)		
国内適用法令の番号		
適用法令における名称		
含有率(%)		
出典		
備考	なし	None

1.4 別名
SYNONYMS

物質名-1	イソブチラルデヒド	Isobutyraldehyde
物質名-2	2-メチルプロパナール	2-Methylpropanal
物質名-3	イソブチルアルデヒド	Isobutyl aldehyde
物質名-4	プロパナール、2-メチル	Propanal, 2-methyl
物質名-5	イソブチリックアルデヒド	Isobutyric aldehyde
物質名-6	2-メチル-1-プロパナール	2-Methyl-1-propanal
物質名-7	2-メチルプロピアンアルデヒド	2-methylpropionaldehyde
物質名-8	バリンアルデヒド	Valine aldehyde

物質名-9	イソプロピルホルムアルデヒド	Isopropylformaldehyde
物質名-10	UN2045	UN2045
物質名-11	OHS11740	OHS11740
出典		
備考		

1.5 製造・輸入量 QUANTITY

製造・輸入量	<p>・世界年間生産量の推定値は(1993)約700,807t(約1545百万ポンド).</p> <p>・アメリカ年間生産量の推定値は(1993)約258,550t(約570百万ポンド).</p>	<p>・Estimated worldwide annual production (1993) of ca.700,807 metric tonnes (ca 1545 million pounds).</p> <p>・Estimated U.S. total annual production (1993) of ca.258,550 metric tonnes (ca 570 million pounds).</p>
報告年		
出典	Union Carbide plant experience	Union Carbide plant experience
備考	イソブタナールは専ら中間体として使用され、その生産および使用は閉鎖システム内に限られる。輸送は主に大型貨物船による。	This chemical is solely used as a chemical intermediate and is produced and used exclusively in closed systems. Transport is primarily by bulk carrier.

製造・輸入量		
報告年		
出典	Union Carbide plant experience	Union Carbide plant experience
備考	製造工程: イソブタナールはプロピレンの触媒ヒドロホルミル化による通常のブタナール(n-ブチルアルデヒド)製造時の副生成物である。閉鎖システム内で圧力をかけてプロピレン、一酸化炭素、水素を反応させる。溶解ガスおよび重化合物からイソブタナールとブタナールの混合物を分離し、水素添加によって1-ブタノールおよびイソブタノールとするか、またはこのアルデヒド混合物をさらに精製してイソブタナールとブタナールを分離する。通常は、反応炉やカラム、貯蔵タンクからのプロセス排気をプラント燃料供給システム内に回収する。現在、米国内の多くのプラントが新規発生源性能基準(New Source Performance Standards(NSPS))に基づいて操業している。本基準では、すべてのサイズのバルブについて3か月ごと、すべてのポンプおよびコンプレッサーについて1か月ごとの漏出・排出モニタリングを規定している。	Manufacturing Process: Isobutanol is manufactured as a coproduct with normal butanal (nbutyraldehyde) by catalytic hydroformylation of propylene. The propylene, carbon monoxide and hydrogen reaction is carried out under pressure in closed systems. The isobutanol/butanol mix is stripped of dissolved gasses and heavies and either hydrogenated to 1-butanol and isobutanol, or the aldehyde mix is further refined to separate the isobutanol and butanal. Typically, process vents from reactors, columns and storage tanks are collected into the plant fuel system. Many plants in the U.S. are now operating under the "New Source Performance Standards (NSPS)" rule which requires fugitive emission monitoring of all size valves on a quarterly basis and all pumps and compressors on a monthly basis.

製造・輸入量		
報告年		
出典	Union Carbide plant experience	Union Carbide plant experience
備考	このアルデヒドはばら荷でタンクローリーまたはタンク車両(軌道車両)により輸送される。適切にデザインされたステーションにおいて、閉鎖されたタンクローリーまたはタンク車両に積み込みを行う。この作業中に排出された蒸気は回収され、排気回収装置を経由して焼却炉に送られ、ここでイソブタナール蒸気が焼却処理される。	The aldehyde is shipped in bulk by tank truck or tank car (rail cars). Properly designed stations allow for loading into closed tanks of the trucks or cars. Vapor emitted during these operations is collected and routed through a vent collection system to an incinerator where isobutanol vapor is destroyed.

1.6 用途情報 USE PATTERN

主な用途情報		
工業的用途		
用途分類	工業	Industrial
出典		
備考	イソブタナールは専ら中間体として使用される。主な用途はプラント内でのイソブタノールへの変換である。また、酸化処理されイソ酪酸へ変換されることもある。さらに、イソブタナールはアルドール縮合により二量体に変換され、この二量体が水素添加され2,2,4-トリメチル-1,3-ペンタンジオールに変換される。イソブタナールのその他の主な用途として、エステルや特殊化学製品の製造に使用される。イソブタナール生産量のうち15%が、ホルムアルデヒドとの縮合および水素化反応によりネオペンチルグリコールに変換される(Kirk-Othmer, 4th ed., vol. 4, p. 736)。OECDに提出された情報によれば、イソブタナールはフィンランドで軟化剤の製造に使用されている。	Isobutanol finds sole use as a chemical intermediate. The major use is the in-plant conversion to isobutanol. In addition, the aldehyde may also be oxidized to isobutyric acid. Isobutanol is also converted through aldol condensation to a dimer, which is hydrogenated to 2,2,4-trimethyl- 1,3-pentanediol. Other major uses include the manufacture of esters and specialty chemicals. Fifteen percent of isobutanol production is converted to neopentyl glycol by condensation with formaldehyde and hydrogenation (Kirk- Othmer, 4 th ed., vol. 4, p. 736). According to information submitted to OECD, isobutanol is used in Finland in the production of softeners.

主な用途情報		
工業的用途		
用途分類	消費者による使用	Consumer Uses
出典	Food Chemical Codex, 1972. Cited in: U.S. National Toxicology Program,(1999)NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis. Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.	Food Chemical Codex, 1972. Cited in: U.S. National Toxicology Program,(1999)NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis. Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.

備考	イソブタナールは多くの食品に天然成分として含まれている。例えば豆類、牛脂、カシス、パン、青菜、バター、ニンジン、カリフラワー、チーズ、コーヒー、茶、ジャガイモ、ピーナッツ、トマト、ワイン、ウイスキーなどに含まれる。	Isobutanol is natural component of many foods. It is present in beans, beef fat, black currents, bread, green vegetables, butter, carrots, cauliflower, cheese, coffee, tea, potatoes, peanuts, tomatoes, wine, and whisky.
主な用途情報		
工業的用途		
用途分類	消費者による使用	Consumer Uses
出典	Furia, T.E., and Bellanca, N. (eds). Fenaroli' s Handbook of Flavor Ingredients, 2 nd Edition, Volume 2. CRC Press, Cleveland, OH. Not identified.	Furia, T.E., and Bellanca, N. (eds). Fenaroli' s Handbook of Flavor Ingredients, 2 nd Edition, Volume 2. CRC Press, Cleveland, OH. Not identified.
備考	イソブタナールの平均含有濃度は、アルコール飲料で5.0ppm、焼き菓子で0.5～1.0ppm、キャンディーで0.67ppm、アイスクリームで0.25～0.50ppm、非アルコール飲料で0.3ppmと報告されている。	Reported average concentrations of isobutanol range from 5.0 ppm in alcoholic beverages to 0.5 to 1.0 ppm in baked good, 0.67 ppm in candy, 0.25 to 0.50 ppm in ice cream, and 0.3 ppm in non-alcoholic beverages.

1.7 環境および人への暴露情報 SOURCES OF EXPOSURE

暴露に関する情報	一次的放出	Fugitive Emissions
出典		
備考	バルブ、ポンプ、フランジについては一部の施設で漏出・排出モニタリングが実施されている(一部の米国連邦法および州法の規定に基づく)。規制上の許容「漏出」限度は500～10,000ppmと設定されている。これらの規制に基づき、許容漏出限度を超える漏出が認められた場合には5日以内に修繕しなければならないが、適切な報告を行うことにより、予定された次の24時間操業休止時まで修繕を延期することができる。	Fugitive emissions monitoring is being conducted on valves, pumps and flanges in some units (as required by some federal and state regulations in the U.S.). Regulations have allowable "leak" limits, which range from 500 to 10,000 ppm. Under some regulations, repairs must be attempted as early as 5 days after detection of leaks exceeding the allowable limit, but with proper reporting may be extended until the next scheduled 24-hour shutdown.

暴露に関する情報	<p>職業暴露</p> <p>ある製造場において、イソブタナールの基準暴露値を設定するため1990年から1995年までの期間に労働衛生モニタリングを実施した。その結果、計27サンプルが収集された。このうち大部分のイソブタナール曝露濃度が0.010ppm未満であった。2つのサンプルで曝露濃度が測定可能であった(8時間荷重平均で12ppmおよび18ppm)。欧州の製造施設でも同様のデータが得られている。この施設では1979年から1996年までに計217の個人的モニタリングサンプルが収集された。このうち193が製造施設から得られたサンプルであり、12が保管および充填作業に関連するサンプル、8つが研究活動に関連するサンプル、4つが保守作業に関連するサンプルであった。以下の表に結果を示す。</p>	<p>Occupational Exposures</p> <p>In one production site, some industrial hygiene monitoring was conducted in the 1990 to 1995 time frame in order to establish an exposure baseline to this material. A total of 27 samples were collected; the bulk of the results were less than 0.010 ppm. Two samples yielded results with measurable exposure concentrations, 12 and 18 ppm based on an 8-hour time weighted average. Similar data have been collected in a European production facility. A total of 217 personal monitoring samples were collected between 1979 and 1996. Of these, 193 were in the production units, 12 were associated with storage and filling operations, 8 with research activities and 4 with maintenance operations. Results are listed in the following table:</p>																																																
出典																																																		
備考	<table><tr><td>総計</td><td></td><td>製造</td><td>保管/充填作業</td><td>研究活動</td><td>保守作業</td></tr><tr><td>N</td><td>217</td><td>193</td><td>12</td><td>8</td><td>4</td></tr><tr><td>平均</td><td>0.2 ppm</td><td>0.2 ppm</td><td>0.1 ppm</td><td>0.1 ppm</td><td>3.4 ppm</td></tr><tr><td>レンジ</td><td>0-7 ppm</td><td>0-7 ppm</td><td>0.02-0.3 ppm</td><td>0-0.3 ppm</td><td>3-3.7 ppm</td></tr></table>	総計		製造	保管/充填作業	研究活動	保守作業	N	217	193	12	8	4	平均	0.2 ppm	0.2 ppm	0.1 ppm	0.1 ppm	3.4 ppm	レンジ	0-7 ppm	0-7 ppm	0.02-0.3 ppm	0-0.3 ppm	3-3.7 ppm	<table><tr><td>Total</td><td></td><td>Production</td><td>Storage/Filling</td><td>Research</td><td>Maintenance</td></tr><tr><td>N</td><td>217</td><td>193</td><td>12</td><td>8</td><td>4</td></tr><tr><td>Average</td><td>0.2 ppm</td><td>0.2 ppm</td><td>0.1 ppm</td><td>0.1 ppm</td><td>3.4 ppm</td></tr><tr><td>Range</td><td>0-7 ppm</td><td>0-7 ppm</td><td>0.02-0.3 ppm</td><td>0-0.3 ppm</td><td>3-3.7 ppm</td></tr></table>	Total		Production	Storage/Filling	Research	Maintenance	N	217	193	12	8	4	Average	0.2 ppm	0.2 ppm	0.1 ppm	0.1 ppm	3.4 ppm	Range	0-7 ppm	0-7 ppm	0.02-0.3 ppm	0-0.3 ppm	3-3.7 ppm
総計		製造	保管/充填作業	研究活動	保守作業																																													
N	217	193	12	8	4																																													
平均	0.2 ppm	0.2 ppm	0.1 ppm	0.1 ppm	3.4 ppm																																													
レンジ	0-7 ppm	0-7 ppm	0.02-0.3 ppm	0-0.3 ppm	3-3.7 ppm																																													
Total		Production	Storage/Filling	Research	Maintenance																																													
N	217	193	12	8	4																																													
Average	0.2 ppm	0.2 ppm	0.1 ppm	0.1 ppm	3.4 ppm																																													
Range	0-7 ppm	0-7 ppm	0.02-0.3 ppm	0-0.3 ppm	3-3.7 ppm																																													

暴露に関する情報	OECDに提出された情報によれば、フィンランドでのイソブタナールの職業暴露と環境暴露について下記に示す。	According to information submitted to OECD, occupational and environmental exposures to isobutanol in Finland are as follows:																				
出典																						
備考	<table><tr><th>発生源</th><th>作業環境中濃度 (mg/m³)</th></tr><tr><td>PVBフィルム製造での排出</td><td>1.9</td></tr><tr><td>農薬の製造</td><td>0.02-0.08</td></tr><tr><td>加熱溶解接着機器の使用</td><td>0.01-0.07</td></tr><tr><td>ラミネートガラスプレートのカバー</td><td>0.01-0.07</td></tr></table>	発生源	作業環境中濃度 (mg/m ³)	PVBフィルム製造での排出	1.9	農薬の製造	0.02-0.08	加熱溶解接着機器の使用	0.01-0.07	ラミネートガラスプレートのカバー	0.01-0.07	<table><tr><th>Source</th><th>Workplace Concentration (mg/m³)</th></tr><tr><td>Emissions in handling PVB films</td><td>1.9</td></tr><tr><td>Manufacture of pesticides</td><td>0.02-0.08</td></tr><tr><td>Use of hotmelt gluing machine</td><td>0.01-0.07</td></tr><tr><td>Scarving laminated glass plates</td><td>0.01-0.07</td></tr></table>	Source	Workplace Concentration (mg/m ³)	Emissions in handling PVB films	1.9	Manufacture of pesticides	0.02-0.08	Use of hotmelt gluing machine	0.01-0.07	Scarving laminated glass plates	0.01-0.07
発生源	作業環境中濃度 (mg/m ³)																					
PVBフィルム製造での排出	1.9																					
農薬の製造	0.02-0.08																					
加熱溶解接着機器の使用	0.01-0.07																					
ラミネートガラスプレートのカバー	0.01-0.07																					
Source	Workplace Concentration (mg/m ³)																					
Emissions in handling PVB films	1.9																					
Manufacture of pesticides	0.02-0.08																					
Use of hotmelt gluing machine	0.01-0.07																					
Scarving laminated glass plates	0.01-0.07																					

1.8 追加情報 ADDITIONAL INFORMATION

既存分類		
職業暴露限界		
廃棄方法		
文献調査の範囲と日付		

出典	Reference: American Industrial Hygiene Association (AIHA). (2003) The AIHA 2003 Emergency Response Planning Guidelines and Workplace Environmental Exposure Level Guides Handbook. American Industrial Hygiene Association, Fairfax, VA.	Reference: American Industrial Hygiene Association (AIHA). (2003) The AIHA 2003 Emergency Response Planning Guidelines and Workplace Environmental Exposure Level Guides Handbook. American Industrial Hygiene Association, Fairfax, VA.
備考	米国では、イソブタナールについて職業安全衛生管理局 (OSHA) による許容曝露限度 (PEL) が規定されていない。	In the U.S. no OSHA Permissible Exposure Limit (PEL) has been established for isobutanol.

既存分類		
職業暴露限界		
廃棄方法		
文献調査の範囲と日付		
出典	American Industrial Hygiene Association (AIHA). (2003) The AIHA 2003 Emergency Response Planning Guidelines and Workplace Environmental Exposure Level Guides Handbook. American Industrial Hygiene Association, Fairfax, VA.	American Industrial Hygiene Association (AIHA). (2003) The AIHA 2003 Emergency Response Planning Guidelines and Workplace Environmental Exposure Level Guides Handbook. American Industrial Hygiene Association, Fairfax, VA.
備考	米国工業衛生協会 (AIHA) が職場環境での曝露濃度 (WEEL) を 25ppm と設定している。この AIHA による WEEL 値は、すべての従業員が繰り返し曝露しても健康への有害な影響がないとされる代表的な職場環境曝露濃度と考えられている。	A WEEL (Workplace Environmental Exposure Level) of 25 ppm has been established by the American Industrial Hygiene Association (AIHA). The AIHA WEEL value represents the workplace exposure level to which it is believed all employees could be exposed repeatedly without adverse health effects.

既存分類		
職業暴露限界		
廃棄方法		
文献調査の範囲と日付		
出典	American Industrial Hygiene Association (AIHA). (2002) AIHA Workplace Environmental Exposure Level Guide for Isobutyraldehyde. American Industrial Hygiene Association, Fairfax, VA.	American Industrial Hygiene Association (AIHA). (2002) AIHA Workplace Environmental Exposure Level Guide for Isobutyraldehyde. American Industrial Hygiene Association, Fairfax, VA.
備考	イソブタナールは主に反応性中間物質として使用される。生産されるイソブタナールのほとんどが化合物の製造で消費される。イソブタナールは揮発性および引火性であるため、その生産および他の化合物への変換は閉鎖システム内で行わなければならない。輸送はばら積み貨物船による。これらの方法で製造および輸送を行うことにより、職場での曝露を最小限に抑えることができる。	Isobutanol's primary use is as a reactive intermediate. Most isobutanol is consumed captively in chemical manufacturing. Production and conversion to other chemicals necessarily takes place in closed systems because of the volatile and flammable nature of isobutanol. It is transported by bulk carrier. These manufacturing and transportation practices minimize workplace exposure.

2. 物理化学的性状 PHYSICAL CHEMICAL DATA

2.1 融点 MELTING POINT

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	ASTM D2386/D1177	Method (e.g. OECD, other): ASTM D2386/D1177
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
融点: °C	-66°C	-66°C
分解: °C		
昇華: °C		
結論		
注釈	凝固点	Freezing point
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings Division, Material Safety Data Sheet	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings Division, Material Safety Data Sheet
備考		

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	データなし	Method (e.g. OECD, other): no data
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
融点: °C	-65.9°C	-65.9°C
分解: °C		

昇華: °C		
結論		
注釈	凝固点	Freezing point
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Budavari, S (Ed) (1989) The Merck Index, An Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals, 11 th Edition. Merck Research Laboratories, Rahway, NJ.	Budavari, S (Ed) (1989) The Merck Index, An Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals, 11 th Edition. Merck Research Laboratories, Rahway, NJ.
備考		

2.2 沸点

BOILING POINT

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	ASTM E1719-95	ASTM E1719-95
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
沸点: °C	64.1°C	64.1°C
圧力	101.3 kPa (760 Torr)	101.3 kPa (760 Torr)
分解: °C		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings Materials Division, Material Safety Data Sheet	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings Materials Division, Material Safety Data Sheet
備考		

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	データなし	no data
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
沸点: °C	64°C	64°C
圧力	101.3 kPa (760 Torr)	101.3 kPa (760 Torr)
分解: °C		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Budavari, S (Ed) (1989) The Merck Index, An Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals, 11 th Edition. Merck Research Laboratories, Rahway, NJ.	Budavari, S (Ed) (1989) The Merck Index, An Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals, 11 th Edition. Merck Research Laboratories, Rahway, NJ.
備考		

2.3 密度(比重)

DENSITY(RELATIVE DENSITY)

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	ASTM D4052	ASTM D4052
GLP		
試験を行った年		
試験条件		
結果	0.79 g/ml	0.79 g/ml
タイプ		
温度(°C)	20°C/4°C	20°C/4°C
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		

引用文献	Budavari, S. ed. (1989) The Merck Index, An Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals, 11 th Edition. Merck Research Laboratories, Rahway, NJ	Budavari, S. ed. (1989) The Merck Index, An Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals, 11 th Edition. Merck Research Laboratories, Rahway, NJ
備考		

2.4 蒸気圧
VAPOUR PRESSURE

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈	いいえ	NO
方法	ASTM E1719-95	ASTM E1719-95
GLP		
試験を行った年		
試験条件		
結果		
蒸気圧	18.4 kPa (= 138 mm Hg)	18.4 kPa (= 138 mm Hg)
温度: °C	20°C	20°C
分解: °C		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings Materials Division, Material Safety Data Sheet	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings Materials Division, Material Safety Data Sheet
備考		

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈	いいえ	NO
方法	ASTM E1719-95	ASTM E1719-95
GLP		
試験を行った年		
試験条件		
結果		
蒸気圧	172 mm Hg (実験)	172 mm Hg (experimental)
温度: °C	25°C	25°C
分解: °C		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Howard, P.H. and W. M. Meylan (ed.) (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals. Lewis Pub. New York, p. 72.	Howard, P.H. and W. M. Meylan (ed.) (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals. Lewis Pub. New York, p. 72.
備考		

2.5 分配係数(log Kow)
PARTITION COEFFICIENT

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	計算	calculated
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
Log Kow	log P _{ow} = 0.89	log P _{ow} = 0.89
温度: °C		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Calculated from water solubility based on procedure of Verschueren, K. (1983) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd ed. p. 24.	Calculated from water solubility based on procedure of Verschueren, K. (1983) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd ed. p. 24.
備考		

試験物質名		
CAS番号		
純度等		

注釈 方法	測定, OECDガイドライン107 "分配 (n-オクタノール/水) フラスコ振盪試験"	measured, OECD Guide-line 107 "Partition Coefficient (n-octanol/water) Flaskshaking Method"
GLP	NO	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
Log Kow	log P _{ow} = 0.77	log P _{ow} = 0.77
温度: °C	25°C	25°C
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	BASF AG, Analytisches Labor; unveroeffentlichte Untersuchung (J.Nr. 124659/10 vom 10.12.1987)	BASF AG, Analytisches Labor; unveroeffentlichte Untersuchung (J.Nr. 124659/10 vom 10.12.1987)
備考		

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	計算	calculated,
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
Log Kow	log P _{ow} = 0.74	log P _{ow} = 0.74
温度: °C	25°C	25 °C
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Howard, P.H. and W. M. Meylan (ed.) (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals. Lewis Pub. New York, p. 72.	Howard, P.H. and W. M. Meylan (ed.) (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals. Lewis Pub. New York, p. 72.
備考		

2.6.1 水溶性性(解離定数を含む)

WATER SOLUBILITY & DISSOCIATION CONSTANT

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
水溶解度	6.5 重量%	6.5 wt%
温度: °C	20 °C	20 °C
pH		
pH測定時の物質濃度		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings, Materials Division, Material Safety Data Sheet.	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings, Materials Division, Material Safety Data Sheet.
備考		
解離定数		
試験物質		
同一性		
方法		
温度: °C		
GLP		
試験条件		
試験を行った年		
結果		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考		

試験物質名		
-------	--	--

CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
水溶解度	75 g/L	75 g/L
温度: °C	20°C	20°C
pH	pH 7	pH 7
pH測定時の物質濃度		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	BASF AG, Sicherheitsdatenblatt Isobutyaldehyd (19.11.1993)	BASF AG, Sicherheitsdatenblatt Isobutyaldehyd (19.11.1993)
備考		
解離定数		
試験物質		
同一性		
方法		
温度: °C		
GLP		
試験条件		
試験を行った年		
結果		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考		

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	実験	Experimental
GLP		
試験を行った年		
試験条件		
結果		
水溶解度	89 g/L	89 g/L
温度: °C	25°C	25°C
pH		
pH測定時の物質濃度		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Howard, P.H. and W. M. Meylan (ed.) (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals. Lewis Pub. New York, p. 72.	Howard, P.H. and W. M. Meylan (ed.) (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals. Lewis Pub. New York, p. 72.
備考		
解離定数		
試験物質		
同一性		
方法		
温度: °C		
GLP		
試験条件		
試験を行った年		
結果		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考		

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		

試験条件		
結果		
水溶解度	85 mg/L (水)	85 mg/L (water)
温度: °C		
pH	pH 7	pH 7
pH測定時の物質濃度		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Waggy, G. T. and J. R. Payne (1974) "Environmental Impact Analysis - Acute Aquatic Toxicity Testing". Project Report 910F44, Union Carbide Corporation, South Charleston Technical Center, South Charleston, WV.	Waggy, G. T. and J. R. Payne (1974) "Environmental Impact Analysis - Acute Aquatic Toxicity Testing". Project Report 910F44, Union Carbide Corporation, South Charleston Technical Center, South Charleston, WV.
備考		
解離定数		
試験物質		
同一性		
方法		
温度: °C		
GLP		
試験条件		
試験を行った年		
結果		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考		

2.6.2 表面張力
SURFACE TENSION

2.7 引火点(液体)
FLASH POINT(LIQUIDS)

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	ASTM D56	ASTM D56
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
引火点: °C	< -18 °C (クローズドカップ)	< -18 °C (closed cup)
試験のタイプ		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings, Materials Division, Material Safety Data Sheet National Fire Protection Association (2002) Fire Protection Guide to Hazardous Materials, 13 th Edition. National Fire Protection Association (NFPA), Quincy, MA.	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings, Materials Division, Material Safety Data Sheet National Fire Protection Association (2002) Fire Protection Guide to Hazardous Materials, 13 th Edition. National Fire Protection Association (NFPA), Quincy, MA.
備考		

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	ASTM D1310	ASTM D1310
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
引火点: °C	-10 °C (オープンカップ)	-10 °C (open cup)
試験のタイプ		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		

引用文献	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings, Materials Division, Material Safety Data Sheet National Fire Protection Association (2002) Fire Protection Guide to Hazardous Materials, 13 th Edition. National Fire Protection Association (NFPA), Quincy, MA.	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings, Materials Division, Material Safety Data Sheet National Fire Protection Association (2002) Fire Protection Guide to Hazardous Materials, 13 th Edition. National Fire Protection Association (NFPA), Quincy, MA.
備考		

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
GLP		
試験を行った年		
試験条件		
結果		
引火点: °C	-40 °C	-40 °C
試験のタイプ		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology (1991) 4 th ed. vol. 4, p. 476. John Wiley and Sons, New York.	Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology (1991) 4 th ed. vol. 4, p. 476. John Wiley and Sons, New York.
備考		

2.8 自己燃焼性 (固体／気体)

AUTO FLAMMABILITY (SOLIDS/GASES)

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
自動発火点: °C	196°C	196°C
圧力		
結論		
注釈	385 ° F、自動発火温度	385 ° F, autoignition temperature
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	National Fire Protection Association (2002) Fire Protection Guide to Hazardous Materials, 13 th Edition. National Fire Protection Association (NFPA), Quincy, MA.	National Fire Protection Association (2002) Fire Protection Guide to Hazardous Materials, 13 th Edition. National Fire Protection Association (NFPA), Quincy, MA.
備考		

2.9 引火性

FLAMMABILITY

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
結果		
固体の場合		
引火性が高い		
気体の場合		
水との接触		
結論	下限 1.6 % (容量として) 上限 10.6 % (容量として)	Lower 1.6 % by volume Upper 10.6 % by volume
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings, Materials Division, Material Safety Data Sheet National Fire Protection Association (2002) Fire Protection Guide to Hazardous Materials, 13 th Edition. National Fire Protection Association (NFPA), Quincy, MA.	Union Carbide Chemicals and Plastics Co., Solvents & Coatings, Materials Division, Material Safety Data Sheet National Fire Protection Association (2002) Fire Protection Guide to Hazardous Materials, 13 th Edition. National Fire Protection Association (NFPA), Quincy, MA.
備考		

2.10 爆発性

EXPLOSIVE PROPERTIES

2.11 酸化性
OXIDISING PROPERTIES

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
GLP		
試験を行った年		
試験条件		
結果		
最大燃焼速度が参照混合物と同等かそれより高い		
予備試験で激しい反応		
非酸化性		
その他		
結論		
注釈	大気への接触により徐々に酸化し、イソ酪酸を生成する。また、この酸化により有害な過酸化化物や過酸が生じる。	Oxidizes slowly upon exposure to air, forming isobutyric acid. Oxidation can also cause formation of hazardous peroxides or peracids.
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	American Industrial Hygiene Association (2002). AIHA Workplace Environmental Exposure Guide for Isobutyraldehyde. AIHA, Fairfax, VA.	American Industrial Hygiene Association (2002). AIHA Workplace Environmental Exposure Guide for Isobutyraldehyde. AIHA, Fairfax, VA.
備考		

2.12 酸化還元ポテンシャル
OXIDATION/REDUCTION POTENTIAL

2.13 その他の物理化学的性状に関する情報
ADDITIONAL INFORMATION

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
GLP		
試験を行った年		
試験条件		
結果		
結論	\log_{10} ヘンリー則定数 = $-3.16 \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{mole}$ (計算値 = $6.9 \times 10^{-4} \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{mole}$)	\log_{10} Henry's Constant = $-3.16 \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{mole}$ (calc. = $6.9 \times 10^{-4} \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{mole}$)
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	QSAR Database, Technical Database Services, Inc. (Based on Thomas, R. G. (1982) Handbook of Chemical Properties Estimations.)	QSAR Database, Technical Database Services, Inc. (Based on Thomas, R. G. (1982) Handbook of Chemical Properties Estimations.)
備考		

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
GLP		
試験を行った年		
試験条件		
結果		
結論	ヘンリー則定数 = $1.8 \times 10^{-4} \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{mole}$ (蒸気圧と水溶解度からの計算値)	Henry's Law Constant = $1.8 \times 10^{-4} \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{mole}$ (calc. from VP and WSOL)
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Howard, P.H. and W. M. Meylan (ed.) (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals. Lewis Pub. New York, p. 72.	Howard, P.H. and W. M. Meylan (ed.) (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals. Lewis Pub. New York, p. 72.
備考		

3. 環境運命と経路
ENVIRONMENTAL FATE AND PATHWAYS

3.1 安定性
STABILITY

3.1.1. 光分解
PHOTODEGRADATION

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	大気中OHラジカルの反応速度に基づく実験結果	Experimental determination based upon reaction rate with OH - in air
タイプ		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
光源と波長(nm)		
太陽光強度に基づいた相対強度		
物質のスペクトル		
試験条件		
結果		
物質濃度		
温度(°C)		
直接光分解		
半減期t _{1/2}		
分解度(%)と時間		
量子収率 (%)		
間接光分解		
増感剤(タイプ)		
増感剤濃度		
速度定数	速度定数 = $26.3 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 / \text{分子} / \text{秒}$	Rate Constant = $26.3 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 / \text{molecule} / \text{second}$
半減期t _{1/2}	T 1/2 = 5.5 時間	T 1/2 = 5.5 hours
分解生成物		
結論	速度定数 = $26.3 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 / \text{分子} / \text{秒}$ 、T 1/2 = 5.5 時間	Rate Constant = $26.3 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 / \text{molecule} / \text{second}$, T 1/2 = 5.5 hours
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Meylan, W. M. and P. H. Howard (1992) Atmospheric Oxidation Program. Lewis Publishing Co., Boca Raton, FL	Meylan, W. M. and P. H. Howard (1992) Atmospheric Oxidation Program. Lewis Publishing Co., Boca Raton, FL
備考		

3.1.2. 水中安定性(加水分解性)
STABILITY IN WATER

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
GLP		
試験を行った年		
試験条件		
結果		
設定濃度		
実測濃度		
所定時間後の分解度(%)、pH、温度		
半減期		
分解生成物		
結論	データなし	No data
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考		

3.1.3. 土壌中安定性
STABILITY IN SOIL

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
GLP		
試験を行った年		
試験条件		
試験期間		
結果		
試験のタイプ		

放射性ラベル		
濃度		
土壌温度 °C		
土壌中pH		
土壌中湿度 (%)		
土壌のクラス		
粘土含量 (%)		
有機炭素 (%)		
陽イオン交換能		
微生物バイオマス濃度		
消失時間 (DT50、DT90)		
分解生成物		
時間ごとの消失率		
結論	データなし	No data
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考		

3.2. モニタリングデータ(環境)

MONITORING DATA (ENVIRONMENT)

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
測定タイプ(地点)		
媒体		
結果		
結論		
注釈	アメリカにおける14の高度工業化河川流域から収集された204サンプルのうち1サンプルで1ppb	1 ppb in 1 of 204 samples collected from 14 heavily industrialized river basins in the U.S.
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Ewing, B.B., et al. 1977. Monitoring to detect previously unrecognized pollutants in surface waters. Appendix, Organic Analysis Data, USEP 560/6-77-015, Washington, DC. (As cited in Hazardous Substance Data Base, on-line file, National Library of Medicine, 2002)	Ewing, B.B., et al. 1977. Monitoring to detect previously unrecognized pollutants in surface waters. Appendix, Organic Analysis Data, USEP 560/6-77-015, Washington, DC. (As cited in Hazardous Substance Data Base, on-line file, National Library of Medicine, 2002)
備考		

3.3. 移動と分配

TRANSPORT AND DISTRIBUTION

3.3.1 環境区分間の移動

TRANSPORT BETWEEN ENVIRONMENTAL COMPARTMENTS

TRANSPORT BETWEEN ENVIRONMENTAL COMPARTMENTS																																										
試験物質名																																										
CAS番号																																										
純度等																																										
注釈																																										
方法	EPIWIN 3.1, Mackay Level III Fugacity Model	EPIWIN 3.1, Mackay Level III Fugacity Model																																								
結果																																										
媒体																																										
環境分布予測と媒体中濃度 (levelIII/III)	<table><thead><tr><th></th><th>濃度 (%)</th><th>半減期 (hr)</th><th>排出量(kg/hr)</th></tr></thead><tbody><tr><td>大気</td><td>7.72</td><td>9.76</td><td>1000</td></tr><tr><td>水</td><td>64.8</td><td>360</td><td>1000</td></tr><tr><td>土壌</td><td>27.4</td><td>360</td><td>1000</td></tr><tr><td>底質</td><td>0.113</td><td>1440</td><td>0</td></tr></tbody></table> <p>残留性 115時間</p>		濃度 (%)	半減期 (hr)	排出量(kg/hr)	大気	7.72	9.76	1000	水	64.8	360	1000	土壌	27.4	360	1000	底質	0.113	1440	0	<table><thead><tr><th></th><th>Concentration(%)</th><th>Half-life(hr)</th><th>Emissions(kg/hr)</th></tr></thead><tbody><tr><td>AIR</td><td>7.72</td><td>9.76</td><td>1000</td></tr><tr><td>WATER</td><td>64.8</td><td>360</td><td>1000</td></tr><tr><td>SOIL</td><td>27.4</td><td>360</td><td>1000</td></tr><tr><td>SEDIMENT</td><td>0.113</td><td>1440</td><td>0</td></tr></tbody></table> <p>Persistence 115hr</p>		Concentration(%)	Half-life(hr)	Emissions(kg/hr)	AIR	7.72	9.76	1000	WATER	64.8	360	1000	SOIL	27.4	360	1000	SEDIMENT	0.113	1440	0
	濃度 (%)	半減期 (hr)	排出量(kg/hr)																																							
大気	7.72	9.76	1000																																							
水	64.8	360	1000																																							
土壌	27.4	360	1000																																							
底質	0.113	1440	0																																							
	Concentration(%)	Half-life(hr)	Emissions(kg/hr)																																							
AIR	7.72	9.76	1000																																							
WATER	64.8	360	1000																																							
SOIL	27.4	360	1000																																							
SEDIMENT	0.113	1440	0																																							
結論																																										
注釈	入力値: 水溶解度 = 89 g/L (25 °C); 沸点= 64.5°C; 融点 = -65.9°C; 蒸気圧 = 172 mm Hg (25 °C); ヘンリー則定数 0.00069 atm・m ³ /mole; Log Kow (推定) = 0.74 (25°C、KowWin プログラム Δ).	Input values were as follows: Water Solubility = 89 g/L at 25 °C; Boiling Point = 64.5 °C; Melting Point = -65.9°C; Vapor Pressure = 172 mm Hg at 25 °C; Henry' Law Constant 0.00069 atm・m ³ /mole; and predicted Log Kow = 0.74 at 25 °C (KowWin program).																																								
信頼性スコア																																										
信頼性の判断根拠																																										
出典																																										

引用文献	EPIWIN 3.10(2002年2月8日にプログラム計算実施)	EPIWIN 3.10 (program run on Feb. 8, 2002)
備考		

3.3.2 分配 DISTRIBUTION

3.4 好気性生分解性 AEROBIC BIODEGRADATION

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	タイプ:好気性、方法:OECD ガイドライン 302 B	Type: aerobic, Method: OECD Guideline 302 B
培養期間		
植種源	活性汚泥、工業地、非馴化	Activated Sludge, Industrial, Non-Adapted
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
試験物質濃度		
汚泥濃度		
培養温度 °C		
対照物質および濃度(mg/L)		
分解度測定方法		
分解度算出方法		
結果		
最終分解度(%) 日目	>95% (5日後)	>95% after 5 days
分解速度-1		
分解速度-2		
分解速度-3		
分解速度-4		
分解生成物		
上記結果以外の分解度測定方法		
及びその結果		
対象物質の7. 14日目の分解度		
その他		
結論		
注釈	“本質的生分解: 修正 Zahn-Wellens試験” 非生物学的分解率 < 10%	“Inherent biodegradability: Modified Zahn-Wellens Test”. Eliminierung durch nicht biologische Vorgaenge < 10%
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Hoechst AG (1979), unveroeffentlichte Untersuchung (RWL 26.02.79)	Hoechst AG (1979), unveroeffentlichte Untersuchung (RWL 26.02.79)
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	タイプ:好気性、方法: DIN 38409, Teil 51	Type: aerobic, Method: DIN 38409, Teil 51
培養期間		
植種源		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
試験物質濃度		
汚泥濃度		
培養温度 °C		
対照物質および濃度(mg/L)		
分解度測定方法		
分解度算出方法		
結果		
最終分解度(%) 日目	72% (5日後)	72% after 5 days
分解速度-1		
分解速度-2		
分解速度-3		
分解速度-4		
分解生成物		
上記結果以外の分解度測定方法		
及びその結果		
対象物質の7. 14日目の分解度		
その他		
結論		
注釈	BSBx-Bestimmung, DEV H5 DIN 38409, Teil 51, (ドイツにおいて標準的な方法による水質や排水における Schlammuntersuchung, Bestimmung des biochemischen Sauerstoffbedarfs)	BSBx-Bestimmung, DEV H5 DIN 38409, Teil 51, (Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- and Schlammuntersuchung, Bestimmung des biochemischen Sauerstoffbedarfs)
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	BASF AG (1977) Labor Oekologie; unveroeffentlichte untersuchung	BASF AG (1977) Labor Oekologie; unveroeffentlichte untersuchung

備考		
試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	タイプ:好気性、方法: MITI-試験 (THODのBOD)	Type: aerobic, Method: MITI-Test (BOD of THOD)
培養期間		
植種源	活性汚泥	Activated Sludge
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
試験物質濃度	試験物質濃度 = 100 mg/L	Concentration = 100 mg/L related to Test Substance.
汚泥濃度	汚泥濃度: 30 mg/L	Concentration of Sludge: 30 mg/L
培養温度 °C		
対照物質および濃度(mg/L)		
分解度測定方法		
分解度算出方法		
結果		
最終分解度(%) 日目	81% (14日後)	81% after 14 days
分解速度-1		
分解速度-2		
分解速度-3		
分解速度-4		
分解生成物		
上記結果以外の分解度測定方法及びその結果		
対象物質の7, 14日目の分解度		
その他		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on Japan, edited by Chemicals Inspection & Testing Institute Japan, Published by Japan Chemical Industry Ecology-Toxicology & Information Center, October 1992.	Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on Japan, edited by Chemicals Inspection & Testing Institute Japan, Published by Japan Chemical Industry Ecology-Toxicology & Information Center, October 1992.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	好気性、Warburgテスト(呼吸量測定器)	aerobic, Warburg-Test (Respirometer)
培養期間	24時間	24 hours
植種源	3箇所の污水处理場からの活性汚泥 (2500 mg/L 汚泥固形分)	Activated Sludge from Three Treatment Plants (2500 mg/L Sludge Solids)
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
試験物質濃度	500 mg/L (試験物質)	500 mg/L test substance concentration
汚泥濃度		
培養温度 °C	20°C	20°C
対照物質および濃度(mg/L)		
分解度測定方法		
分解度算出方法		
結果		
最終分解度(%) 日目	24.3% (24時間)	24.3% (24hours)
分解速度-1		
分解速度-2		
分解速度-3		
分解速度-4		
分解生成物		
上記結果以外の分解度測定方法及びその結果		
対象物質の7, 14日目の分解度		
その他		
結論	24.3% (20°C、24時間)	24.3% (20°C, 24hours)
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Gerhold, R. M., Malaney, G.W. (1966) Structural determinants in the oxidation of aliphatic compounds by activated sludge. Jour. Water Pollution Control Fed. 38, 562-579.	Gerhold, R. M., Malaney, G.W. (1966) Structural determinants in the oxidation of aliphatic compounds by activated sludge. Jour. Water Pollution Control Fed. 38, 562-579.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		

注釈		
方法	好気性	aerobic,
培養期間		
植種源	活性汚泥、未馴化	Activated Sludge, Non-adapted
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
試験物質濃度	400 mg/L (試験物質、定常試験、TOC)	400 mg/L Test Substance, Standversuch (TOC)
汚泥濃度		
培養温度 °C		
対照物質および濃度(mg/L)		
分解度測定方法		
分解度算出方法		
結果		
最終分解度(%) 日目	99% (13 日後)	99% after 13 days
分解速度-1		
分解速度-2		
分解速度-3		
分解速度-4		
分解生成物		
上記結果以外の分解度測定方法及びその結果		
対象物質の7, 14日目の分解度		
その他		
結論	99% (13 日後)	99% after 13 days
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	BASF AG (1976) Labor Oekologie; unveroeffentlichte untersuchung	BASF AG (1976) Labor Oekologie; unveroeffentlichte untersuchung
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	嫌気性	anaerobic
培養期間	144-240 時間	144-240 hours
植種源	消化汚泥	Digester Sludge
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
試験物質濃度	102 ppm	102 ppm
汚泥濃度		
培養温度 °C	39°C	39°C
対照物質および濃度(mg/L)		
分解度測定方法		
分解度算出方法		
結果		
最終分解度(%) 日目	71% (10日後)	71% after 10 days
分解速度-1		
分解速度-2		
分解速度-3		
分解速度-4		
分解生成物		
上記結果以外の分解度測定方法及びその結果		
対象物質の7, 14日目の分解度		
その他		
結論		
注釈	接触処理槽。流入水、放流水の分析、12サンプルの平均値。温度：摂氏39度。パラメータの種類：生物学的処理シミュレーション。分析方法：GC。試験物質濃度：102ppm。保持時間：144～240時間。	Contact digestion; influent, effluent analysis, average of 12 samples; 39 °C; parameter type: biolog treat. sim.; analysis method: GC; Chemical Concentration: 102 ppm; Retention Time: 144-240 hours
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Hovious, J.C., et al. (1972) "Anaerobic Treatment of Synthetic Organic Wastes", EPA 12020 DIS 01/72, USEPA, Washington, DC, p 202.	Hovious, J.C., et al. (1972) "Anaerobic Treatment of Synthetic Organic Wastes", EPA 12020 DIS 01/72, USEPA, Washington, DC, p 202.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	嫌気性	anaerobic

培養期間	240-2400 hours	240-2400 hours
植種源	消化汚泥	Digester Sludge
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件		
試験物質濃度	210 ppm	210 ppm
汚泥濃度		
培養温度 °C	15°C	15°C
対照物質および濃度(mg/L)		
分解度測定方法		
分解度算出方法		
結果		
最終分解度(%) 日目	76% (100日後)	76% after 100 days
分解速度-1		
分解速度-2		
分解速度-3		
分解速度-4		
分解生成物		
上記結果以外の分解度測定方法及びその結果		
対象物質の7, 14日目の分解度		
その他		
結論		
注釈	セミパイロット規模ラグーン。光合成。表面で好氣的過程が生じる。風および波の混合。熱によるターンオーバー。深度3フィート。流入水、放流水の分析。パラメータの種類: 生物学的処理サンプル。分析方法: C02、CH4 GC。保持時間: 240~2400時間。試験物質濃度: 210ppm。温度: 摂氏15°C。	Semi-pilot lagoon; Photosynthesis; aerobic process occur at surface; Wind and wave mixing; Thermal turn overs; 3 foot depth; Influent, effluent analysis; Parameter type: biological treatment Sam.; Analysis method: C02, CH 4 GC; Retention Time: 240-2400 hours; Chemical Concentration: 210ppm; 15 °C
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Hovious, J.C., et al. (1972) "Anaerobic Treatment of Synthetic Organic Wastes", EPA 12020 DIS 01/72, USEPA, Washington, DC,p. 202.	Hovious, J.C., et al. (1972) "Anaerobic Treatment of Synthetic Organic Wastes", EPA 12020 DIS 01/72, USEPA, Washington, DC,p. 202.
備考		

3.5. BOD-5、CODまたはBOD-5／COD比
BOD-5、COD OR RATIO BOD-5/COD

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
BOD5の算出方法		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
試験条件	好気性、排水処理	aerobic, Waste Water Treatment
結果		
濃度		
結果 mgO ₂ /L	ThOD の66%分解 CODの72%分解	66% of ThOD 72% of COD
BOD/COD比		
その他		
結論		
注釈		
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Verschuere, K. (1996) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd ed. pp. 1154-1155.	Verschuere, K. (1996) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd ed. pp. 1154-1155.
備考		

3.6 生物濃縮性
BIOACCUMULATION

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法	EPIWIN 3.10, BCFWIN v2.14	EPIWIN 3.10, BCFWIN v2.14
生物種		
暴露期間 (日)		
曝露濃度		
排泄期間		
GLP		
試験を行った年		
分析方法		
試験条件		
被験物質溶液		
対照物質		
対照物質名及び分析方法		
試験方式／実施		

結果		
死亡率／行動		
脂質含有量 (%)		
試験中の被験物質濃度		
濃縮係数 (BCF)	推定 log BCF = 0.5	Predicted log BCF = 0.5
取込／排泄定数		
排泄時間		
代謝物		
その他の観察		
結論		
注釈	log Kow = 0.74 (25 °C、分子量 = 72.11、水溶解度(25°C) = 8.9×10^{-4} mg/L)からの推定	Estimated from log Kow of 0.74 at 25 °C, MW = 72.11, Water sol. = 8.9×10^{-4} mg/L at 25 °C.
信頼性スコア		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	EPIWIN 3.10 (2002年2月8日にプログラム計算実施)	EPIWIN 3.10 (program run on Feb. 8, 2002)
備考		

項目名	和訳結果(EU-RAR)	原文(EU-RAR)
-----	--------------	------------

4-1 魚への急性毒性
ACUTE TOXICITY TO FISH

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性		
方法		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
魚種、系統、供給者	<i>Poecilia reticulata</i> (グッピー)	<i>Poecilia reticulata</i> (guppy)
エンドポイント		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
結果の統計解析手法		
試験条件		
試験魚の月齢、体長、体重		
試験用水量あたりの魚体重		
参照物質での感受性試験結果		
じゅん化条件		
希釈水源		
希釈水の化学的性質		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
暴露容器		
暴露期間		
試験方式	半止水	semi-static
換水率/換水頻度		
連数、1連当たりの魚数		
影響が観察された少なくとも1濃度区及び対照区における水質		
試験温度範囲		
照明の状態		
平均測定濃度の計算方法		
結果		
設定濃度		
実測濃度		
生物学的影響観察		
累積死亡率の表		
統計的結果		
注釈		
対照区における死亡率		
異常反応		
その他の観察結果		
結論		
結果(96h-LC50)	LC50 = 27 mg/L (14日間)	LC50 = 27 mg/L (14-day)
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Deneer, J. W., Seinen, W. and J. L. M. Hermens (1988) The acute toxicity of aldehydes to the guppy. Aqu. Tox. 12:185-192.	Deneer, J. W., Seinen, W. and J. L. M. Hermens (1988) The acute toxicity of aldehydes to the guppy. Aqu. Tox. 12:185-192.
備考	log LC50 = 2.57(LC50の単位は umoles/L)	log LC50 = 2.57 when LC50 in units of umoles/liter

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性		
方法		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
魚種、系統、供給者	<i>Pimephales promelas</i> (ファットヘッドミノー)	<i>Pimephales promelas</i> (fathead minnow)
エンドポイント		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
結果の統計解析手法		
試験条件		
試験魚の月齢、体長、体重		
試験用水量あたりの魚体重		
参照物質での感受性試験結果		
じゅん化条件		
希釈水源		
希釈水の化学的性質		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
暴露容器		
暴露期間		
試験方式	止水	static
換水率/換水頻度		
連数、1連当たりの魚数		
影響が観察された少なくとも1濃度区及び対照区における水質		
試験温度範囲		
照明の状態		
平均測定濃度の計算方法		
結果		

設定濃度		
実測濃度		
生物学的影響観察		
累積死亡率の表		
統計的結果		
注釈		
対照区における死亡率		
異常反応		
その他の観察結果		
結論		
結果 (96h-LC50)	LC50 = 51 mg/l (24時間); 24 mg/l (48時間); 23 mg/l (96時間).	LC50 = 51 mg/l (24 hr); 24 mg/l (48 hr); 23 mg/l (96 hr).
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Waggy, G. T. and J. R. Payne (1974) "Environmental Impact Analysis -Acute Aquatic Toxicity Testing", Project Report 910F44, Union Carbide Corporation, South Charleston Technical Center, South Charleston, WV.	Waggy, G. T. and J. R. Payne (1974) "Environmental Impact Analysis -Acute Aquatic Toxicity Testing", Project Report 910F44, Union Carbide Corporation, South Charleston Technical Center, South Charleston, WV.
備考		

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性		
方法	DIN 38412 part 15	DIN 38412 part 15
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
魚種、系統、供給者	<i>Leuciscus idus</i> (魚類、淡水)	<i>Leuciscus idus</i> (fish, fresh water)
エンドポイント		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
結果の統計解析手法		
試験条件		
試験魚の月齢、体長、体重		
試験用水量あたりの魚体重		
参照物質での感受性試験結果		
じゅん化条件		
希釈水源		
希釈水の化学的性質		
試験溶液 (及び保存溶液) とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
暴露容器		
暴露期間	48時間暴露	48-hr exposure
試験方式	止水	static
換水率/換水頻度		
連数、1連当たりの魚数		
影響が観察された少なくとも1濃度区及び対照区における水質		
試験温度範囲		
照明の状態		
平均測定濃度の計算方法		
結果		
設定濃度		
実測濃度		
生物学的影響観察		
累積死亡率の表		
統計的結果		
注釈		
対照区における死亡率		
異常反応		
その他の観察結果		
結論		
結果 (96h-LC50)	LC50 = 86 mg/L	LC50 = 86 mg/L
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Huels Study (unpublished) zitiert im Schr. der Huels AG vom 27.04.1994.	Huels Study (unpublished) zitiert im Schr. der Huels AG vom 27.04.1994.
備考		

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性		
方法	EPIWIN 3.10, ECOSAR v.0.99g	EPIWIN 3.10, ECOSAR v.0.99g
GLP		
試験を行った年		
魚種、系統、供給者		
エンドポイント		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
結果の統計解析手法		
試験条件		
試験魚の月齢、体長、体重		

試験用水量あたりの魚体重		
参照物質での感受性試験結果		
じゅん化条件		
希釈水源		
希釈水の化学的性質		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
暴露容器		
暴露期間		
試験方式		
換水率/換水頻度		
連数、1連当たりの魚数		
影響が観察された少なくとも1濃度区及び対照区における水質		
試験温度範囲		
照明の状態		
平均測定濃度の計算方法		
結果		
設定濃度		
実測濃度		
生物学的影響観察		
累積死亡率の表		
統計的結果		
注釈		
対照区における死亡率		
異常反応		
その他の観察結果		
結論		
結果(96h-LC50)	96時間 LC50 = 15.0 mg/L	96 hr LC50 = 15.0 mg/L
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	EPIWIN 3.10 (2002年2月8日に計算)	EPIWIN 3.10 (program run on Feb. 8, 2002)
備考	アルデヒドのSARs (生態毒性クラス アルデヒド C-4)に基づく。 log Kow=0.74 (25 °C)、分子量= 72.11、水溶解度 = 8.9×10^4 mg/L (25 °C) からの推定。	Based on aldehyde SARs (ecotoxicity class aldehyde C-4). Estimated from log Kow of 0.74 at 25 °C, MW = 72.11, Water sol. = 8.9×10^4 mg/L at 25 °C.

4-2 水生無脊椎動物への急性毒性(例えばミジンコ)

ACUTE TOXICITY TO AQUATIC INVERTEBRATES (DAPHNIA)

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性		
方法	EC Directive 84/449/EEC, C.2 “ミジンコの急性毒性”	EC Directive 84/449/EEC, C.2 “Acute Toxicity for Daphnia”
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
生物種、系統、供給者	<i>Daphnia magna</i> Strauss	<i>Daphnia magna</i> Strauss
エンドポイント		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
結果の統計解析手法		
試験条件		
試験生物の起源、前処理、繁殖方法		
参照物質での感受性試験結果		
試験開始時の時間齢		
希釈水源		
希釈水の化学的性質		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
暴露容器		
暴露期間		
試験方式		
連数、1連当たりの試験生物数		
対照区と影響が観察された少なくとも1濃度区における水質		
試験温度範囲		
照明の状態		
平均測定濃度の計算方法		
結果		
設定濃度		
実測濃度		
遊泳阻害数		
累積遊泳阻害数の表		
注釈		
対照区における反応は妥当か		
対照区における反応の妥当性の考察		
結論		
結果(48h-EC50)	EC0 (24時間) = 125 mg/L EC50 (24時間) = 308 mg/L EC100 (24時間) = 500 mg/L	EC0 (24 hr) = 125 mg/L EC50 (24 hr) = 308 mg/L EC100 (24 hr) = 500 mg/L
信頼性スコア		

キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	BASF AG, Ecology Laboratory Project Report No. 0080/88 (未発表データ)	BASF AG, Ecology Laboratory Project Report No. 0080/88 (unpublished data)
備考		

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性		
方法	EC Directive 84/449/EEC, C.2 "Acute Toxicity for Daphnia"	EC Directive 84/449/EEC, C.2 "Acute Toxicity for Daphnia"
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
生物種、系統、供給者	<i>Daphnia magna Strauss</i>	<i>Daphnia magna Strauss</i>
エンドポイント		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
結果の統計解析手法		
試験条件		
試験生物の起源、前処理、繁殖方法		
参照物質での感受性試験結果		
試験開始時の時間齢		
希釈水源		
希釈水の化学的性質		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
暴露容器		
暴露期間		
試験方式		
連数、1連当たりの試験生物数		
対照区と影響が観察された少なくとも1濃度区における水質		
試験温度範囲		
照明の状態		
平均測定濃度の計算方法		
結果		
設定濃度		
実測濃度		
遊泳阻害数		
累積遊泳阻害数の表		
注釈		
対照区における反応は妥当か		
対照区における反応の妥当性の考察		
結論		
結果(48h-EC50)	EC0 (48時間) = 125 mg/L EC50 (48時間) = 277 mg/L EC100 (48時間) = 500 mg/L	EC0 (48 hr) = 125 mg/L EC50 (48 hr) = 277 mg/L EC100 (48 hr) = 500 mg/L
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	BASF AG, Ecology Laboratory Project Report No. 0080/88 (未発表データ)	BASF AG, Ecology Laboratory Project Report No. 0080/88 (unpublished data)
備考		

試験物質	イソバレルアルデヒド	Isovaleraldehyde
同一性		
方法	EC Directive 79/831 EEC Annex V C.2.	EC Directive 79/831 EEC Annex V C.2.
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
生物種、系統、供給者	<i>Daphnia magna Strauss</i>	<i>Daphnia magna Strauss</i>
エンドポイント		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
結果の統計解析手法		
試験条件		
試験生物の起源、前処理、繁殖方法		
参照物質での感受性試験結果		
試験開始時の時間齢		
希釈水源		
希釈水の化学的性質		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
暴露容器		
暴露期間		
試験方式		
連数、1連当たりの試験生物数		

対照区と影響が観察された少なくとも1濃度区における水質		
試験温度範囲		
照明の状態		
平均測定濃度の計算方法		
結果		
設定濃度		
実測濃度		
遊泳阻害数		
累積遊泳阻害数の表		
注釈		
対照区における反応は妥当か		
対照区における反応の妥当性の考察		
結論		
結果(48h-EC50)	EC0 (24/48時間) = 125/125 mg/L EC50 (24/48時間) = 210/180 mg/L	EC0 (24/48 hr) = 125/125 mg/L EC50 (24/48 hr) = 210/180 mg/L
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	BASF AG, Ecology Laboratory Project Report No. 1023/88 (未発表データ)	BASF AG, Ecology Laboratory Project Report No. 1023/88 (unpublished data)
備考	イソパレルアルデヒドの生態毒性試験結果は、構造活性の考察を基に、イソブチルアルデヒドに適用できると考えられる。	Results of ecotoxicity studies on isovaleraldehyde should be considered applicable to isobutyraldehyde based on structure activity considerations.

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性		
方法	EPIWIN 3.10, ECOSAR v. 0.99g	EPIWIN 3.10, ECOSAR v. 0.99g
GLP		
試験を行った年		
生物種、系統、供給者		
エンドポイント		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
結果の統計解析手法		
試験条件		
試験生物の起源、前処理、繁殖方法		
参照物質での感受性試験結果		
試験開始時の時間齢		
希釈水源		
希釈水の化学的性質		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
暴露容器		
暴露期間		
試験方式		
連数、1連当たりの試験生物数		
対照区と影響が観察された少なくとも1濃度区における水質		
試験温度範囲		
照明の状態		
平均測定濃度の計算方法		
結果		
設定濃度		
実測濃度		
遊泳阻害数		
累積遊泳阻害数の表		
注釈		
対照区における反応は妥当か		
対照区における反応の妥当性の考察		
結論		
結果(48h-EC50)	48時間 LC50 = 22 mg/L	48-hr LC50 = 22 mg/L
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	EPIWIN 3.10 (2002年2月8日にプログラム計算実施)	EPIWIN 3.10 (program run on Feb. 8, 2002)
備考	アルデヒドのSARs (生態毒性クラス アルデヒド C-4)に基づく。 log Kow=0.74 (25 °C)、分子量= 72.11、水溶解度= 8.9×10^4 mg/L (25 °C) から推定。	Based on aldehyde SARs (ecotoxicity class aldehyde C-4). Estimated from log Kow of 0.74 at 25 °C, MW = 72.11, Water sol. = 8.9×10^4 mg/L at 25 °C.

4-3 水生植物への毒性(例えば藻類)
TOXICITY TO AQUATIC PLANTS e. g. ALGAE

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性	工業用グレードの試験物質	Technical Grade Test Substance

方法	Scenedesmus-Zellvermehrungs-Hemmtest, DIN 38412 Teil 9 Bestimmung der Hemmwirkung von Wasserinhaltsstoffen auf Gruenalgen	Scenedesmus-Zellvermehrungs-Hemmtest, DIN 38412 Teil 9 Bestimmung der Hemmwirkung von Wasserinhaltsstoffen auf Gruenalgen
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
生物種、系統、供給者	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	<i>Scenedesmus subspicatus</i>
エンドポイント		
毒性値算出に用いたデータの種類		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
結果の統計解析手法		
試験条件		
試験施設での藻類継代培養方法		
藻類の前培養の方法及び状況		
参照物質での感受性試験結果		
希釈水源		
培地の化学的性質		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
暴露容器		
暴露期間		
試験方式		
連数		
各濃度区の少なくとも1連における試験開始時と終了時の水質		
試験温度範囲		
照明の状態		
平均測定濃度の計算方法		
結果		
設定濃度		
実測濃度		
細胞密度		
生長阻害率(%)		
各濃度区における生長曲線		
その他観察結果		
注釈		
対照区での生長は妥当か		
対照区における反応の妥当性の考察		
結論		
結果(ErC50)	EC20 (72時間) = 51 mg/L EC50 (72時間) = 84 mg/L EC90 (72時間) = 147 mg/L	EC20 (72 hr) = 51 mg/L EC50 (72 hr) = 84 mg/L EC90 (72 hr) = 147 mg/L
結果(NOEC)		
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	BASF AG, Ecology Laboratory Project Report No. 1012/88 (未発表データ)	BASF AG, Ecology Laboratory Project Report No. 1012/88 (unpublished data)
備考		

試験物質	イソバレラルデヒド	Isovaleraldehyde
同一性		
方法	DIN 38412 L9	DIN 38412 L9
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
生物種、系統、供給者	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	<i>Scenedesmus subspicatus</i>
エンドポイント		
毒性値算出に用いたデータの種類		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
結果の統計解析手法		
試験条件		
試験施設での藻類継代培養方法		
藻類の前培養の方法及び状況		
参照物質での感受性試験結果		
希釈水源		
培地の化学的性質		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
暴露容器		
暴露期間		
試験方式		
連数		
各濃度区の少なくとも1連における試験開始時と終了時の水質		
試験温度範囲		
照明の状態		
平均測定濃度の計算方法		
結果		

設定濃度		
実測濃度		
細胞密度		
生長阻害率(%)		
各濃度区における生長曲線		
その他観察結果		
注釈		
対照区での生長は妥当か		
対照区における反応の妥当性の考察		
結論		
結果(ErC50)	EC0 (72/96時間) = 33 / 38 mg/L EC50 (72/96時間) = 80 / 78 mg/L	EC0 (72/96 hr) = 33 / 38 mg/L EC50 (72/96 hr) = 80 / 78 mg/L
結果(NOEC)		
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	BASF AG, Ecology Laboratory (1988)(未発表データ)	BASF AG, Ecology Laboratory (1988) (unpublished data)
備考	イソバレルアルデヒドとイソブチルアルデヒドの構造活性の考察に基づき、イソバレルアルデヒドの生態毒性試験結果はイソブチルアルデヒドに適用可能であると考えられる。	Results of ecotoxicity studies on isovaleraldehyde should be considered applicable to isobutyraldehyde based on structure activity considerations

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性		
方法	EPIWIN 3.10, ECOSAR v.0.99g	EPIWIN 3.10, ECOSAR v.0.99g
GLP		
試験を行った年		
生物種、系統、供給者		
エンドポイント		
毒性値算出に用いたデータの種類		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
結果の統計解析手法		
試験条件		
試験施設での藻類継代培養方法		
藻類の前培養の方法及び状況		
参照物質での感受性試験結果		
希釈水源		
培地の化学的性質		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
暴露容器		
暴露期間		
試験方式		
連数		
各濃度区の少なくとも1連における試験開始時と終了時の水質		
試験温度範囲		
照明の状態		
平均測定濃度の計算方法		
結果		
設定濃度		
実測濃度		
細胞密度		
生長阻害率(%)		
各濃度区における生長曲線		
その他観察結果		
注釈		
対照区での生長は妥当か		
対照区における反応の妥当性の考察		
結論		
結果(ErC50)	藻類 96時間 EC50 = 467 mg/L 藻類長期毒性値 = 22.5 mg/L	Algal 96 hr EC50 = 467 mg/L Algal chronic value = 22.5 mg/L
結果(NOEC)		
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	EPIWIN 3.10 (2002年2月8日にプログラム計算実施)	EPIWIN 3.10 (program run on Feb. 8, 2002)
備考	アルデヒド安全性分析報告書(SAR)(生態毒性クラスアルデヒドC-4)に基づく。25度でのオクタノール／水分配係数(log Kow) 0.74、分子量 = 72.11、水溶度= 8.9 x 10 ⁴ mg/L(25度)を用いた推定。	Based on aldehyde SARs (ecotoxicity class aldehyde C-4). Estimated from log Kow of 0.74 at 25 °C, MW = 72.11, Water sol. = 8.9 x 10 ⁴ mg/L at 25 °C.

4-4 微生物への毒性(例えばバクテリア)

TOXICITY TO MICROORGANISMS e. g. BACTERIA

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性	工業用グレード	Technical Grade

方法	DIN 38412 Teil 8	DIN 38412 Teil 8
試験の種類		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
生物種	<i>Pseudomonas putida</i>	<i>Pseudomonas putida</i>
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
暴露期間		
試験条件		
結果		
毒性値		
注釈		
結論		
結果(EC50等)	EC10 = 337 mg/L EC50 = 468 mg/L EC90 = 599 mg/L	EC10 = 337 mg/L EC50 = 468 mg/L EC90 = 599 mg/L
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	BASF AG, Ecology Laboratory Project Report No. 1012/88, (1988) (未発表データ)	BASF AG, Ecology Laboratory Project Report No. 1012/88, (1988) (unpublished data)
備考		

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性		
方法	ETAD Gaerroebrchentest "Bestimmung der Schadwirkung gegen Abwasserbakterien nach dem Gaerroebrchentest"	ETAD Gaerroebrchentest "Bestimmung der Schadwirkung gegen Abwasserbakterien nach dem Gaerroebrchentest"
試験の種類		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
生物種	その他のバクテリア: Belebtschlamm aus kommunalen	Other bacteria: Belebtschlamm aus kommunalen Abwaessern
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
暴露期間		
試験条件		
結果		
毒性値		
注釈		
結論		
結果(EC50等)	毒性閾値 = 500 mg/L	Schaedlichkeitsgrenze = 500 mg/L
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Hoechst AG, (9179) unveroeffentlichte Untersuchung (RWL 26.02.79)	Hoechst AG, (9179) unveroeffentlichte Untersuchung (RWL 26.02.79)
備考		

試験物質	イソバレルアルデヒド	Isovaleraldehyde
同一性		
方法	DIN 38412 L 8	DIN 38412 L 8
試験の種類		
GLP	いいえ	NO
試験を行った年		
生物種	<i>Pseudomonas putida</i>	<i>Pseudomonas putida</i>
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
暴露期間		
試験条件		
結果		
毒性値		
注釈		
結論		
結果(EC50等)	EC0 = 310 mg/L	EC0 = 310 mg/L
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	BASF AG, Ecology Laboratory Project Report No. 330168, (1988) (未発表データ)	BASF AG, Ecology Laboratory Project Report No. 330168, (1988) (unpub. data)
備考	イソバレルアルデヒドとイソブチルアルデヒドの構造活性の考察に基づき、イソバレルアルデヒドの微生物学的試験結果はイソブチルアルデヒドに適用可能であると考えられる。	Results of microbiological studies on isovaleraldehyde should be considered applicable to isobutyraldehyde based on structure activity considerations

4-5 水生生物への慢性毒性
CHRONIC TOXICITY TO AQUATIC ORGANISMS

A. 魚への慢性毒性
CHRONIC TOXICITY TO FISH

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性		
方法	EPIWIN 3.10, ECOSAR v.0.99g	EPIWIN 3.10, ECOSAR v.0.99g
GLP		
試験を行った年		
魚種、系統、供給者		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
エンドポイント		
結果の統計解析手法		
試験条件		
試験魚の月齢、体長、体重		
餌の種類、給餌量、給餌頻度		
孵化後の移動までの時間		
最初の給餌までの時間		
試験開始2週間前までの疾病対策のための処理		
胚と仔魚の取扱方法		
暴露チャンバーの材質など		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
試験溶液の調製方法		
希釈水源		
希釈水の化学的性質		
暴露期間		
その他		
測定項目、測定に伴うサンプル採取時期、サンプリング間隔、手順		
試験方式		
結果		
用量設定試験の実施の有無		
用量設定試験結果		
設定濃度		
実測濃度		
影響(対照区含む)		
胚、仔魚、稚魚の各成長段階及び全体における死亡/生存データ		
孵化の開始時間及び終了時間		
各日の孵化した仔魚数		
生存個体の体長/体重		
奇形の発症した仔魚数		
異常行動を示す魚数		
その他の影響		
注釈	慢性毒性値 = 3.5 mg/L	Chronic value = 3.5 mg/L
結論		
EC50		
NOEC、LOEC		
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	EPIWIN 3.10 (2002年2月8日にプログラム計算実施)	EPIWIN 3.10 (program run on Feb. 8, 2002)
備考	アルデヒドSAR(生態毒性クラスアルデヒドC-4)に基づく。25度でのlog Kow 0.74、分子量 = 72.11、水溶度= 8.9×10^4 mg/L (25度)からの推定。	Based on aldehyde SARs (ecotoxicity class aldehyde C-4). Estimated from log Kow of 0.74 at 25 °C, MW = 72.11, Water sol. = 8.9×10^4 mg/L at 25 °C.

B. 水生無脊椎動物への慢性毒性
CHRONIC TOXICITY TO AQUATIC INVERTEBRATES

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性		
方法		
GLP		
試験を行った年		
試験生物種		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
エンドポイント		
結果の統計解析手法		
試験条件		
助剤使用の有無		
助剤の種類、濃度、助剤対照区の有無		
試験温度		
pH		
硬度		
試験生物の情報		
希釈水源		
希釈水の化学的性質		
試験溶液(及び保存溶液)とその調製法		
試験物質の溶液中での安定性		
溶解助剤/溶剤の種類とその濃度		
暴露期間		
暴露容器		
連数、1連当たりの試験生物数		
照明		

対照区と影響が観察された少なくとも1濃度区における水質		
平均測定濃度の計算方法		
結果		
設定濃度		
実測濃度		
実測濃度の詳細		
累積遊泳阻害数		
累積産仔数		
対照区における反応は妥当か		
生理的影響		
試験の妥当性		
注釈		
結論		
結果(EC50)		
結果(NOEC, LOEC)		
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考	データなし	No data submitted

4-6 陸生生物への毒性

TOXICITY TO TERRESTRIAL ORGANISMS

A. 陸生植物への毒性

TOXICITY TO TERRESTRIAL PLANTS

試験物質		
同一性		
方法		
試験の種類		
GLP		
試験を行った年		
種		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
エンドポイント		
暴露期間		
試験条件		
結果		
毒性値		
注釈		
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考	データなし	No data submitted

B. 土壌生物への毒性

TOXICITY TO SOIL DWELLING ORGANISMS

試験物質		
同一性		
方法		
試験の種類		
GLP		
試験を行った年		
種		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
エンドポイント		
暴露期間		
試験条件		
結果		
毒性値		
注釈		
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考	データなし	No data submitted

C. 他の非哺乳類陸生種(鳥類を含む)への毒性

TOXICITY TO OTHER NON-MAMMALIAN TERRESTRIAL SPECIES (INCLUDING AVIAN)

試験物質		
同一性		
方法		
試験の種類		
GLP		
試験を行った年		
種		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
エンドポイント		
暴露期間		
試験条件		
結果		
毒性値		

注釈		
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考	データなし	No data submitted

4-6-1底生生物への毒性

TOXICITY TO SEDIMENT DWELLING ORGANISMS

試験物質		
同一性		
方法		
試験の種類		
試験物質の添加方法		
GLP		
試験を行った年		
種		
試験物質の分析の有無		
試験物質の分析方法		
エンドポイント		
暴露期間		
試験条件		
試験生物の情報		
参照物質における試験結果		
給餌に関する情報		
底質源		
底質の性質		
水源		
水質		
連数、1連当たりの試験生物数		
試験物質の底質又は上層水への添加方法、平衡させるための期間及び条件		
助剤使用の有無		
助剤の種類、濃度、助剤対照区の有無		
暴露容器		
平均測定濃度の計算方法		
試験水の水温、pH、DOの範囲		
結果		
設定濃度		
実測濃度		
実測濃度の詳細		
毒性値		
試験期間中の試験物質の安定性		
結果の統計解析手法、p値、95%信頼限界、関連する文献		
観察結果		
対照区の結果、有効性基準が満たされているか否か		
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考	データなし	No data submitted

4-7 生物学的影響モニタリング(食物連鎖による蓄積を含む)

BIOLOGICAL EFFECTS MONITORING (INCLUDING BIOMAGNIFICATION)

試験物質		
同一性		
方法		
試験される種又はエコシステム		
観察される影響		
試験を行った年		
試験条件		
結果		
結論		
試験物質の分析		
環境条件に関する情報		
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考	データなし	No data submitted

4-8 生体内物質変換と動態

BIOTRANSFORMATION AND KINETICS

試験物質		
同一性		
方法		
試験を行った年		
試験生物のタイプ		
試験条件		
結果		
結論		
注釈		
信頼性スコア		

キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献		
備考	データなし	No data submitted

4-9 追加情報

ADDITIONAL INFORMATION

試験物質	イソブタナール	Isobutanol
同一性		
方法	<p>生物種: <i>Aedes aegypti</i> larvae (蚊)</p> <p>試験のタイプ: 止水</p> <p>GLP: いいえ</p> <p>コメント: 試験物質は試薬グレード以上の製品であった。使用した濃度の詳細は記載されていない。4時間後の死亡率と、この値は3件の別に実施された3件の実験での平均値において±10%以内であることを示している。</p>	<p>Test species: <i>Aedes aegypti</i> larvae (mosquito)</p> <p>Type of test: static</p> <p>GLP: NO</p> <p>Comments: Test substance reagent grade or better. No details given as to concentrations used. Percentage death determined after 4 hours and the value represents the average of three separate experiments agreeing within +/- 10%.</p>
結果		
結論	LC50 = 0.25% (v/v)	LC50 = 0.25% (v/v)
信頼性スコア		
キースタディ		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献	Kramer, V. C., Schnell, D. J. and K. W. Nickerson (1983) Relative toxicity of organic solvents to <i>Aedes aegypti</i> larvae. J. Invert. Path. 42:285-287.	Kramer, V. C., Schnell, D. J. and K. W. Nickerson (1983) Relative toxicity of organic solvents to <i>Aedes aegypti</i> larvae. J. Invert. Path. 42:285-287.
備考		

項目名	和訳結果(EU-RAR)	原文(EU-RAR)
-----	--------------	------------

5-1 トキシコキネティクス、代謝、分布
TOXICOKINETICS, METABOLISM, and DISTRIBUTION

5-2 急性毒性
ACUTE TOXICITY

A. 急性経口毒性
ACUTE ORAL TOXICITY

B. 急性吸入毒性
ACUTE INHALATION TOXICITY

C. 急性経皮毒性
ACUTE DERMAL TOXICITY

試験物質名	Isobutanal	Isobutanal
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	強制経口	Gavage
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
試験系(種／系統)	Carworth Wistar 雌ラット、体重範囲 90-120 g	Carworth Wistar female rats 90-120 g in weight.
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
観察期間(日)		
その他の試験条件	投与: 20% 水分散剤として非絶食のラットに投与、群: 5匹/用量、投与用量: 2.0、3.98、及び 7.95 g/kg 体重.	Administered to non-fasted rats as a 20% aqueous dispersion; groups of 5 rats per dose; dose levels administered were 2.0, 3.98, and 7.95 g/kg body weight.
統計学的処理		
結果		
各用量群での死亡数		
臨床所見		
剖検所見		
その他		
結論		
LD50値又はLC50値	経口 LD50 = 3.73 g/kg (95% 信頼区間 2.7-5.2 g/kg)	Oral LD50 = 3.73 g/kg (95% confidence interval 2.7-5.2 g/kg)
雌雄のLD50値又はLC50値の違い等		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Union Carbide Corporation, Mellon Institute of Industrial Research Report 15-55 dated June 30, 1952.	Union Carbide Corporation, Mellon Institute of Industrial Research Report 15-55 dated June 30, 1952.
備考		

A. 急性経口毒性
ACUTE ORAL TOXICITY

試験物質名	イソブタナール	Isobutanal
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	強制経口	Gavage
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
試験系(種／系統)	ラット	Rat
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
観察期間(日)		
その他の試験条件		
統計学的処理		
結果		
各用量群での死亡数		
臨床所見		
剖検所見		
その他		

結論		
LD50値又はLC50値	経口 LD50 = 1.6 ~ 3.7 g/kg	Oral LD50 = 1.6 to 3.7 g/kg
雌雄のLD50値又はLC50値の違い等		
注釈	コメント:腹腔内投与 LD50 - 1.6 から 3.2 g/kg (ラット)	Comments: IP LD50 - 1.6 to 3.2 g/kg in the rat.
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Brabec, M. J. (1981) " Aldehydes and Acetals". in Patty's Industrial Hygiene and Toxicology, 3rd rev. ed., vol. 2A, chapter 37, Clayton, G. D. and F. E. Clayton (eds). John Wiley & Sons, New York. p. 2643.	Brabec, M. J. (1981) " Aldehydes and Acetals". in Patty's Industrial Hygiene and Toxicology, 3rd rev. ed., vol. 2A, chapter 37, Clayton, G. D. and F. E. Clayton (eds). John Wiley & Sons, New York. p. 2643.
備考		

B. 急性吸入毒性
ACUTE INHALATION TOXICITY

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	全身暴露	Whole body exposure
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
試験系(種／系統)	ラット/ Carworth Wistar	Rat/ Carworth Wistar
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
観察期間(日)		
その他の試験条件		
統計学的処理		
結果		
各用量群での死亡数		
臨床所見		
剖検所見		
その他	ラットへの実質的に飽和した蒸気の暴露では15分では死亡がみられず、20分で6匹中4匹が死亡した。 ラットへの16000ppm(測定濃度)の4時間暴露では6匹中6匹が死亡し、8000 ppm(測定濃度)では6匹中1匹が死亡した。	Dynamically generated substantially saturated vapor killed 0 of 6 rats in 15 minutes, and 4 of 6 rats in 20 minutes. Exposure to a measured concentration of 16,000 ppm for 4 hours killed 6 of 6 rats, 8,000 ppm killed 1 of 6 rats.
結論		
LD50値又はLC50値		
雌雄のLD50値又はLC50値の違い等		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Union Carbide Corporation, Mellon Institute of Industrial Research Report 15-55 dated June 30, 1952.	Union Carbide Corporation, Mellon Institute of Industrial Research Report 15-55 dated June 30, 1952.
備考		

B. 急性吸入毒性
ACUTE INHALATION TOXICITY

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	Alarie, Y. (1966) Arch. Environ. Health 13:433-449.	Alarie, Y. (1966) Arch. Environ. Health 13:433-449.
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
試験系(種／系統)	B6C3F1 & Swiss-Webster マウス	B6C3F1 & Swiss-Webster mice
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
観察期間(日)		
その他の試験条件		
統計学的処理		
結果		
各用量群での死亡数		
臨床所見		

剖検所見		
その他	呼吸率の50%減少 (RD50) に必要な蒸気濃度は、B6C3F1 マウスでは 3016 ppm (95% 信頼区間 2568 ~ 3610 ppm)、Swiss-Webster マウスでは4167 ppm (95% 信頼区間 3258 ~ 5671 ppm)であった。	The vapor concentration required to elicit a 50% decrease in respiratory rate (RD50) of B6C3F1 mice was 3016 ppm (95% confidence interval 2568 to 3610 ppm), and in Swiss-Webster mice was 4167 ppm (95% confidence interval 3258 to 5671 ppm).
結論		
LD50値又はLC50値		
雌雄のLD50値又はLC50値の違い等		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Steinhagen, W. H. and C. S. Barrow (1984) Sensory irritation structureactivity study of inhaled aldehydes in B6C3F1 and Swiss-Webster mice. Toxicol. Appl. Pharmacol. 72:495-503.	Steinhagen, W. H. and C. S. Barrow (1984) Sensory irritation structureactivity study of inhaled aldehydes in B6C3F1 and Swiss-Webster mice. Toxicol. Appl. Pharmacol. 72:495-503.
備考		

C. 急性経皮毒性
ACUTE DERMAL TOXICITY

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	24時間閉塞皮膚適用.	24-hr occluded skin contact.
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
試験系(種／系統)	雄、ニュージーランドウサギ、3 から 5 ヶ月齢	Male New Zealand rabbits 3 to 5 months in age.
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
観察期間(日)		
その他の試験条件		
統計学的処理		
結果		
各用量群での死亡数		
臨床所見		
剖検所見		
その他		
結論		
LD50値又はLC50値	経皮 LD50 = 約 7.1 mL/kg	Percutaneous LD50 = approximately 7.1 mL/kg
雌雄のLD50値又はLC50値の違い等		
注釈	コメント: 死亡したラットでは肺の充血及び出血と適用部位の紅斑、浮腫、壊死がみられた。おおよそのLD50は10 g/kgでの死亡率4/5と5 g/kgでの死亡率2/5に基づきます。	Comments: Erythema, edema and necrosis of the skin at the site of contact, with congestion and hemorrhage of the lungs in rats dying on study . Approximate LD50 is based on 4/5 mortality at 10 g/kg and 2/5 at 5 g/kg.
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Union Carbide Corporation, Mellon Institute of Industrial Research Report 15-55 dated June 30, 1952.	Union Carbide Corporation, Mellon Institute of Industrial Research Report 15-55 dated June 30, 1952.
備考	(訳者注: 試験系では「rabbits」となっているがコメントでは「rats」となっている)	

C. 急性経皮毒性
ACUTE DERMAL TOXICITY

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	4 時間 (詳細不明)	4 hours (no details given)
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
試験系(種／系統)	モルモット	Guinea pig.
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		

投与経路		
観察期間(日)		
その他の試験条件		
統計学的処理		
結果		
各用量群での死亡数		
臨床所見		
剖検所見		
その他		
結論		
LD50値又はLC50値	経皮 LD50 = 20 g/kg超	Percutaneous LD50 greater than 20 g/kg
雌雄のLD50値又はLC50値の違い等		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Brabec, M. J. (1981) " Aldehydes and Acetals". in Patty's Industrial Hygiene and Toxicology, 3rd rev. ed., vol. 2A, chapter 37, Clayton, G. D. and F. E. Clayton (eds). John Wiley & Sons, New York. p. 2643.	Brabec, M. J. (1981) " Aldehydes and Acetals". in Patty's Industrial Hygiene and Toxicology, 3rd rev. ed., vol. 2A, chapter 37, Clayton, G. D. and F. E. Clayton (eds). John Wiley & Sons, New York. p. 2643.
備考		

D. 急性毒性(その他の投与経路)
ACUTE TOXICITY, OTHER ROUTES

5-3 腐食性/刺激性
CORROSIVENESS/IRRITATION

A. 皮膚刺激/腐食
SKIN IRRITATION/CORROSION

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
pH		
方法		
方法/ガイドライン	0.01 mL の無希釈のイソブチルアルデヒドをウサギの腹の刈毛した皮膚に開放適用した。	0.01 mL of undiluted isobutylaldehyde applied to uncovered clipped skin of the rabbit belly
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
試験系(種/系統)	ウサギ/雄/ニュージーランド白色種	Rabbit/male/Nw Zealand White
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
観察期間(日)		
その他の試験条件		
統計学的処理		
結果		
一次刺激スコア		
皮膚反応等		
その他	コメント: 6匹中1匹のウサギで適用部位に明らかな紅斑を引き起こした。	Comments: Produced marked erythema at the site of contact on one of six rabbits
結論		
皮膚刺激性		
皮膚腐食性		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Union Carbide Corporation, Mellon Institute of Industrial Research Report 15-55 dated June 30, 1952.	Union Carbide Corporation, Mellon Institute of Industrial Research Report 15-55 dated June 30, 1952.
備考		

B. 眼刺激/腐食
EYE IRRITATION/CORROSION

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法/ガイドライン	0.02 mL の無希釈のイソブチルアルデヒドをウサギの眼の下結膜嚢に滴下した。	0.02 mL of undiluted isobutylaldehyde instilled into the inferior conjunctival sac of rabbit eyes
試験のタイプ		
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		

試験系(種／系統)	雄 ニュージーランド ウサギ	Male New Zealand Rabbits
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
観察期間(日)		
その他の試験条件		
統計学的処理		
結果		
腐食		
刺激点数: 角膜		
刺激点数: 虹彩		
刺激点数: 結膜		
その他	コメント: 全ての処置眼の角膜に重篤な傷害が生じた、0.005 mLの滴下では角膜に中等度の傷害を引き起こした。	Comments: Produced severe damage to the cornea of all treated eyes. Instillation of 0.005 mL caused moderate injury to the cornea.
結論		
眼刺激性		
眼腐食性		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Union Carbide Corporation, Mellon Institute of Industrial Research Report 15-55 dated June 30, 1952.	Union Carbide Corporation, Mellon Institute of Industrial Research Report 15-55 dated June 30, 1952.
備考		

5-4 皮膚感作 SKIN SENSITISATION

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	ネズミ耳介腫脹試験/局所リンパ節アッセイ	Murine Ear Swelling Test/Local Lymph Node Assay.
試験のタイプ		
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
試験系(種／系統)	マウス/雌/B6C3F1	Mouse/female/B6C3F1
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
観察期間(日)		
その他の試験条件	コメント: 刺激性と接触過敏について、NTPの後援する試験において、マウスは20 ul のイソブタナールをアジュバントがある場合と無い場合、剃毛し擦過傷をつけた耳に5日間連続して直接適用した。イソブタナールの用量範囲はアセトン4、オリーブ油1の割合の溶液で感作性テスト用として3～30%、惹起テスト用として30%。	Comments: Mice received 20 ul isobutanol applied directly to shaved and abraded ears for 5 consecutive days with and without adjuvant in an NTP sponsored test for irritancy and contact hypersensitivity. Doses of isobutanol ranged from 3% to 30% in a solution of four parts acetone to one part olive oil for sensitization tests, and 30% for challenge tests.
統計学的処理		
結果		
試験結果	陰性: 刺激性や過敏の兆候はみられていない。	Negative; no indication of irritation or hypersensitivity observed
その他		
結論		
感作性		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	National Toxicology Program (1990) Assessment of Contact Hypersensitivity to Isobutyraldehyde in female B6C3F1 Mice (IBA-0-1-CNM). National Toxicology Program, Studies Conducted at Immunotoxicology Program, Medical College of Virginia, Virginia Commonwealth University, Richmond VA.	National Toxicology Program (1990) Assessment of Contact Hypersensitivity to Isobutyraldehyde in female B6C3F1 Mice (IBA-0-1-CNM). National Toxicology Program, Studies Conducted at Immunotoxicology Program, Medical College of Virginia, Virginia Commonwealth University, Richmond VA.
備考		

5-5 反復投与毒性 REPEATED DOSE TOXICITY

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		

方法／ガイドライン	イソブチルアルデヒド液は、制御された無流体のアトマイザーによって既知の割合で計量された気流に注入した。	Isobutyraldehyde liquid injected at a known rate into a metered stream of air by means of a controlled, fluid-free atomizer.
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
試験系(種／系統)	Alderley Park SPF ラット	Alderley Park specific-pathogen-free rats
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
対照群に対する処理		
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)		
投与頻度		
回復期間(日)		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
体重、体重増加量		
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
眼科学的所見(発生率、重篤度)		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)		
実際に摂取された量		
用量反応性		
注釈	1000 ppmで6時間、12時間暴露された雌雄それぞれ4匹のラットにおいて、軽微な鼻刺激はみられたが全身毒性は無かった。	Evidence of slight nasal irritation but no evidence of systemic toxicity in 4 rats of each sex receiving 12, 6-hour exposures to 1000 ppm.
結論		
NOAEL (NOEL)	毒性影響のみられない用量または濃度:1000 ppm	Dose or concentration at which no toxic effects were observed: 1000 ppm
LOAEL (LOEL)		
NOAEL/LOAELの推定根拠		
雌雄のNOAEL(LOAEL)の違い等		
注釈	コメント:剖検において器官は正常(肺、肝臓、腎臓、脾臓及び副腎を含む器官は肉眼的及び顕微鏡学的に検査した)。	Comments: At autopsy, organs normal (organs examined macroscopically and microscopically included the lungs, liver, kidneys, spleen and adrenals).
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Gage, J. C. (1970) The subacute inhalation toxicity of 109 industrial chemicals. Brit. J. Indust. Med. 27:1-18	Gage, J. C. (1970) The subacute inhalation toxicity of 109 industrial chemicals. Brit. J. Indust. Med. 27:1-18
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	ラットに1000、2500 及び 4000 ppmの濃度で1日 6 時間、10 日間連続で暴露した。 この試験は、発生毒性試験の用量設定試験として設計された。暴露の最終日の剖検では、鼻腔の組織を光学顕微鏡により検査した。	Rats were exposed to air concentrations of 1000, 2500 and 4000 ppm, 6 hours/day for 10 consecutive days. This study was designed as a concentration finding study for a definitive developmental toxicity study. At necropsy, the last day of exposure, tissues of the nasal cavities were examined by light microscopy
GLP適合	はい	Yes
試験を行った年		
試験系(種／系統)	雌 Wistar ラット(妊娠動物10匹/濃度)	Female Wistar Rats (10 pregnant animals per exposure concentration)
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		

投与経路		
対照群に対する処理		
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)		
投与頻度		
回復期間(日)		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
体重、体重増加量		
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
眼科学的所見(発生率、重篤度)		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)		
実際に摂取された量		
用量反応性		
注釈	鼻腔側壁前部の移行上皮の過形成が4000 ppm暴露では8/10匹、2500 ppm暴露では6/10匹、1000 ppm暴露では0/10匹にみられた。4000 ppm暴露の1例では、背側鼻道の嗅上皮の中等度の限局性萎縮がみられた。	Hyperplasia of the transitional epithelium of the anterior part of the lateral wall of the nasal cavity was observed in 8/10 animals exposed to 4000 ppm, 6/10 animals exposed to 2500 ppm and 0/10 animals exposed to 1000 ppm. One animal exposed to 4000 ppm exhibited moderate focal atrophy of the olfactory epithelium in the dorsal meatus
結論		
NOAEL (NOEL)	毒性影響のみられない用量または濃度:1000 ppm	Dose or concentration at which no toxic effects were observed: 1000 ppm
LOAEL (LOEL)		
NOAEL/LOAELの推定根拠		
雌雄のNOAEL(LOAEL)の違い等		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Garmer, A. O., Hellwig, J and B. Hildebrand (1995) "Brief Report on the Maternal Inhalation Toxicity of Isobutyraldehyde as a vapor in Pregnant Wistar Rats" BASF Aktiengesellschaft Department of Toxicology Project No.: 11R0140/93019. Ludwigshafen, Germany.	Garmer, A. O., Hellwig, J and B. Hildebrand (1995) "Brief Report on the Maternal Inhalation Toxicity of Isobutyraldehyde as a vapor in Pregnant Wistar Rats" BASF Aktiengesellschaft Department of Toxicology Project No.: 11R0140/93019. Ludwigshafen, Germany.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanal
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	ラットに500、1000、2000、4000 及び 8000 ppmの濃度で1日 6 時間、週5日間、計10 回暴露した。死亡率と臨床所見の観察は体重変化、器官重量、血液、臨床化学及び組織検査とともに実施した。	Rats were exposed to air concentrations of 500, 1000, 2000, 4000 and 8000 ppm 6 hours/day, 5 days/week for a total of 10 exposures. Observations for mortality and clinical signs were made along with measurements of body weight change, organ weights, hematology, clinical chemistries, and histology.
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
試験系(種／系統)	Fischer 344 ラット(暴露濃度あたりの動物数不明)	Fischer 344 Rats (number per exposure concentration not given)
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
対照群に対する処理		
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)		
投与頻度		
回復期間(日)		
試験条件		
統計学的処理		
結果		

体重、体重増加量		
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
眼科学的所見(発生率、重篤度)		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)		
実際に摂取された量		
用量反応性		
注釈	8000 ppm 暴露で8匹が死亡し、この死亡は全て最初の暴露後に死亡した。8000 ppmの雄で腎臓重量の変化、500及び1000 ppmの雄で赤血球数の減少が示唆された。他の毒性指標では有意な影響はなかった。2つの高用量で肺の間質性炎症がみられた。	Eight rats exposed to 8000 ppm died, all after the first exposure. There was a suggestion of weight change in the kidneys of males exposed to 8000 ppm, decreases in RBCs of males exposed to 500 and 1000 ppm. No significant effects were noted in other indices of toxicity. Pulmonary interstitial inflammation at the two highest exposure concentrations.
結論		
NOAEL (NOEL)		
LOAEL (LOEL)		
NOAEL/LOAELの推定根拠		
雌雄のNOAEL(LOAEL)の違い等		
注釈	NTPの要約から得られたデータで詳細は欠いている	Data obtained from NTP summary, details lacking.
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Eastin, W. (1990) "Thirteen-Week Subchronic Study in F344 Rats: Isobutyraldehyde" National Toxicology Program (Letter to Mr. T. J. Cawley, Union Carbide Corporation, dated November 29, 1990).	Eastin, W. (1990) "Thirteen-Week Subchronic Study in F344 Rats: Isobutyraldehyde" National Toxicology Program (Letter to Mr. T. J. Cawley, Union Carbide Corporation, dated November 29, 1990).
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanal
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	ラットに500、1000、2000、4000 及び 8000 ppmの濃度で1日 6 時間、週5日間、13週間暴露した。死亡率と臨床所見の観察は体重変化、器官重量、血液、臨床化学及び組織検査とともに実施した。	Rats were exposed to air concentrations of 500, 1000, 2000, 4000 and 8000 ppm 6 hours/day, 5 days/week for 13 weeks. Observations for mortality and clinical signs were made along with measurements of body weight change, organ weights, hematology, clinical chemistries, and histology.
GLP適合	はい	Yes
試験を行った年		
試験系(種／系統)	Fischer 344 ラット (10匹/性/暴露濃度)	Fischer 344 Rats (10/sex/exposure concentration)
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
対照群に対する処理		
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)		
投与頻度		
回復期間(日)		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
体重、体重増加量		
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
眼科学的所見(発生率、重篤度)		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)		
実際に摂取された量		
用量反応性		

注釈	8000 ppmの死亡率は100%、4000 ppmの死亡率は45%（雄：3/10、雌：6/10）。嗅上皮の軽微から軽度の変性が2000及び4000 ppm群の雄でみられた。発生率上昇[<i>s</i>] of the 鼻粘膜上皮の扁平上皮の 異形成の発生率増加と鼻甲介 骨の軽度の骨形成異常が4000 ppmの雌雄でみられた。精子運動性の有意な減少が500及び1000 ppm群の雄でみられたが、2000及び4000 ppmではみられなかった。対照群の発情期は4000 ppmの生存例4例より短かった（対照群は5.00日間、4000 ppm群は5.33日間）。	100% mortality at 8000 ppm, 45% mortality at 4000 ppm (3/10 males, 6/10 females). Minimal to mild degeneration of the olfactory epithelium was observed in males in the 2000 and 4000 ppm groups. Increased incidences of squamous metaplasia of the nasal epithelium and mild osteodystrophy of the turbinate bone were observed in male and female rats exposed to 4000 ppm. Spermatozoal motility was significantly reduced in males in the 500 and 1000 ppm groups, but not at 2000 and 4000 ppm. Time females spent in estrous stage was shorter in controls than in the 4 surviving females exposed to 4000 ppm (5.00 days in controls, 5.33 days in remaining females from the 4000 ppm group).
結論		
NOAEL (NOEL)		
LOAEL (LOEL)		
NOAEL/LOAELの推定根拠		
雌雄のNOAEL(LOAEL)の違い等		
注釈	発情周期は4000 ppm群の生存例4例でのみ評価された。発情周期の期間の違い(対照群で5.00 +/- 0.15日、4000 ppmで 5.33 +/- 0.33 日)は Wilk's Criterionでのみ有意で、Dunn's Test では有意ではなかった(NTP, 1999)。	The estrous cycle was assessed in only 4 surviving females in the 4000 ppm exposure group. The difference in the length of the estrous cycle (5.00 +/- 0.15 days in control females and 5.33 +/- 0.33 days in 4000 ppm females) was significant only by Wilk's Criterion and was not significant by Dunn's Test (NTP, 1999).
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	U.S. National Toxicology Program, (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.	U.S. National Toxicology Program, (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	マウスに500、1000、2000、4000 及び 8000 ppmの濃度で1日 6時間、週5日間、13週間暴露した。死亡率と臨床所見の観察は体重変化、器官重量、血液、臨床化学及び組織検査とともに実施した。	Mice were exposed to air concentrations of 500, 1000, 2000, 4000 and 8000 ppm, 6 hours/day, 5 days/week for 13 weeks. Observations for mortality and clinical signs were made along with measurements of body weight change, organ weights, hematology, clinical chemistries, and histology.
GLP適合	はい	Yes
試験を行った年		
試験系(種／系統)	B6C3F1 マウス (10匹/性/暴露濃度)	B6C3F1 mice (10/sex/exposure concentration)
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
対照群に対する処理		
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)		
投与頻度		
回復期間(日)		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
体重、体重増加量		
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
眼科学的所見(発生率、重篤度)		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)		
実際に摂取された量		
用量反応性		

注釈	8000 ppmの死亡率は100%、4000 ppmの死亡率は95%。鼻腔の非腫瘍性病変の発生率増加が1000 ppm以上の群の雌雄でみられた。1000ppmの雌で体重と体重増加率の有意に減少した。1000及び2000 ppmの雄で腎臓の絶対相対重量が有意に増加した。臨床所見として活動性の低下、振戦、衰弱、遅く困難な呼吸がみられた。	100% mortality at 8000 ppm, 95% mortality at 4000 ppm. Increased incidences of non-neoplastic lesions of the nasal cavity occurred in males and females exposed to 1000 ppm or higher. Body weight and body weight gain of females in the 1000 ppm group significantly reduced. Absolute and relative kidney weights of males in the 1000 and 2000 ppm groups significantly increased. Clinical findings included decreased activity, tremors, prostration and slower and labored respiration.
結論		
NOAEL (NOEL)		
LOAEL (LOEL)		
NOAEL/LOAELの推定根拠		
雌雄のNOAEL(LOAEL)の違い等		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.
備考		

試験物質名	ブチルアルデヒド	Butyraldehyde
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	動物に2000、3100及び 6400 ppmの濃度で1日 6 時間、週5日間、合計9回暴露した。	Animals were exposed to air concentrations of 2000, 3100 and 6400 ppm, 6 hours/day, 5 days/week for a total of 9 exposures.
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
試験系(種／系統)	ラット、マウス、モルモット、ウサギ及びイヌ	Rats, Mice, Guinea Pigs, Rabbits and Dogs
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
対照群に対する処理		
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)		
投与頻度		
回復期間(日)		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
体重、体重増加量		
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
眼科学的所見(発生率、重篤度)		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)		
実際に摂取された量		
用量反応性		
注釈	明らかな眼と呼吸の刺激の兆候、体重増加率の有意な減少が3100及び6400 ppmの濃度の大部分の動物種でみられた。6400 ppmで大部分の動物でみられた他の症状として協調性の消失、麻酔及び死亡がみられた。3100 ppmではこれらの影響はイヌでのみみられた。2000 ppmでは一部の動物種で体重増加の減少がみられた。2000及び3100 ppm暴露のラットで散発的な臓器重量の変化もみられた。病理学的に有意な投与と関連した肉眼的病変は3100あるいは2000ppm暴露の動物ではみられなかった。	Definite signs of eye and respiratory irritation, and statistically significant decreases in body weight gain were observed in most species at concentrations of 3100 and 6400 ppm. Other signs observed in most animals at 6400 ppm included coordination loss, anesthesia and death. At 3100 ppm these effects were observed only in the dog. In some animals exposed to 2000 ppm decreased weight gain was observed. Scattered organ weight differences were also noted in rats exposed to 2000 and 3100 ppm. No pathologically significant treatment related gross lesions were found among animals exposed to 3100 or 2000 ppm.
結論		
NOAEL (NOEL)		
LOAEL (LOEL)		

NOAEL/LOAELの推定根拠		
雌雄のNOAEL(LOAEL)の違い等		
注釈	構造活性相関に基づいて、イソブチルアルデヒドの有害性確認に、ブチルアルデヒドに関する哺乳類のテストデータの結果は適用可能と思われる。	Based on structure activity relationships, results of mammalian test data on butyraldehyde should be applicable for hazard identification of isobutyraldehyde
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Union Carbide Corporation (1978) Carnegie-Mellon Institute of Research, Chemical Hygiene Fellowship Project Report 41-39.	Union Carbide Corporation (1978) Carnegie-Mellon Institute of Research, Chemical Hygiene Fellowship Project Report 41-39.
備考		

試験物質名	ブチルアルデヒド	Butyraldehyde
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	動物に125、500 及び 2000 ppm (340、1360及び5440 mg/m ³)の濃度で1日 6 時間、週5日間、各13及び14週間暴露した。毒性の指標としては、体重、器官重量、尿検査、血液生化学、病理組織学的検査、眼科学的検査及び血液学的検査を含む。	Animals were exposed to air concentrations of 125, 500 and 2000 ppm (340, 1360, and 5440 mg/m ³) 6 hours/day, 5 days/week for up to 14 and 13 weeks respectively. Indices of toxicity included body and organ weights, urinalysis, blood chemistries, histopathology, ophthalmologic and hematological examinations.
GLP適合	はい	Yes
試験を行った年		
試験系(種／系統)	雄 ビーグル犬、雌雄 Sprague-Dawley ラット	Male Beagle Dogs, Male and Female Sprague-Dawley Rats
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
対照群に対する処理		
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)		
投与頻度		
回復期間(日)		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
体重、体重増加量		
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
眼科学的所見(発生率、重篤度)		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)		
実際に摂取された量		
用量反応性		
注釈	ラットにおいて全ての暴露群で濃度に依存した鼻腔の扁平上皮化生の発生率の増加がみられた。2000 ppm暴露のイヌで上気道の有意な顕微鏡学的病変がみられた。125及び500 ppm暴露のイヌで暴露濃度と関連した鼻粘膜の杯細胞の過形成がみられた。その他の動物種ではいずれの濃度においてもブチルアルデヒド蒸気と関連する他の有意な病変は無かった。	A concentration dependent increase in the incidence of squamous cell metaplasia of the nasal cavities was observed in rats of all exposure groups. Dogs exposed to 2000 ppm had significant microscopic lesions of the upper respiratory tract. Exposure concentration related goblet cell hyperplasia within the nasal mucosa was seen in dogs exposed to 125 and 500 ppm. No other significant lesions, at any of the exposure concentrations, in either species, could be attributed to butyraldehyde vapor.
結論		
NOAEL (NOEL)		
LOAEL (LOEL)		
NOAEL/LOAELの推定根拠		
雌雄のNOAEL(LOAEL)の違い等		
注釈	構造活性相関に基づいて、イソブチルアルデヒドの有害性確認に、ブチルアルデヒドに関する哺乳類のテストデータの結果は適用可能と思われる。	Based on structure activity relationships, results of mammalian test data on butyraldehyde should be applicable for hazard identification of isobutyraldehyde.
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		

引用文献(元文献)	Union Carbide Corporation (1979) Carnegie-Mellon Institute of Research, Chemical Hygiene Fellowship Project Report 42-50.	Union Carbide Corporation (1979) Carnegie-Mellon Institute of Research, Chemical Hygiene Fellowship Project Report 42-50.
備考		
試験物質名	ブチルアルデヒド	Butyraldehyde
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	ラットに1、10及び50 ppm (3.2、30及び50 mg/m ³)の濃度で1日 6時間、週5日間、少なくとも12週間暴露した。毒性の指標としては、体重、摂餌量、腎臓重量、肝臓重量、血清化学、病理組織学的検査、眼科学的検査及び神経学的検査を含む。	Rats were exposed to air concentrations of 1, 10 and 50 ppm (3.2, 30, and 50 mg/m ³) 6 hours/day, 5 days/week for at least 12 weeks. Indices of toxicity included body weights, food consumption, kidney and liver weights, serum chemistries, histopathology, ophthalmologic and neurological examinations.
GLP適合	はい	Yes
試験を行った年		
試験系(種／系統)	雌雄 Fischer 344 ラット (15匹/性/群)	Male and Female Fischer 344 Rats (15/sex/group)
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
対照群に対する処理		
投与期間(日)(OECD422等で、投与期間のデータ等がある場合、最長投与期間)		
投与頻度		
回復期間(日)		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
体重、体重増加量		
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
眼科学的所見(発生率、重篤度)		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)		
実際に摂取された量		
用量反応性		
注釈	病理組織学的所見では50 ppm濃度までブチルアルデヒド暴露と関連した有意な影響はみられなかった。気道の感染症併発により暴露と関連した微細ないくつかの刺激性の影響はマスクされたかもしれない。試験物質が気道に重篤な刺激は誘発しないと結論付けられた。神経機能観察(Irwinスクリーン)において神経学的影響の証拠はなかった。	Histopathologic findings indicated no specific adverse effects could be attributed to exposure to butyraldehyde vapor at concentrations up to 50 ppm. An intercurrent infection in the respiratory tract may have masked any minor irritation effect due to exposure. It was concluded that the test material did not induce any severe irritation to the respiratory tract. No evidence of neurologic effects in a functional observational battery (Irwin Screen).
結論		
NOAEL (NOEL)	毒性影響のみられない用量または濃度:50 ppm	Dose or concentration at which no toxic effects were observed: 50 ppm
LOAEL (LOEL)		
NOAEL/LOAELの推定根拠		
雌雄のNOAEL(LOAEL)の違い等		
注釈	構造活性相関に基づいて、イソブチルアルデヒドの有害性確認に、ブチルアルデヒドに関する哺乳類のテストデータの結果は適用可能と思われる。	Based on structure activity relationships, results of mammalian test data on butyraldehyde should be applicable for hazard identification of isobutyraldehyde.
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Union Carbide Corporation (1980) Carnegie-Mellon Institute of Research, Chemical Hygiene Fellowship Project Report 43-61.	Union Carbide Corporation (1980) Carnegie-Mellon Institute of Research, Chemical Hygiene Fellowship Project Report 43-61.
備考		

A. 遺伝子突然変異
GENE MUTATION

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	ネズミチフス菌を用いた細菌の前進遺伝子突然変異試験 (Ames試験)	Bacterial forward gene mutation assay in Salmonella typhimurium (Ames Test)
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
細胞株又は検定菌	ネズミチフス菌 G-46 & TA-100、TA-1535、C3076、TA-1537、D3052、TA-1538、及びTA-98.	S. typhimurium strains G-46 & TA-100, TA-1535, C3076, TA-1537, D3052, TA-1538, and TA-98.
代謝活性化(S9)の有無		
試験条件	析出した試験物質の濃度: 報告無し	Concentration of test compound resulting in precipitation: Not reported
結果		
細胞毒性		
代謝活性ありの場合	報告無し	Not reported
代謝活性なしの場合	報告無し	Not reported
変異原性		
代謝活性ありの場合		
代謝活性なしの場合		
注釈		
結論		
遺伝子突然変異	不明	Ambiguous
注釈	G-46及びTA-100 (塩基対置換突然変異誘導物検出系)で陽性、Negative in TA-1535 (塩基対置換突然変異誘導物検出系)で陰性、フレームシフト突然変異誘導物検出系であるC3076、TA-1537、D3052、TA-1538及びTA-98で陰性。原著にはプレートのカウント数は記載されていない。	Positive in both G-46 and TA-100 (base substitution mutagens). Negative in TA-1535 (base substitution mutagen) and negative in the frame shift mutagens C3076, TA-1537, D3052, TA-1538, and TA-98. Plate counts not given in original publication.
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	McMahon, R. E., Cline, J. C. and C. Z. Thompson (1979) Assay of 855 test chemicals in ten tester strains using a new modification of the Ames test for bacterial mutagens. Cancer Res. 39:683-693.	McMahon, R. E., Cline, J. C. and C. Z. Thompson (1979) Assay of 855 test chemicals in ten tester strains using a new modification of the Ames test for bacterial mutagens. Cancer Res. 39:683-693.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	ネズミチフス菌を用いた細菌の前進遺伝子突然変異試験、プレインキュベーションアッセイ (Ames 試験)	Bacterial forward gene mutation pre-incubation assay in Salmonella typhimurium (Ames Test)
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
細胞株又は検定菌	ネズミチフス菌TA-100、TA-1535、TA-1537及びTA-98	S. typhimurium strains TA-100, TA-1535, TA-1537 & TA-98.
代謝活性化(S9)の有無		
試験条件	100～10000 :ug/プレートの間で5濃度 (100、333、1000、3333及び10,000 ug/プレート)を用いた。代謝活性系としてラット肝臓のS9とハムスター肝臓のS9の両方を用いた。	Five concentrations used ranging between 100 and 10000 :ug/plate (100, 333, 1000, 3333, and 10,000 ug/plate). Both rat liver S9 and hamster liver S9 used for metabolic activation system
結果		
細胞毒性		
代謝活性ありの場合	10,000 ug/プレートまで毒性はみられなかった。	no toxicity observed up to 10,000 ug/plate
代謝活性なしの場合	10,000 ug/プレートまで毒性はみられなかった。	no toxicity observed up to 10,000 ug/plate
変異原性		
代謝活性ありの場合	+ ? — [] [] [X]	+ ? — [] [] [X]
代謝活性なしの場合	+ ? — [] [] [X]	+ ? — [] [] [X]
注釈		
結論		
遺伝子突然変異	陰性	Negative
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		

引用文献(元文献)	Mortelmans, K., Haworth, S., Lawlor, T., Speck, W., Tainer, B. and E. Zeiger (1986) Salmonella mutagenicity tests: II. Results from the testing of 270 chemicals. Environ. Mut. 8 (suppl.7): 1-119.	Mortelmans, K., Haworth, S., Lawlor, T., Speck, W., Tainer, B. and E. Zeiger (1986) Salmonella mutagenicity tests: II. Results from the testing of 270 chemicals. Environ. Mut. 8 (suppl.7): 1-119.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	ネズミチフス菌を用いた細菌の前進遺伝子突然変異試験 (Ames試験)	Bacterial forward gene mutation assay in Salmonella typhimurium (Ames Test)
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
細胞株又は検定菌	ネズミチフス菌TA-98、TA-100、TA-1535及びTA-1537	S. typhimurium strains TA-98, TA-100, TA-1535 & TA-1537
代謝活性化(S9)の有無		
試験条件		
結果		
細胞毒性		
代謝活性ありの場合		
代謝活性なしの場合		
変異原性		
代謝活性ありの場合	+ ? — [] [] [X]	+ ? — [] [] [X]
代謝活性なしの場合	+ ? — [] [] [X]	+ ? — [] [] [X]
注釈		
結論		
遺伝子突然変異	陰性	Negative
注釈	最高用量 3 umole (216 ug)/プレートで試験	Maximum dose tested 3 umole (216 ug)/plate
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Florin, I., Rutberg, L., Curvall, M. and C. R. Enzell (1980) Screening of tobacco constituents for mutagenicity using the Ames test. Toxicol. 18:219-232.	Florin, I., Rutberg, L., Curvall, M. and C. R. Enzell (1980) Screening of tobacco constituents for mutagenicity using the Ames test. Toxicol. 18:219-232.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	ネズミチフス菌を用いた細菌の前進遺伝子突然変異試験 (Ames試験)	Bacterial forward gene mutation assay in Salmonella typhimurium (Ames Test)
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
細胞株又は検定菌	ネズミチフス菌TA-100及びTA-98.	S. typhimurium strains TA-100 and TA-98.
代謝活性化(S9)の有無		
試験条件		
結果		
細胞毒性		
代謝活性ありの場合		
代謝活性なしの場合		
変異原性		
代謝活性ありの場合	+ ? — [] [] [X]	+ ? — [] [] [X]
代謝活性なしの場合	+ ? — [] [] [X]	+ ? — [] [] [X]
注釈		
結論		
遺伝子突然変異	陰性	Negative
注釈	要約にはプレートのカウント数は記載されていない。	No plate counts given in abstract.
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Sasaki, Y. and R. Endo (1978) Mutagenicity of aldehydes in Salmonella. Mut. Res. 54:251-252.	Sasaki, Y. and R. Endo (1978) Mutagenicity of aldehydes in Salmonella. Mut. Res. 54:251-252.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		

方法／ガイドライン	ネズミチフス菌を用いた細菌の前進遺伝子突然変異試験 (Ames試験)	Bacterial forward gene mutation assay in Salmonella typhimurium (Ames Test)
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
細胞株又は検定菌	ネズミチフス菌 TA-98、TA-100及びTA-102	S. typhimurium strains TA-98, TA-100 and TA-102
代謝活性化(S9)の有無		
試験条件		
結果		
細胞毒性		
代謝活性ありの場合		
代謝活性なしの場合		
変異原性		
代謝活性ありの場合	+ ? — [] [] [X]	+ ? — [] [] [X]
代謝活性なしの場合	+ ? — [] [] [X]	+ ? — [] [] [X]
注釈		
結論		
遺伝子突然変異	陰性	Negative
注釈	プレートのカウント数は不明。試験は1.1nmoles～0.11nmoles/プレートの間の濃度で実施。	No plate counts given. Tested at concentrations between 1.1 nmoles and 0.11nmoles per plate.
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Aeschbacher, H. U., Wolleb, U., Loliger, J., Spadone, J. C. and R. Liardon (1989) Contribution of coffee aroma constituents to the mutagenicity of coffee". Fd. Chem. Toxic. 27:227-232.	Aeschbacher, H. U., Wolleb, U., Loliger, J., Spadone, J. C. and R. Liardon (1989) Contribution of coffee aroma constituents to the mutagenicity of coffee". Fd. Chem. Toxic. 27:227-232.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	大腸菌を用いた細菌の前進遺伝子突然変異試験	Bacterial forward gene mutation assay in Escherichia coli
GLP適合		
試験を行った年		
細胞株又は検定菌	大腸菌 WP2及びWP2 uvrA	Escherichia coli strains WP2 and WP2 uvrA
代謝活性化(S9)の有無		
試験条件	析出した試験物質濃度：報告されていない。	Concentration of test compound resulting in precipitation: Not reported
結果		
細胞毒性		
代謝活性ありの場合	報告されていない	Not reported
代謝活性なしの場合	報告されていない	Not reported
変異原性		
代謝活性ありの場合	+ ? — [] [] []	+ ? — [] [] []
代謝活性なしの場合	+ ? — [X] [] []	+ ? — [X] [] []
注釈		
結論		
遺伝子突然変異	陽性	Positive
注釈	WP2 と WP2 uvrA [™] (塩基対突然変異誘発性物質検出系) の両方で陽性	Positive in both WP2 and WP2 uvrA [™] (base substitution mutagens).
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	McMahon, R. E., Cline, J. C. and C. Z. Thompson (1979) Assay of 855 test chemicals in ten tester strains using a new modification of the Ames test for bacterial mutagens. Cancer Res. 39:683-693.	McMahon, R. E., Cline, J. C. and C. Z. Thompson (1979) Assay of 855 test chemicals in ten tester strains using a new modification of the Ames test for bacterial mutagens. Cancer Res. 39:683-693.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	ネズミチフス菌を用いた細菌の前進遺伝子突然変異試験 (Ames試験)	Bacterial forward gene mutation assay in Salmonella typhimurium (Ames Test)
GLP適合		
試験を行った年		

細胞株又は検定菌	ネズミチフス菌 TA-97、TA-98、TA-100、TA-102、TAS-104、TA-1535及びTA-1537	S. typhimurium strains TA-97, TA-98, TA-100, TA-102, TAS-104, TA-1535 and TA-1537
代謝活性化(S9)の有無		
試験条件	析出した試験物質濃度:適用できない⇒当てはまらない	Concentration of test compound resulting in precipitation: Not applicable
結果		
細胞毒性		
代謝活性ありの場合	3333 ug/プレート	3333 ug/plate
代謝活性なしの場合	1600 ug/プレート	1600 ug/plate
変異原性		
代謝活性ありの場合	+ ? — [] [] [X]	+ ? — [] [] [X]
代謝活性なしの場合	+ ? — [] [] [X]	+ ? — [] [] [X]
注釈		
結論		
遺伝子突然変異	TA-97、TA-98、TA-100、TA-102、TA-1535及びTA-1537でラットとハムスターの肝臓S9あり及びなしで陰性、TA-104のラット肝臓S9ありでのみ疑陽性。	Negative in strains TA-97, TA-98, TA-100, TA-102, TA-1535 & TA-1537 with and without rat and hamster liver S9; equivocal in strain TA-104 but only with rat liver S9.
注釈	ラットとハムスターの両方から得た10%と30%S9を添加して試験を実施した。	Tested in presence of 10% and 30% S9 preparations from both rat and hamster
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Zeiger, E., Anderson, B., Haworth, S., Lawlor, T. and Mortelmans, K. (1992) Salmonella mutagenicity tests: V. Results from the testing of 311 chemicals. Environ Molec Mutagen 19 (Suppl 21): 2-141.	Zeiger, E., Anderson, B., Haworth, S., Lawlor, T. and Mortelmans, K. (1992) Salmonella mutagenicity tests: V. Results from the testing of 311 chemicals. Environ Molec Mutagen 19 (Suppl 21): 2-141.
備考		

B. 染色体異常
CHROMOSOMAL ABERRATION

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	マウスリンフォーマ遺伝子突然変異アッセイ	Mouse lymphoma gene mutation assay
GLP適合		
試験を行った年		
細胞株	マウス	Test species/strain: Mouse
代謝活性化(S9)の有無		
試験条件	S9代謝活性の無い系でのみ試験実施。 試験濃度: 0 (媒体:エタノール)、62.5、125、250、500、1000及び1500 ug/mL	Tested only in the absence of S9 metabolic activation. Concentrations tested: 0 (ethanol vehicle), 62.5, 125, 250, 500, 1000, and 1500 ug/mL
結果		
細胞毒性		
代謝活性ありの場合		
代謝活性なしの場合	毒性のみられた試験物質の最小濃度:1000 ug/mL	Minimum concentration of test substance at which toxicity was observed: 1000 ug/mL
染色体異常		
代謝活性ありの場合		
代謝活性なしの場合	+ ? — [X] [] []	+ ? — [X] [] []
注釈		
結論		
染色体異常	試験結果:陽性	Test results: Positive
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	姉妹染色分体交換	Sister chromatid exchange
GLP適合		

試験を行った年		
細胞株	チャイニーズハムスター, 卵巣由来細胞	Hamster/Chinese, ovary cells
代謝活性化(S9)の有無		
試験条件	各濃度について計50細胞を観察した。 用量レベル代謝活性化無し: 0 (媒体:DMSO)、5、16、50、160、500 ug/mL; 用量レベル代謝活性化無し: 0 (媒体:DMSO)、16、50、160、500、1600 ug/mL	A total of 50 cells scored for each concentration tested. Dose levels without metabolic activation: 0 (DMSO vehicle), 5, 16, 50, 160, 500 ug/mL; without metabolic activation: 0 (DMSO vehicle), 16, 50, 160, 500, 1600 ug/mL
結果		
細胞毒性		
代謝活性ありの場合	1600 ug/mL	with metabolic activation: 1600 ug/mL
代謝活性なしの場合	500 ug/mL	without metabolic activation: 500 ug/mL
染色体異常		
代謝活性ありの場合	+ ? — [X] [] []	+ ? — [X] [] []
代謝活性なしの場合	+ ? — [X] [] []	+ ? — [X] [] []
注釈		
結論		
染色体異常	試験結果: 陽性	Test results: Positive
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献 (元文献)	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法/ガイドライン	染色体異常試験	Chromosomal aberrations
GLP適合		
試験を行った年		
細胞株	チャイニーズハムスター, 卵巣由来細胞	Hamster/Chinese, ovary cells
代謝活性化(S9)の有無		
試験条件		
結果		
細胞毒性		
代謝活性ありの場合	代謝活性化有り: 3000 ug/mL	with metabolic activation: 3000 ug/mL
代謝活性なしの場合	代謝活性化無し: 3000 ug/mL	without metabolic activation: 3000 ug/mL
染色体異常		
代謝活性ありの場合	+ ? — [] [] [X]	+ ? — [] [] [X]
代謝活性なしの場合	+ ? — [X] [] []	+ ? — [X] [] []
注釈		
結論		
染色体異常	試験結果: 陽性	Test results: Positive
注釈	チャイニーズハムスター卵巣細胞 (CHO) の染色体異常の誘発は、S9代謝活性化がない場合にのみ示された。 代謝活性化の有り無しの試験濃度: 0 (媒体:DMSO)、16、50、160、500、1500、3000、4000 ug/mL	Induction of chromosomal aberrations in Chinese hamster ovary (CHO) cells was noted only in the absence of S9 metabolic activation. Concentrations tested with and without metabolic activation: 0 (DMSO vehicle), 16, 50, 160, 500, 1500, 3000, 4000 ug/mL
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献 (元文献)	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.
備考		

5-7 *in vivo* 遺伝毒性
GENETIC TOXICITY IN VIVO

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法/ガイドライン	骨髄染色体異常試験	Bone Marrow Chromosomal Aberration Test
試験のタイプ		
GLP適合		
試験を行った年		

試験系(種／系統)	マウス/B6C3F1、骨髓細胞	Mouse/B6C3F1, bone marrow cells
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
投与経路		
試験期間		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
性別及び投与量別の結果		
遺伝毒性効果	致死量は2000 mg/kg; 低用量でみられた死亡率は報告されていない。	2000 mg/kg a lethal dose; extent of mortality observed at lower doses not reported.
NOAEL (NOEL)		
LOAEL (LOEL)		
統計的結果		
注釈		
結論		
<i>in vivo</i> 遺伝毒性	完全な致死を示さなかった最高濃度 (1750 mg/kg) で陽性、低濃度では陰性。	Positive at highest concentration (1750 mg/kg) that did not produce complete lethality; negative at lower concentrations.
注釈	マウス骨髓細胞での染色体異常の誘発。 コーン油に溶かしたイソブタナールをマウス腹腔内に 500、1000、1200、1500、1750及び2000 mg/kgの用量で投与した。投与17時間後に大腿骨の骨髓細胞を播種した。各動物 (10匹/暴露群) から最初の分裂中期の細胞を計50記録した。	Induction of chromosomal aberrations in mouse bone marrow cells. Isobutanol in corn oil was injected intraperitoneally into mice at doses of 500, 1000, 1200, 1500, 1750, and 2000 mg/kg. Femoral bone marrow cells were harvested 17 hours after dosing. A total of 50 first-division metaphase cells were scored from each animal (10 animals per exposure group).
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献 (元文献)	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	赤血球 小核試験	Erythrocyte Micronucleus Test
試験のタイプ		
GLP適合		
試験を行った年		
試験系(種／系統)	マウス/B6C3F1、骨髓細胞	Mouse/B6C3F1, bone marrow cells
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
投与経路		
試験期間		
試験条件	コメント:コーン油中のイソブタナールを0 (媒体:コーン油)、39、78、156、312、652及び1250 mg/kg (5 匹/暴露群)の用量で24時間間隔で3回マウスの腹腔内に注射した。3回目の注射の24時間後に大腿骨から血液スマアを採取した。各動物の小核細胞の頻度を調べるために合計2000の多染性赤血球 (PCE)を記録した。	Comments: Isobutanol in corn oil was injected intraperitoneally three times into mice at 24-hour intervals at 0 (corn oil vehicle), 39, 78, 156, 312, 652, and 1250 mg/kg (5 animals per exposure group). Blood smears were collected from femurs 24 hours after the 3rd injection. A total of 2000 polychromatic erythrocytes (PCEs) were scored for frequency of micronucleated cells for each animal.
統計学的処理		
結果		
性別及び投与量別の結果	試験結果: 1250 mg/kgでの死亡率は20% (1/5)	Test results: 20% (1/5) mortality at 1250 mg/kg
遺伝毒性効果		
NOAEL (NOEL)		
LOAEL (LOEL)		
統計的結果		
注釈		
結論		
<i>in vivo</i> 遺伝毒性	遺伝毒性影響: 陰性	Genotoxic effects: Negative
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献 (元文献)	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン		
試験のタイプ	赤血球 小核試験	Erythrocyte micronucleus assay
GLP適合		
試験を行った年		
試験系(種／系統)	ラット、骨髄	Rat, bone marrow
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
投与経路		
試験期間		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
性別及び投与量別の結果	試験結果:1250 mg/kgでの死亡率は20% (1/5)	Test results: 20% (1/5) mortality at 1250 mg/kg
遺伝毒性効果		
NOAEL (NOEL)		
LOAEL (LOEL)		
統計的結果		
注釈		
結論		
<i>in vivo</i> 遺伝毒性	遺伝毒性影響:陰性	Genotoxic effects: Negative
注釈	コメント:コーン油中のイソブタナールを0 (媒体:コーン油)、312、652及び1250 mg/kg (5 匹/暴露群)の用量で24時間間隔で3回ラットの腹腔内に注射した。3回目の注射の24時間後に大腿骨から血液スミアを採取した。各動物の小核細胞の頻度を調べるために合計2000の多染色赤血球 (PCE)を記録した。	Comments: Isobutanol in corn oil was injected intraperitoneally three times into rats at 24-hour intervals at 0 (corn oil vehicle), 312, 652, and 1250 mg/kg (5 animals per exposure group). Blood smears were collected from femurs 24 hours after the 3rd injection. A total of 2000 polychromatic erythrocytes (PCEs) were scored for frequency of micronucleated cells for each animal.
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.
備考		

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	注射と給餌によるカントン-S雄の減数分裂およびポスト減数分裂の生殖細胞ステージの伴性の退行性の致死変異の誘導	Induction of sex-linked recessive lethal mutations in meiotic and post meiotic germ cell stages of Canton-S males by injection and feeding
試験のタイプ		
GLP適合	いいえ	No
試験を行った年		
試験系(種／系統)	ショウジョウバエ/Drosophila melanogaster	Drosophila melanogaster
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
投与経路		
試験期間		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
性別及び投与量別の結果	試験結果:陰性 + ? — [] [] [X]	Test results: Negative Genotoxic effects: + ? — [] [] [X]
遺伝毒性効果		
NOAEL (NOEL)		
LOAEL (LOEL)		
統計的結果		
注釈		
結論		
<i>in vivo</i> 遺伝毒性		
注釈	コメント:注射試験では生理食塩水に50,000 ppm、給餌試験では5%ショ糖中に80,000 ppm。濃度は注射24時間後、給餌78時間後の約30%の死亡の誘導で選択した。	Comments: 50,000 ppm in saline used in injection study, 80,000 ppm in 5% sucrose in water used in feeding study. Concentrations selected induced approximately 30% mortality after 72 hours of feeding or 24 hours after injection.
信頼性		

信頼性の判断根拠 出典		
引用文献(元文献)	Woodruff, R. C., Mason, J. M. Valencia, R. and Zimmering, S. (1985) Chemical mutagenesis testing in Drosophila. V. Results of 53 coded compounds tested for the National Toxicology Program. Environ. Mut. 7:677-702.	Woodruff, R. C., Mason, J. M. Valencia, R. and Zimmering, S. (1985) Chemical mutagenesis testing in Drosophila. V. Results of 53 coded compounds tested for the National Toxicology Program. Environ. Mut. 7:677-702.
備考		

5-8 発がん性
CARCINOGENICITY

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	1群雌雄各50匹のF344/Nラットに 0、500、1000及び2000 ppm のイソブチルアルデヒドを1日 6 時間、週5日間、105週間暴露した。	NTP. Groups of 50 male and 50 female F344/N rats were exposed to 0, 500, 1000, or 2000 ppm isobutyraldehyde by inhalation, 6 hours per day, 5 days per week, for 105 weeks
試験のタイプ		
GLP適合	はい	Yes
試験を行った年		
試験系(種／系統)	ラット/ F344/N.	Rat/ F344/N.
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
処理頻度		
対照群と処理		
試験条件	コメント:U.S. NTP (国家毒性計画)として実施された試験	Comments: Study conducted for U.S. National Toxicology Program
統計学的処理		
結果		
体重、体重増加量	生存率及び体重 暴露群とチャンバー対照群の間で生存率の差はみられなかった。試験中の雌雄ラットの平均体重はチャンバー対照群と概ね同じであった。	Survival and Body Weights No differences in survival rates between exposed and chamber control rats were found. The mean body weights of male and female rats were generally similar to those of the chamber controls throughout the study.
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
眼科学的所見(発生率、重篤度)		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)	病理学的所見 雌雄ラットにおいてイソブチルアルデヒド暴露に起因した腫瘍の発生率の増加はなかった。 イソブチルアルデヒド暴露に起因した非腫瘍性病変は鼻に限られていて、呼吸上皮の扁平上皮化生、嗅上皮の変性、化膿性炎症からなっていた。軽微から軽度の扁平上皮化生の発生率が1000と2000 ppm の雄(各々10/49及び44/50)と雌(各々9/49及び44/50)、500 ppmの雌(11/50)でチャンバー対照群(1/50、1/49)よりも有意に増加した。嗅上皮の軽微から軽度の変性が2000 ppmの雄及び雌で生じた(各々44/50及び45/50、vs. 対照群では発生なし)。化膿性炎症(鼻炎)の発生率が2000 ppm の雌雄(各々15/50及び11/50)で対照群(5/50及び2/49)と比較して増加した。	Pathology Findings No increase in neoplasm incidences that could be attributed to exposure to isobutyraldehyde was observed in male or female rats. Non-neoplastic lesions related to isobutyraldehyde exposure were limited to the nose and consisted of squamous metaplasia of the respiratory epithelium, degeneration of the olfactory epithelium, and suppurative inflammation. Incidences of minimal to mild squamous metaplasia in 1000 and 2000 ppm males (10/49 and 44/50, respectively) and females (9/49 and 44/50, respectively) and in 500 ppm females (11/50) were significantly greater than those in the chamber controls (1/50, 1/49). Minimal to mild degeneration of the olfactory epithelium occurred in the 2000 ppm males and females (44/50 and 45/50, respectively, vs. no occurrences in controls). Incidences of suppurative inflammation (rhinitis) in both sexes exposed to 2000 ppm were increased (15/50 and 11/50, respectively) compared to controls (5/50 and 2/49).
実際に摂取された量		
腫瘍発生までの時間		
用量反応性		
統計的結果		
注釈		
結論		
実験動物における発がん性の有無		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		

引用文献(元文献)	U.S. National Toxicology Program, (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.	U.S. National Toxicology Program, (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.
備考		
試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	1群雌雄各50匹のB6C3F1マウスに 0、500、1000及び2000 ppm のイソブチルアルデヒドを1日 6 時間、週5日間、105週間暴露した。	NTP. Groups of 50 male and 50 female B6C3F1 mice were exposed to 0, 500, 1000, or 2000 ppm isobutyraldehyde, 6 hours per day, 5 days per week, for 105 weeks.
試験のタイプ		
GLP適合	はい	Yes
試験を行った年		
試験系(種／系統)	B6C3F1 マウス	B6C3F1 mice.
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
処理頻度		
対照群と処理		
試験条件	コメント:U.S. NTP (国家毒性計画)として実施された試験	Comments: Study conducted for U.S. National Toxicology Program
統計学的処理		
結果		
体重、体重増加量	生存率及び体重 暴露に関連した生存率の減少が雄マウスでみられ、2000 ppm 暴露の雄の生存率はチャンバー対照よりわずかに低かった。1000あるいは2000 ppm暴露の雌マウスの平均体重が試験の2年目にチャンバー対照よりも低かった。	Survival and Body Weights There was an exposure-related decrease in survival of male mice, and the survival of males exposed to 2000 ppm was marginally lower than that of the chamber controls. The mean body weights of female mice exposed to 1000 or 2000 ppm were lower than those of the chamber controls during the second year of the study.
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
眼科学的所見(発生率、重篤度)		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)	病理学的所見 雌雄いずれにおいてもイソブチルアルデヒド暴露に起因した腫瘍はみられなかった。 イソブチルアルデヒド暴露に起因した非腫瘍性病変は鼻に限られていた。嗅上皮の変性の発生率が1000と2000 ppmの雄(11/50、45/50)及び雌(27/50、49/50)でチャンバー対照の発生率(0/50、1/50)よりも有意に増加した。	Pathology Findings No neoplasms that could be attributed to isobutyraldehyde exposure were observed in either males or females. Non-neoplastic lesions related to isobutyraldehyde exposure were limited to the nose. The incidences of olfactory epithelial degeneration in 1000 and 2000 ppm males (11/50, 45/50) and females (27/50, 49/50) were significantly greater than in the chamber controls (0/50, 1/50).
実際に摂取された量		
腫瘍発生までの時間		
用量反応性		
統計的結果		
注釈		
結論		
実験動物における発がん性の有無		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.	U.S. National Toxicology Program (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.
備考		

5-9 生殖・発生毒性(受胎能と発生毒性を含む)

REPRODUCTIVE TOXICITY(Including Fertility and Development Toxicity)

A. 受胎能 FERTILITY

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	NTPの13週間吸入毒性試験から精子細胞と雄生殖器重量のデータの評価。ラットに 500、1000、2000及び4000 ppm暴露したデータを評価した。	Evaluation of sperm cytology and male reproductive organ weight data from National Toxicology Program 13-week inhalation study. The data evaluated were for rats exposed to 500, 1000, 2000 and 4000 ppm.
試験のタイプ		
GLP適合	はい	Yes
試験を行った年		
試験系(種／系統)	Fischer 344 ラット	Fischer 344 rats
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
試験期間		
交配前暴露期間		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
体重、体重増加量		
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
妊娠率(妊娠個体数/交配数)		
交尾前期間(交配までの日数及び交配までの性周期回数)		
妊娠期間(妊娠0日から起算)		
妊娠指数(生存胎仔数/着床痕数)		
哺乳所見		
性周期変動		
精子所見		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
着床数		
黄体数		
未熟卵胞数		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)		
実際に摂取された量		
用量反応性		
同腹仔数及び体重		
性比		
生存率(生後4日目生存仔数/総分娩仔数)		
離乳までの分娩後生存率		
新生仔所見(肉眼的な異常)		
生後発育及び発育率		
膣開口又は精巣下降(包皮分離)		
生殖器-肛門間距離などその他の観察事項		
臓器重量		
統計的結果		
注釈	試験結果: 体重と体重増加量の減少が4000 ppmの雄でみられた(NTP, 1999)。精子の運動性は500と1000 ppm暴露のラットで有意に減少した。2000と4000 ppm暴露のラットでは対照群と同程度であった(NTP, 1999)。	Test results: Decreased body weight and body weight gains observed in males exposed to 4000 ppm (NTP, 1999). Spermatozoal motility was significantly reduced in rats exposed to 500 and 1000 ppm; sperm motility was comparable to controls in rats exposed to 2000 and 4000 ppm (NTP, 1999).
結論		
PIに対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)		
F1に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)		
F2に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)		

注釈	コメント: Morrisseyら (1988) はイソブターナルを暴露した雄ラットの精子の運動性は群間で変動がみられたが全体として陰性であると確定した (NTPとの個人的なコミュニケーション, 2004). 同一のデータセットについて、Morrisseyら (1988) は精子の密度及び形態に影響はみられず、右側精巣の重量に有意な変動はみられないが、4000ppmの暴露で右側精巣上体尾部の絶対重量が減少し(相対重量は変化なし)、右側精巣上体の絶対重量及び相対重量の減少がみられたと報告している。	Comment: Because of the variability in sperm motility observed between groups, Morrissey et al (1988) determined that the overall response of sperm motility in male rats to isobutanol was negative (personal communication with NTP, 2004). For the same data set, Morrissey et al. (1988) reported no effects on sperm density or morphology, and no significant weight change of the right testis. , There was, however, a decrease in the absolute but not relative weight of right cauda epididymis, and a decrease in the absolute and relative weight of right epididymis in rats exposed to 4000 ppm.
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献 (元文献)	U.S. National Toxicology Program, (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC. Morrissey, R., E., Schwetz, B. A., Lamb, J. C. IV, Ross, M. D., Teague, J. L. and R. W. Morris. (1988) Evaluation of rodent sperm, vaginal cytology, and reproductive organ weight data from National Toxicology Program 13-week studies. Fund. Appl. Toxicol. 11:343-358	U.S. National Toxicology Program, (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC. Morrissey, R., E., Schwetz, B. A., Lamb, J. C. IV, Ross, M. D., Teague, J. L. and R. W. Morris. (1988) Evaluation of rodent sperm, vaginal cytology, and reproductive organ weight data from National Toxicology Program 13-week studies. Fund. Appl. Toxicol. 11:343-358
備考		

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	NTPの13週間吸入毒性試験から精子細胞と雄生殖器重量のデータの評価。マウスに 500、1000及び2000 ppm暴露したデータを評価した。	Evaluation of sperm cytology and male reproductive organ weight data from National Toxicology Program 13-week inhalation study. The data evaluated were for mice exposed to 500, 1000 and 2000 ppm.
試験のタイプ		
GLP適合	はい	Yes
試験を行った年		
試験系(種／系統)	B6C3F1マウス	B6C3F1 mice.
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
試験期間		
交配前暴露期間		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
体重、体重増加量		
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
妊娠率(妊娠個体数/交配数)		
交尾前期間(交配までの日数及び交配までの性周期回数)		
妊娠期間(妊娠0日から起算)		
妊娠指数(生存胎仔数/着床痕数)		
哺乳所見		
性周期変動		
精子所見		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
着床数		
黄体数		
未熟卵胞数		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)		
実際に摂取された量		
用量反応性		
同腹仔数及び体重		
性比		
生存率(生後4日目生存仔数/総分娩仔数)		
離乳までの分娩後生存率		
新生仔所見(肉眼的な異常)		
生後発育及び発育率		

腔開口又は精巣下降(包皮分離)		
生殖器-肛門間距離などその他の		
観察事項		
臓器重量		
統計的結果		
注釈	試験結果: 2000 ppmの蒸気濃度まで暴露を行った雄マウスにおいて、生殖器官の絶対重量及び相対重量の変動、精子への影響はみられなかった。	Test results: Changes in absolute or relative weight of reproductive organs and effects on sperm were not observed in male mice exposed to vapor concentrations up to 2000 ppm.
結論		
Pに対するNOAEL (NOEL)又は		
LOAEL (LOEL)		
F1に対するNOAEL (NOEL)又は		
LOAEL (LOEL)		
F2に対するNOAEL (NOEL)又は		
LOAEL (LOEL)		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Morrissey, R. E., Schwetz, B. A., Lamb, J. C. IV, Ross, M. D., Teague, J. L. and R. W. Morris. (1988) Evaluation of rodent sperm, vaginal cytology, and reproductive organ weight data from National Toxicology Program 13-week studies. Fund. Appl. Toxicol. 11:343-358 U.S. National Toxicology Program, (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.	Morrissey, R. E., Schwetz, B. A., Lamb, J. C. IV, Ross, M. D., Teague, J. L. and R. W. Morris. (1988) Evaluation of rodent sperm, vaginal cytology, and reproductive organ weight data from National Toxicology Program 13-week studies. Fund. Appl. Toxicol. 11:343-358 U.S. National Toxicology Program, (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.
備考		

試験物質名	プロピオンアルデヒド	Propionaldehyd
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	OECD 反復/生殖・発生併合毒性試験(1世代) 雄では52日間連続、雌では交配前、交配中から妊娠20日まで、0、150、750、1500 ppmの濃度で6 時間/日吸入暴露を行った。	OECD combined repeated dose/reproductive toxicity study (one generation). Inhalation exposure to 0, 150, 750, 1500 ppm, 6 hr/day for 52 consecutive days for males and females prior to and during mating and through gestation day 20 in females.
試験のタイプ		
GLP適合	はい	Yes
試験を行った年		
試験系(種／系統)	Sprague-Dawley ラット	Sprague-Dawley rats.
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
溶媒(担体)		
投与経路		
試験期間		
交配前暴露期間		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
体重、体重増加量		
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
妊娠率(妊娠個体数/交配数)		
交尾前期間(交配までの日数及び交配までの性周期回数)		
妊娠期間(妊娠0日から起算)		
妊娠指数(生存胎仔数/着床痕数)		
哺乳所見		
性周期変動		
精子所見		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
尿検査所見(発生率、重篤度)		
死亡数(率)、死亡時間		
剖検所見(発生率、重篤度)		
着床数		
黄体数		
未熟卵胞数		
臓器重量		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)		
実際に摂取された量		
用量反応性		
同腹仔数及び体重		

性比		
生存率(生後4日目生存仔数/総分娩仔数)		
離乳までの分娩後生存率		
新生仔所見(肉眼的な異常)		
生後発育及び発育率		
膈開口又は精巣下降(包皮分離)		
生殖器-肛門間距離などその他の観察事項		
臓器重量		
統計的結果		
注釈	試験結果: 生殖指標のいずれにおいても有意な影響はみられなかった。仔動物の外表検査は特に異常はなかった。生殖・発生のNOAEL は1500 ppm (試験した最高暴露量) 超であることが示された。	Test results: No significant effects were noted for any reproductive parameters. External examination of the offspring was unremarkable. A reproductive and developmental NOAEL of >1500 ppm (highest exposure tested) was indicated.
結論		
PIに対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)		
F1に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)		
F2に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)		
注釈		
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文獻)	Union Carbide Corporation. 1992. Bushy Run Research Center Report 91U0086. Draft. June 17.	Union Carbide Corporation. 1992. Bushy Run Research Center Report 91U0086. Draft. June 17.
備考		

B. 発生毒性

DEVELOPMENTAL TOXICITY

試験物質名	イソブタナール	Isobutanol
CAS番号		
純度等		
注釈		
方法		
方法／ガイドライン	OECDガイドライン412; 日本/MAFF ガイドライン; U.S. EPA TSCA 40 CFR § 798.2450; EECガイドライン 92/69/EEC ラットに妊娠6日から15日の期間、1000、2500及び4000 ppm の濃度で1日あたり6時間暴露した。	OECD Guideline 412; Japan/MAFF Guideline; U.S. EPA TSCA 40 CFR § 798.2450; EEC Guideline 92/69/EEC. Rats were exposed to concentrations of 1000, 2500 or 4000 ppm 6-hours a day on days 6 through 15 of gestation.
GLP適合	はい	Yes
試験を行った年		
試験系(種／系統)	Wistar ラット (交配雌25匹/暴露濃度)	Wistar Rats (25 mated females per exposure concentration)
性別(雄:M、雌:F)		
投与量		
各用量群(性別)の動物数		
投与経路		
試験期間		
交配前暴露期間		
試験条件		
統計学的処理		
結果		
死亡数(率)、死亡時間		
用量あたり妊娠数		
流産数		
早期/後期吸収数		
着床数		
黄体数		
妊娠期間(妊娠0日から起算)		
体重、体重増加量		
摂餌量、飲水量		
臨床所見(重篤度、所見の発現時期と持続時間)		
血液学的所見(発生率、重篤度)		
血液生化学的所見(発生率、重篤度)		
剖検所見(発生率、重篤度)		
臓器重量(総子宮量への影響)		
病理組織学的所見(発生率、重篤度)		
同腹仔数及び体重		
生存数(生存胎仔数及び胎仔数)		
性比		
生存率(生後4日目生存仔数/総分娩仔数)		
生後発育		
分娩後生存率		
肉眼的異常(外表観察、内臓標本、骨格標本)		

実際に投与された量		
用量反応性		
統計的結果		
注釈	<p>母動物の一般毒性：体重増加量の減少、鼻粘膜の病変妊娠及び同腹仔のデータ：最高暴露濃度まで物質と関連した影響はなかった。</p> <p>胎仔データ（生存/死亡、性、外表異常、軟組織及び骨格異常）：最高暴露濃度まで物質と関連した影響はなかった。</p>	<p>Maternal general toxicity: Decreased body weight gain; Lesions of nasal mucosa</p> <p>Pregnancy and litter data: No substance related effects up to and including highest exposure concentration</p> <p>Foetal data (live/dead, sex, external defects, soft tissue and skeletal defects): No substance related effects up to and including highest exposure concentration</p>
結論		
PIに対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	母動物に対するNOAEL: 3 mg/L (1000 ppm)	NOAEL for maternal animals: 3 mg/L (1000 ppm)
F1に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)	仔動物に対するNOAEL: 12 mg/L (4000 ppm)	NOAEL for offspring: 12 mg/L (4000 ppm)
F2に対するNOAEL (NOEL)又はLOAEL (LOEL)		
注釈	コメント: OECD/SIDSプログラムのために行われた試験	Comments: Study conducted for OECD/SIDS Program
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Garmer, A. O., Hellwig, J and B. Hildebrand (1996) "Isobutyraldehyde - Prenatal vapor inhalation Toxicity Study in Wistar Rats" BASF Aktiengesellschaft Department of Toxicology Project No.: 31R0140/93049. Ludwigshafen, Germany.	Garmer, A. O., Hellwig, J and B. Hildebrand (1996) "Isobutyraldehyde - Prenatal vapor inhalation Toxicity Study in Wistar Rats" BASF Aktiengesellschaft Department of Toxicology Project No.: 31R0140/93049. Ludwigshafen, Germany.
備考		

5-10 その他関連情報
OTHER RELEVANT INFORMATION

5-11 ヒト暴露の経験
EXPERIENCE WITH HUMAN EXPOSURE

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
製造／加工／使用情報		
研究デザイン		
仮説検証		
データ収集方法		
被験者の説明		
暴露期間		
測定又は評価曝露データ		
結果		
統計的結果		
発病頻度		
相関		
分布		
研究提供者等		
注釈		
結論		
結論		
注釈	水溶液の臭気閾値は健常人で2.3ppb、無嗅覚症患者で1190ppb。	Comment: Odor threshold of aqueous solutions for normal individuals, 2.3 ppb, for anosmic individuals, 1190 ppb.
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Amoore, J. E., Forrester., L. J. and P. Pelosi (1976) Specific anosmia to isobutyraldehyde: The malty primary odor". Chem. Senses Flavor 2:17-25.	Amoore, J. E., Forrester., L. J. and P. Pelosi (1976) Specific anosmia to isobutyraldehyde: The malty primary odor". Chem. Senses Flavor 2:17-25.
備考		

試験物質名		
CAS番号		
純度等		
注釈		
製造／加工／使用情報		
研究デザイン		
仮説検証		
データ収集方法		
被験者の説明		
暴露期間		
測定又は評価曝露データ		
結果		
統計的結果		
発病頻度		
相関		
分布		
研究提供者等		
注釈		
結論		
結論		

注釈	210ppm (620mg/m ³) のイソブチルアルデヒドに30分間曝露した15名の男性被験者で刺激性は認められなかったが、一部の被験者が悪心を訴え、1名が嘔吐した。	Comment: No irritation was experienced by 15 males exposed to 210 ppm (620 mg/m ³) of isobutyraldehyde for 30 minutes, however, nausea was noted by some subjects and one subject vomited.
信頼性		
信頼性の判断根拠		
出典		
引用文献(元文献)	Sim, V.M. and Pattie, R.E. (1957) Effect of possible smog irritants on human subjects. J. Amer. Med. Assoc. 165: 1908-1913. cited in: American Industrial Hygiene Association (2002) Workplace Environmental Exposure Level Guide for Isobutyraldehyde. American Industrial Hygiene Association, Fairfax, VA.	Sim, V.M. and Pattie, R.E. (1957) Effect of possible smog irritants on human subjects. J. Amer. Med. Assoc. 165: 1908-1913. cited in: American Industrial Hygiene Association (2002) Workplace Environmental Exposure Level Guide for Isobutyraldehyde. American Industrial Hygiene Association, Fairfax, VA.
備考		

6 参考文献(以下に欄を追加の上、一文献について一行にて一覧を記載)

文献番号(半角数字: 自動的に半角になります)	詳細(OECD方式での記入をお願いします。下の記入例参照。)
	Aeschbacher, H. U., Wolleb, U., Loliger, J., Spadone, J. C. and R. Liardon (1989) "Contribution of Coffee Aroma Constituents to the Mutagenicity of Coffee". <i>Fd. Chem. Toxic.</i> 27:227-232.
	American Industrial Hygiene Association (AIHA). (2002) <i>AIHA Workplace Environmental Exposure Level Guide for Isobutyraldehyde</i> . American Industrial Hygiene Association, Fairfax, VA.
	American Industrial Hygiene Association (AIHA) (2003) <i>The AIHA Emergency Response Planning Guidelines and Workplace Environmental Exposure Level Guides Handbook</i> . American Industrial Hygiene Association, Fairfax, VA.
	Amoore, J. E., Forrester, L. J. and P. Pelosi (1976) Specific anosmia to isobutyraldehyde: The malty primary odor". <i>Chem. Senses Flavor</i> 2:17-25.
	BASF AG, unpublished reports. Ecology Laboratory Project Reports, No. 0080/88; 1023/88; 1012/88; 330168
	BASF AG (1976) <i>Labor Oekologie; unveroeffentlichte untersuchung.</i>
	BASF AG (1977) <i>Labor Oekologie; unveroeffentlichte untersuchung.</i>
	Brabec, M. J. (1981) "Chapter 37: Aldehydes and Acetals in <i>Patty's Industrial Hygiene and Toxicology</i> , 3rd revised edition. Vol. 2A., Clayton, G. D. and F. E. Clayton, Eds. John Wiley & Sons, New York. p. 2643.
	Deneer, J. W., Seinen, W. and J. L. M. Hermens (1988) "The Acute Toxicity of Aldehydes to the Guppy". <i>Aqu. Tox.</i> 12:185-192.
	DiVincenzo, G. D. and M. L. Hamilton (1979) "Metabolic Fate of [1-14C]Isobutyric Acid in the Rat" <i>Toxicol. Appl. Pharmacol.</i> 47: 609-612.
	Eastin, W. (1990) "Thirteen-Week Subchronic Study in F344 Rats: Isobutyraldehyde" National Toxicology Program (In Letter November 29, 1990 to Mr. T. J. Cawley, Union Carbide Corporation.)
	Ewing, B.B., et al. 1977. Monitoring to detect previously unrecognized pollutants in surface waters. Appendix, Organic Analysis Data, USEP 560/6-77-015, Washington, DC. (As cited in HSDB, 2002)
	Furia, T.E., and Bellanca, N. (eds) (1975). <i>Fenaroli's Handbook of Flavor Ingredients</i> , 2nd Edition, Volume 2, p.295. CRC Press, Cleveland, OH..
	Florin, I., Rutberg, L., Curvall, M. and C. R. Enzell (1980) Screening of tobacco smoke constituents for mutagenicity using the Ames' test. <i>Toxicol.</i> 15: 219-232.
	Food Chemical Codex, 1972. Cited in: U.S. National Toxicology Program, (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 4472, Research Triangle Park, NC.
	Gage, J. C. (1970) The subacute inhalation toxicity of 109 industrial chemicals. <i>Brit. J. Indust. Med.</i> 27:1-18.
	Garmer, A. O., Hellwig, J and B. Hildebrand (1995) "Brief Report on the Maternal Inhalation Toxicity of Isobutyraldehyde as a vapor in Pregnant Wistar Rats" BASF Aktiengesellschaft Department of Toxicology Project No. 11R0140/93019. Ludwigshafen, Germany.
	Garmer, A. O., Hellwig, J and B. Hildebrand (1996) "Isobutyraldehyde - Prenatal vapor inhalation Toxicity Study in Wistar Rats" BASF Aktiengesellschaft Department of Toxicology Project No.: 31R0140/93049. Ludwigshafen, Germany.
	Hoechst AG (1979), unveroeffentlichte Untersuchung (RWL 26.02.79).
	HSDB (2002). Hazardous Substance Data Base, on-line file, National Library of Medicine, retrieved March 12, 2002.
	McMahon, R. E., Cline, J. C. and C. Z. Thompson (1979) Assay of 855 test chemicals in ten tester strains using a new modification of the Ames test for bacterial mutagens. <i>Cancer Res.</i> 39:683-693.
	Morrissey, R. E., Schwetz, B. A., Lamb, J. C. IV, Ross, M. D., Teague, J. L. and R. W. Morris. (1988) Evaluation of rodent sperm, vaginal cytology, and reproductive organ weight data from National Toxicology program 13-week studies. <i>Fund. Appl. Toxicol.</i> 11:343-358.
	Mortelmans, K., Haworth, S., Lawlor, T., Speck, W., Tainer, B. and E. Zeiger (1986) <i>Salmonella</i> mutagenicity tests: II. Results from the testing of 270 chemicals <i>Environ. Mut.</i> 8 (suppl.7): 1-119.
	National Fire Protection Association (2002) <i>Fire Protection Guide to Hazardous Materials</i> , 13 th Edition. National Fire Protection Association (NFPA), Quincy, MA.
	NTP (1985) National Toxicology Program, Fiscal Year 1985 Annual Plan. NTP-85-055. National Toxicology Program, U.S. Department of Health and Human Services, Public Health Service, Research Triangle Park, NC.
	NTP (1986) National Toxicology Program, Fiscal Year 1985 Annual Plan. NTP-86-086. National Toxicology Program, U.S. Department of Health and Human Services, Public Health Service, Research Triangle Park, NC.
	National Toxicology Program (1990) Assessment of Contact Hypersensitivity to Isobutyraldehyde in female B6C3F1 Mice (IBA-0-1-CNM). National Toxicology Program, Studies Conducted at Immunotoxicology Program, Medical College of Virginia, Virginia Commonwealth University, Richmond VA.
	National Toxicology Program, (1999) NTP Technical Report on the Toxicology and Carcinogenesis Studies of Isobutyraldehyde (CAS No. 78-84-2) in F344/N Rats and B6C3F1 Mice. NTP TR 472, Research Triangle Park, NC.
	Sasaki, Y. and R. Endo (1978) "Mutagenicity of Aldehydes in <i>Salmonella</i> ". <i>Mut. Res.</i> 54:251-252.
	Sim, V.M. and Pattle, R.E.(1957) Effect of possible smog irritants on human subjects. <i>J. Amer. Med. Assoc.</i> 165: 1908-1913.
	Steinhagen, W. H. and C. S. Barrow (1984) Sensory irritation structure-activity study of inhaled aldehydes in B6C3F1 and Swiss-Webster mice. <i>Toxicol. Appl. Pharmacol.</i> 72: 495-503.
	Union Carbide Corporation (1952) Mellon Institute of Industrial Research Report 15-55 dated June 30, 1952.
	Union Carbide Corporation (1978) Carnegie-Mellon Institute of Research, Chemical Hygiene Fellowship Project Report 41-39.
	Union Carbide Corporation (1979) Carnegie-Mellon Institute of Research, Chemical Hygiene Fellowship Project Report 42-50.
	Union Carbide Corporation (1980) Carnegie-Mellon Institute of Research, Chemical Hygiene Fellowship Project Report 43-61
	Union Carbide Corporation (1992) Bushy Run Research Center Report 91U0086. Draft. June 17. Verschueren, K. (1996) <i>Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals</i> , 3rd ed. pp. 1154-1155.
	Waggy, G. T. and J. R. Payne (1974) "Environmental Impact Analysis -Acute Aquatic Toxicity Testing". <i>Project Report</i> 910F44, Union Carbide Corporation, South Charleston Technical Center, South Charleston, WV.
	Woodruff, R. C., Mason, J. M. Valencia, R. and Zimmering, S. (1985) Chemical mutagenesis testing in <i>Drosophila</i> . V. Results of 53 coded compounds tested for the National Toxicology Program. <i>Environ. Mut.</i> 7:677-702.

	Zeeman, M. 1996. Review of SIDS Initial Assessment Profile for Isobutanol. Memorandum from M. Zeeman, Health and Environmental Review Division, USEPA, to O. Hernandez, Chemical Screening and Risk Assessment Division, USEPA, dated August 29, 1996.
	Zeiger, E., Anderson, B., Haworth, S., Lawlor, T. and Mortelmans, K. (1992) Salmonella mutagenicity tests: V. Results from the testing of 311 chemicals. Environ Molec Mutagen 19 (Suppl 21): 2-141.