安全データシート

2-プロピル吉草酸

改訂日：2024-01-24 版番号：1

1. 化学品及び会社情報

製品識別子

製品名	: 2-プロピル吉草酸
CB番号	: CB7149528
CAS	: 99-66-1
EINECS番号	: 202-777-3
同義語	: バルプロ酸

物質または混合物の関連する特定された用途、および推奨されない用途

関連する特定用途	: 医薬原料
推奨されない用途	: なし

会社ID

会社名	： Chemicalbook
住所	： 北京市海淀区上地十街匯煌国際1号棟
電話	： 010-86108875

2. 危険有害性の要約

GHS分類

分類実施日(物化危険性及び健康有害性)

H30.3.16、政府向けGHS分類ガイダンス (H25年度改訂版 (ver1.1):JIS Z7252:2014準拠) を使用

GHS改訂4版を使用

物理化学的危険性

-

健康に対する有害性

急性毒性(経口)　区分4

生殖毒性　区分1A 追加区分:授乳に対する又は授乳を介した影響

特定標的臓器毒性 (単回ばく露)　区分1 (中枢神経系) 区分3 (麻酔作用)

特定標的臓器毒性 (反復ばく露)　区分1 (中枢神経系、血液系、肝臓)

分類実施日(環境有害性)

H29年度 分類実施中

環境に対する有害性

分類実施中

2.2 注意書きも含むGHSラベル要素

絵表示

GHS07	GHS08

注意喚起語

危険

危険有害性情報

H302 飲み込むと有害。

H315 皮膚刺激。

H319 強い眼刺激。

H360 生殖能又は胎児への悪影響のおそれ。

注意書き

安全対策

P202 全ての安全注意を読み理解するまで取り扱わないこと。

P264 取扱い後は皮膚をよく洗うこと。

P270 この製品を使用するときに，飲食又は喫煙をしないこと。

P280 保護手袋 / 保護眼鏡 / 保護面を着用すること。

応急措置

P301 + P312 + P330 飲み込んだ場合：気分が悪いときは医師に連絡すること。口をすすぐこと。

P302 + P352 皮膚に付着した場合：多量の水で洗うこと。

P305 + P351 + P338 眼に入った場合：水で数分間注意深く洗うこと。次にコンタクトレンズを着用していて容易に外せる場合は外すこと。その後も洗浄を続けること。

P308 + P313 ばく露又はばく露の懸念が ある場合：医師の診断/手当てを受けること。

P332 + P313 皮膚刺激が生じた場合：医師の診断/手当てを受けること。

P337 + P313 眼の刺激が続く場合：医師の診断/手当てを受けること。

保管

P405 施錠して保管すること。

廃棄

P501 残余内容物・容器等は産業廃棄物として適正に廃棄すること。

2.3 他の危険有害性

なし

---

3. 組成及び成分情報

化学物質・混合物の区別	: 化学物質
化学特性(示性式、構造式 等）	: C8H16O2
分子量	: 144.21 g/mol
CAS番号	: 99-66-1
EC番号	: 202-777-3
化審法官報公示番号	: 2-608
安衛法官報公示番号	: 2-(4)-768

4. 応急措置

4.1 必要な応急手当

一般的アドバイス

医師に相談する。 この安全データシートを担当医に見せる。

吸入した場合

吸い込んだ場合、新鮮な空気の場所に移す。 呼吸していない場合には、人工呼吸を施す。 医師に相談する。

皮膚に付着した場合

石けんと多量の水で洗い流す。 医師に相談する。

眼に入った場合

多量の水で15分以上よく洗浄し、医師の診察を受けること。

飲み込んだ場合

意識がない場合、口から絶対に何も与えないこと。 口を水ですすぐ。 医師に相談する。

4.2 急性症状及び遅発性症状の最も重要な徴候症状

もっとも重要な既知の徴候と症状は、ラベル表示(項目2.2を参照)および/または項目11に記載されている

4.3 緊急治療及び必要とされる特別処置の指示

データなし

5. 火災時の措置

5.1 消火剤

消火剤

水噴霧、耐アルコール泡消火剤、粉末消火剤、二酸化炭素を使用すること。

5.2 特有の危険有害性

炭素酸化物

可燃性。

5.3 消防士へのアドバイス

消火活動時には必要に応じて 自給式呼吸装置を装着する。

5.4 詳細情報

データなし

6. 漏出時の措置

6.1 人体に対する注意事項、保護具及び緊急時措置

保護具を使用する。 蒸気、ミスト、またはガスの呼吸を避ける。 十分な換気を確保する。 安全な場所に避難する。個人保護については項目 8 を参照する。

6.2 環境に対する注意事項

安全を確認してから、もれやこぼれを止める。 物質が排水施設に流れ込まないようにする。

6.3 封じ込め及び浄化の方法及び機材

不活性の吸収材に吸収させ、有害な廃棄物として処分する。 廃棄に備え適切な容器に入れて蓋をしておく。

6.4 参照すべき他の項目

廃棄はセクション13を参照。

---

7. 取扱い及び保管上の注意

7.1 安全な取扱いのための予防措置

曝露を避けるー使用前に特別指示を受ける。皮膚や眼への接触を避けること。 蒸気や噴霧の吸い込みを避けること。注意事項は項目2.2を参照。

7.2 配合禁忌等を踏まえた保管条件

容器を密閉し、乾燥した換気の良い場所に保管する。 一度開けた容器は注意深く再度密封し、漏れを避けるためまっすぐ立てておく。

7.3 特定の最終用途

項目1.2に記載されている用途以外には、その他の特定の用途が定められていない

---

8. ばく露防止及び保護措置

8.1 管理濃度

コンポーネント別作業環境測定パラメータ

許容濃度が設定されている物質を含有していない。

8.2 曝露防止

適切な技術的管理

十分な衛生的作業を行い安全規定に従って取扱う。 休憩前や終業時には手を洗う。

保護具

眼 / 顔面の保護

顔面シールドおよび保護メガネ NIOSH（US）またはEN 166（EU）などの適切な政府機関の規格で試験され、認められた眼の保護具を使用する。

皮膚及び身体の保護具

手袋を着用して取扱う。 使用前に、必ず手袋を検査する。 （手袋外面に触れずに）適切に手袋を脱ぎ、本製品の皮膚への付着を避ける。 適用法令およびGLPに従い、使用後に汚染手袋を廃棄する。 手を洗い、乾燥させる。

選ばれた防護手袋は、EU指令2016/425の仕様と、それから派生する規格EN374を満たすものでなければならない。

フルコンタクト

材質: ニトリルゴム

最小厚: 0.11 mm

破過時間: 480 min

試験物質：Dermatril® (KCL 740 / Aldrich Z677272, Size M)

飛沫への接触

材質: ニトリルゴム

最小厚: 0.11 mm

破過時間: 480 min

試験物質：Dermatril® (KCL 740 / Aldrich Z677272, Size M)

データソース：KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, 電話 +49 (0)6659 87300, e-mail sales@kcl.de,

試験方法： EN374

EN374とは違った条件の下で、溶液の中、または他の物質と混ぜて使われる場合は、EC認可手袋の供給業者に問い合わせる。 この勧告は単なる助言であり、予想される用途の特定状況に精通した産業衛生専門家並びに安全管理者により評価されなければならない。 任意の使用方法について許可を受けていると理解すべきではない。

身体の保護

化学防護服, 特定の作業場に存在する危険物質の濃度および量に応じて、保護装置のタイプを選択しなければならない。

呼吸用保護具

リスクアセスメントによりろ過式呼吸用保護具が適切であると示されている場所では、工学的制御のバックアップとして、多目的直結式（US）またはABEK型（EN14387）呼吸用保護具カートリッジ付き全面形呼吸用保護具を使用する。呼吸用保護具が唯一の保護手段である場合、全面形送気マスクを使用する。 NIOSH（US）またはCEN（EU）などの適切な政府機関の規格で試験され、認められた呼吸用保護具および部品を使用する。

環境暴露の制御

安全を確認してから、もれやこぼれを止める。 物質が排水施設に流れ込まないようにする。

---

9. 物理的及び化学的性質

Information on basic physicochemical properties

形状	液体 (20℃、1気圧) (GHS判定)
色	無色 (HSDB (2017))
臭い	特徴的な臭い (HSDB (2017))
臭いのしきい(閾)値	情報なし
pH	情報なし

情報なし

219.5℃ (HSDB (2017))

111℃ (c.c.) (Sigma-Aldrich Japan G.K. SDS)

情報なし

該当しない

情報なし

47×10-2 mmHg (25℃) [換算値 11.3 Pa (25℃)] (HSDB (2017))

情報なし

0.904 g/m3 (25℃) (HSDB (2017))

2.0×103 mg/L (20℃) (HSDB (2017))

2.75 (HSDB (2017))

情報なし

情報なし

情報なし

融点・凝固点

情報なし

沸点、初留点及び沸騰範囲

219.5℃ (HSDB (2017))

引火点

111℃ (c.c.) (Sigma-Aldrich Japan G.K. SDS)

蒸発速度(酢酸ブチル=1)

情報なし

燃焼性(固体、気体)

該当しない

燃焼又は爆発範囲

情報なし

蒸気圧

47×10-2 mmHg (25℃) [換算値 11.3 Pa (25℃)] (HSDB (2017))

蒸気密度

情報なし

比重(相対密度)

0.904 g/m3 (25℃) (HSDB (2017))

溶解度

2.0×103 mg/L (20℃) (HSDB (2017))

n-オクタノール/水分配係数

2.75 (HSDB (2017))

自然発火温度

情報なし

分解温度

情報なし

粘度(粘性率)

情報なし

---

10. 安定性及び反応性

10.1 反応性

データなし

10.2 化学的安定性

推奨保管条件下では安定。

10.3 危険有害反応可能性

データなし

10.4 避けるべき条件

データなし

10.5 混触危険物質

強酸化剤

10.6 危険有害な分解生成物

有害な分解生成物が火があるとき生成される。 - 炭素酸化物

その他の分解生成物 - データなし

火災の場合:項目5を参照

---

11. 有害性情報

急性毒性

経口

GHS分類: 区分4 ラットのLD50値として、670 mg/kg (IPCS, PIM 551 (1997)、HSDB (Access on August 2017)) との報告に基づき、区分4とした。

経皮

GHS分類: 分類できない データ不足のため分類できない。

吸入:ガス

GHS分類: 分類対象外 GHSの定義における液体である。

吸入:蒸気

GHS分類: 分類できない データ不足のため分類できない。

吸入:粉じん及びミスト

GHS分類: 分類できない データ不足のため分類できない。

皮膚腐食性及び皮膚刺激性

GHS分類: 分類できない データ不足のため分類できない。

眼に対する重篤な損傷性又は眼刺激性

GHS分類: 分類できない データ不足のため分類できない。

呼吸器感作性

GHS分類: 分類できない データ不足のため分類できない。

皮膚感作性

GHS分類: 分類できない データ不足のため分類できない。

生殖細胞変異原性

GHS分類: 分類できない データ不足のため分類できない。すなわち、in vivoでは優性致死試験及び染色体異常試験で陰性の情報がある (Brambilla and Martelli, Mutation Res., 209-229, 2009)。In vitroでは、細菌の復帰突然変異試験で陰性である (NTP DB (Access on August 2017))。In vivo試験の情報はPDR (Physicians' Desk Reference) からの情報である。

発がん性

GHS分類: 分類できない データ不足のため分類できない。なお、ラット及びマウスを用いた2年間投与試験 (投与経路: 記載ないが、恐らく経口経路、用量: 80~170 mg/kg/day) において、雄ラットに高用量で皮下線維腫の発現頻度増加、雄マウスに肺の良性腺腫の用量依存的な発現頻度増加がみられたが、これらの知見のヒトでの重要性は不明であるとの記述がある (IPCS, PIM 551 (1997))。

生殖毒性

GHS分類: 区分1A、追加区分:授乳に対する又は授乳を介した影響 本物質のナトリウム塩 (バルプロ酸ナトリウム) は抗てんかん・躁病・鬱状態、偏頭痛治療剤として用いられており (医療用医薬品集2017 (2016))、バルプロ酸ナトリウムの毒性情報が本物質の分類に適用可能と考えられた。すなわち、バルプロ酸ナトリウムは妊婦又は妊娠している可能性のある婦人には原則禁忌とされている (医療用医薬品集2017 (2016))。てんかん患者の妊婦における本物質の使用と出生児の先天性奇形 (特に神経管欠損) との間に相関性があるとの複数の報告があり、動物実験ではラット、マウスの生殖毒性試験で胎児への悪影響がみられると記述されている (IPCS, PIM 551 (1997))。また、バルプロ酸ナトリウムはヒト母乳に移行することがあり、授乳婦に投与する場合には授乳を避けさせるとの記述がある (医療用医薬品集2017 (2016))。以上より、本項は区分1Aとし、授乳影響を追加した。

特定標的臓器毒性(単回ばく露)

GHS分類: 区分1 (中枢神経系)、区分3 (麻酔作用) 本物質はGABAトランスアミナーゼを阻害し、抑制性神経伝達物質であるGABAの脳内での濃度を増加させる結果、神経興奮を抑制するとの記載がある (IPCS, PIM 551 (1997))。ヒトでは、摂取の回数などの詳細は不明であるが、本物質の経口摂取により消化管の不調と中枢神経系抑制 (錯乱、見当識障害、鈍麻、呼吸不全を伴う昏睡) を起こし、頻脈を伴う血圧低下とQT間隔の延長が起こる場合もあるとの記載がある (HSDB (Access on August 2017))。本物質の単回ばく露の影響に関しては他に情報がないが、本物質のナトリウム塩であるバルプロ酸ナトリウム (CAS番号 1069-66-5) は、抗てんかん、躁病・躁状態、片頭痛治療剤として用いられており、誤飲又は自殺企図による過量摂取が意識障害 (傾眠、昏睡)、痙攣、呼吸抑制、高アンモニア血症、脳水腫を起こした事例が報告されている (医療用医薬品集2017 (2016))。また、16歳の女性てんかん患者がバルプロ酸ナトリウムの錠剤30 gを摂取後に傾眠を発症したが、治療により12時間後に回復したとの報告及び15歳の少女がバルプロ酸ナトリウム (量不明) の摂取後、昏睡状態となり心肺停止により死亡したとの報告がある (いずれもIPCS, PIM 551 (1997))。これらの情報に基づき、バルプロ酸ナトリウムは平成23年度GHS分類において区分1 (中枢神経系) と分類されている。以上の情報は、本物質のみの情報ではなく本物質のナトリウム塩を含んだ情報と思われるが副作用は本物質に起因したと考えられる。したがって、上記の情報を基に分類を行い、区分1 (中枢神経系)、区分3 (麻酔作用) とした。

特定標的臓器毒性(反復ばく露)

GHS分類: 区分1 (中枢神経系、血液系、肝臓) 本物質のナトリウム塩は抗てんかん、躁病・躁状態、片頭痛治療剤として用いられている (医療用医薬品集2017 (2016))。 ヒトについては、慢性使用の患者では致命的な肝不全の報告があり、膵炎が通常の治療用量においても報告されている。消化器系への影響で最も一般的に報告されている有害作用は、食欲不振、吐き気及び嘔吐である。中枢神経系の影響は眠気であり、無関心、離脱、錯乱、不穏状態、多動も含まれ、頻繁ではないがてんかん発作や昏睡が現れることがある。鎮静作用は、薬物が他の抗てんかん

薬と一緒に使用される場合により顕著である。造血系の影響には、血小板減少症、フィブリノゲンレベルの低下を伴う出血時間及び活性化部分トロンボプラスチン時間の異常、プロトンビン時間の延長などがあり、挫傷、斑状疱疹、血腫及び鼻出血をもたらすとの記載がある (IPCS, PIM 551 (1997)、HSDB (Access on August 2017))。 また、医療用医薬品集2017 (2016) には、重篤な副作用として、劇症肝炎等の重篤な肝障害、高アンモニア血症を伴う意識障害、溶血性貧血、赤芽球癆、汎血球減少、重篤な血小板減少、顆粒球減少、急性膵炎、間質性腎炎、ファンコニー症候群、中毒性表皮壊死融解症、皮膚粘膜眼症候群 (スティーブン-ジョンソン症候群)、過敏症症候群、脳の萎縮、認知症様症状、パーキンソン様症状、横紋筋融解症、抗利尿ホルモン不適合分泌症候群、間質性肺炎、好酸球性肺炎が現れることがあるとしており、副作用の発生頻度では血液系、精神神経系、消化器系、肝臓、過敏症、その他として高アンモニア血症の報告が多くみられている。
以上の情報は、本物質のみの情報ではなく本物質のナトリウム塩を含んだ情報と思われるが副作用は本物質に起因したと考えられることから上記情報を基に重篤度、発生頻度等を考慮して分類を行った。 したがって、区分1 (中枢神経系、血液系、肝臓) とした。 なお、本物質のナトリウム塩であるバルプロ酸ナトリウム (CAS番号 1069-66-5) は、本邦のGHS分類 (平成23年度) において区分1 (中枢神経系、肝臓、血液系) に分類されている。

吸引性呼吸器有害性

GHS分類: 分類できない データ不足のため分類できない。

---

12. 環境影響情報

12.1 生態毒性

ミジンコ等の水生無脊

止水式試験 EC50 - Daphnia magna (オオミジンコ) - 122.8 mg/l - 48 h

椎動物に対する毒性

備考: (ECHA)

藻類に対する毒性

止水式試験 ErC50 - Pseudokirchneriella subcapitata (緑藻) - > 100 mg/l - 72
h
(OECD 試験ガイドライン 201)

備考: 値は以下の物質と同様に得られる。

微生物毒性

止水式試験 EC50 - 活性汚泥 - > 1,000 mg/l - 3 h

(OECD 試験ガイドライン 209)

備考: 値は以下の物質と同様に得られる。

12.2 残留性・分解性

生分解性

結果: 48 % - 易分解性ではない。

(OECD テスト ガイドライン 301B)

12.3 生体蓄積性

データなし

12.4 土壌中の移動性

データなし

12.5 PBT および vPvB の評価結果

化学物質安全性評価が必要ではない/行っていないため、PBT/vPvB評価データはない。

13. 廃棄上の注意

13.1 廃棄物処理方法

製品

免許を有する廃棄物処理業者に、余剰物で再使用不可の溶液として処理を依頼する。汚染容器及び包装製品入り容器と同様に処分する。

14. 輸送上の注意

14.1 国連番号

ADR/RID （陸上規制）: - IMDG （海上規制）: - IATA-DGR （航空規制）: -

14.2 国連輸送名

ADR/RID （陸上規制）: 非危険物

IMDG （海上規制）: Not dangerous goods

IATA-DGR （航空規制）: Not dangerous goods

14.3 輸送危険有害性クラス

ADR/RID （陸上規制）: - IMDG （海上規制）: - IATA-DGR （航空規制）: -

14.4 容器等級

ADR/RID （陸上規制）: - IMDG （海上規制）: - IATA-DGR （航空規制）: -

14.5 環境危険有害性

ADR/RID: 非該当 IMDG 海洋汚染物質(該当・非該当): IATA-DGR （航空規制）: 非該当

非該当

14.6 特別の安全対策

なし

14.7 混触危険物質

強酸化剤

15. 適用法令

消防法

第4類引火性液体、第三石油類非水溶性液体(法第2条第7項危険物別表第1・第4類)

海洋汚染防止法

有害液体物質(Y類物質)(施行令別表第1)

16. その他の情報

略語と頭字語

ADR: 道路による危険物の国際輸送に関する欧州協定

CAS: ケミカルアブストラクトサービス

EC50: 有効濃度 50%

IATA：国際航空運送協会

IMDG: 国際海上危険物

LC50: 致死濃度 50%

LD50: 致死量 50%

RID: 鉄道による危険物の国際運送に関する規則

STEL: 短期暴露限度

TWA: 時間加重平均

参考文献

【1】労働安全衛生法 ウェブサイト https://www.mhlw.go.jp

【2】化学物質審査規制法（化審法）https://www.env.go.jp

【3】化学物質排出把握管理促進法（PRTR法） https://www.chemicoco.env.go.jp

【4】NITE化学物質総合情報提供システム （NITE-CHRIP）https://www.nite.go.jp/

【5】カメオケミカルズ公式サイト http://cameochemicals.noaa.gov/search/simple

【6】ChemIDplus、ウェブサイト http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/chemidlite.jsp

【7】ECHA - 欧州化学物質庁、ウェブサイト https://echa.europa.eu/

【8】eChemPortal - OECD 化学物質情報グローバルポータル、ウェブサイトhttp://www.echemportal.org/echemportal/index?pageID=0&request_locale=en

【9】ERG - 米国運輸省による緊急対応ガイドブック、ウェブサイトhttp://www.phmsa.dot.gov/hazmat/library/erg

【10】有害物質に関するドイツ GESTIS データベース、ウェブサイトhttp://www.dguv.de/ifa/gestis/gestis-stoffdatenbank/index-2.jsp

【11】HSDB - 有害物質データバンク、ウェブサイト https://toxnet.nlm.nih.gov/newtoxnet/hsdb.htm

【12】IARC - 国際がん研究機関、ウェブサイト http://www.iarc.fr/

【13】IPCS - The International Chemical Safety Cards (ICSC)、ウェブサイトhttp://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.home

【14】Sigma-Aldrich、ウェブサイト https://www.sigmaaldrich.com/

免責事項：
本MSDS中の情報は指定された製品にのみ適用され、特に規定がない限り、本製品とその他の物質の混合物には適用されません。本MSDSは、製品使用者の適切な専門的なトレーニングを受けた者にのみ製品安全情報を提供します。本MSDSの使用者は、本SDSの適用性について独自に判断しなければならない。本MSDSの著者は、本MSDSの使用によるいかなる傷害にも責任を負わない。