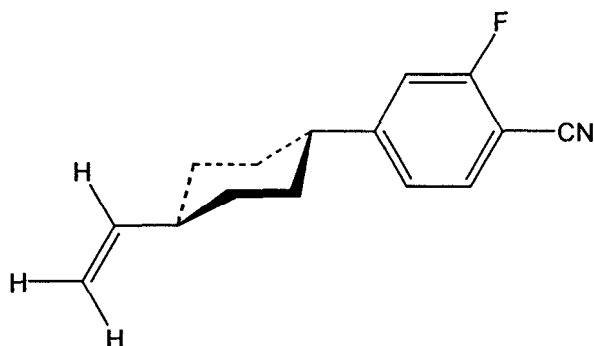


2-フルオロ-4-(トランス-4-ビニルシクロヘキシル)ベンズニトリル及びこれを含有する製剤の毒物及び劇物取締法に基づく劇物からの除外について



名称 (英語名) 2-fluoro-4-(trans-4-vinylcyclohexyl) benzonitrile
(日本名) 2-フルオロ-4-(トランス-4-ビニルシクロヘキシル)ベンズニトリル

経緯

上記化学物質は、有機シアン化合物として劇物に指定されているが、今般毒性データが提出されたものである。

用途

主な用途としては、液晶素子に用いられている。

物理化学的性状

別紙1を参照

毒性

別紙2を参照

事務局案

2-フルオロ-4-(トランス-4-ビニルシクロヘキシル)ベンズニトリル及びこれを含有する製剤は、「劇物」から除外することが適当と思われる。

物理的・化学的性質（原体）

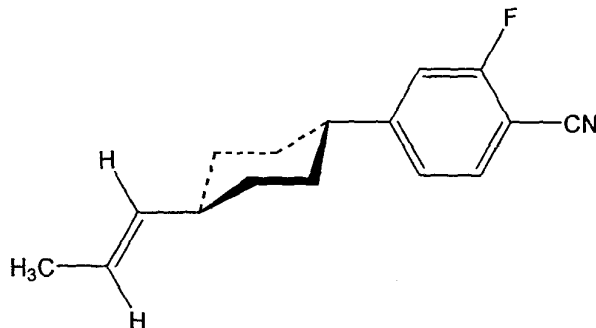
CAS 番号	157453-50-4
化学式 分子式	$C_{15}H_{16}FN$
分子量	229.3
物理化学的性状	
性状	白色固体
沸点 (°C)	300°C以上（正確な沸点は未確定）
融点 (°C)	50
密度 (g/cm ³)	
蒸気圧 (20°C)	
溶解性	水にほとんど溶けない
安定性	室温で安定
反応性	水や空気には反応しない
揮発性	
引火性及び発火性	
その他	不揮発性

毒性

(1) 原体

試験の種類	供試動物	試験結果	備考
急性経口毒性	ラット	LD ₅₀ : >♂♀2,000mg/kg	OECD TG 423
急性経皮毒性	-	-	-
急性吸入毒性	ラット	LC ₅₀ : >♂♀5.193mg/L(4hr) ダスト	OECD TG 403
皮膚・粘膜刺激性	ウサギ	刺激性なし	OECD TG 404

2-フルオロ-4-[トランス-4-(E)-(プロパー1-エン-1-イル)シクロヘキシル]ベンゾニトリル及びこれを含有する製剤の毒物及び劇物取締法に基づく劇物からの除外について



名称 (英語名) 2-fluoro-4-[trans-4-(E)-(prop-1-en-1-yl)cyclohexyl]benzotrile
(日本名) 2-フルオロ-4-[トランス-4-(E)-(プロパー1-エン-1-イル)シクロヘキシル]ベンゾニトリル

経緯

上記化学物質は、有機シアン化合物として劇物に指定されているが、今般毒性データが提出されたものである。

用途

主な用途としては、液晶素子に用いられている。

物理化学的性状

別紙1を参照

毒性

別紙2を参照

事務局案

2-フルオロ-4-[トランス-4-(E)-(プロパー1-エン-1-イル)シクロヘキシル]ベンゾニトリル及びこれを含有する製剤は、「劇物」から除外することが適当と思われる。

物理的・化学的性質（原体）

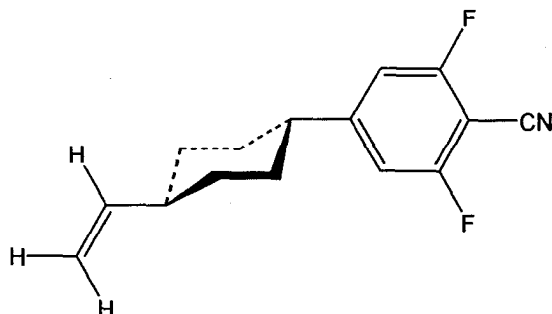
CAS 番号	157453-54-8
化学式 分子式	$C_{16}H_{18}FN$
分子量	243.32
物理化学的性状	
性状	白色固体
沸点 (°C)	300°C以上（正確な沸点は未確定）
融点 (°C)	41.9
密度 (g/cm ³)	
蒸気圧 (20°C)	
溶解性	水にほとんど溶けない
安定性	室温で安定
反応性	水や空気に反応しない
揮発性	
引火性及び発火性	
その他	不揮発性

毒性

(1) 原体

試験の種類	供試動物	試験結果	備考
急性経口毒性	ラット	LD ₅₀ : >♂♀2,000mg/kg	OECD TG 423
急性経皮毒性	-	-	-
急性吸入毒性	ラット	LC ₅₀ : >♂♀5.124mg/L(4hr) ダスト	OECD TG 403
皮膚・粘膜刺激性	ウサギ	刺激性なし	OECD TG 404

2, 6-ジフルオロ-4-(トランス-4-ビニルシクロヘキシル) ベンゾニトリル及びこれを含有する製剤の毒物及び劇物取締法に基づく劇物からの除外について



名称 (英語名) 2,6-difluoro-4-(trans-4-vinylcyclohexyl) benzonitrile
(日本名) 2, 6-ジフルオロ-4-(トランス-4-ビニルシクロヘキシル) ベンゾニトリル

経緯

上記化学物質は、有機シアン化合物として劇物に指定されているが、今般毒性データが提出されたものである。

用途

主な用途としては、液晶素子に用いられている。

物理化学的性状

別紙 1 を参照

毒性

別紙 2 を参照

事務局案

2, 6-ジフルオロ-4-(トランス-4-ビニルシクロヘキシル) ベンゾニトリル及びこれを含有する製剤は、「劇物」から除外することが適当と思われる。

物理的・化学的性質（原体）

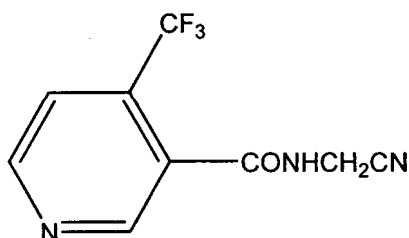
CAS 番号	337366-98-0
化学式 分子式	$C_{15}H_{15}F_2N$
分子量	247.29
物理化学的性状	
性状	白色固体
沸点 (°C)	300°C以上（正確な沸点は未確定）
融点 (°C)	39.5
密度 (g/cm ³)	
蒸気圧 (20°C)	
溶解性	水にほとんど溶けない
安定性	室温で安定
反応性	水や空気に反応しない
揮発性	
引火性及び発火性	
その他	不揮発性

毒性

(1) 原体

試験の種類	供試動物	試験結果	備考
急性経口毒性	ラット	LD ₅₀ : >♂♀2,000mg/kg	OECD TG 423
急性経皮毒性	-	-	-
急性吸入毒性	ラット	LC ₅₀ : >♂♀5.129mg/L(4hr) ダスト	OECD TG 403
皮膚・粘膜刺激性	ウサギ	刺激性なし	OECD TG 404

N-シアノメチル-4-(トリフルオロメチル)ニコチンアミド (別名フロニカミド)
及びこれを含有する製剤の毒物及び劇物取締法に基づく劇物からの
除外について



名称

(英語名) *N*-cyanomethyl-4-(trifluoromethyl)nicotinamide

(日本名) *N*-シアノメチル-4-(トリフルオロメチル)ニコチンアミド

別名 フロニカミド(Flonicamid:ISO 名登録済み)

経緯

上記化学物質は、新規農薬として農薬取締法に基づく農薬登録の申請があったことに伴い、毒物又は劇物として該当性の照会を農林水産省から受けたものである。

用途

主な用途として、農薬（殺虫剤）に用いられる。

物理化学的性状

別紙1を参照

毒性

別紙2を参照

事務局案

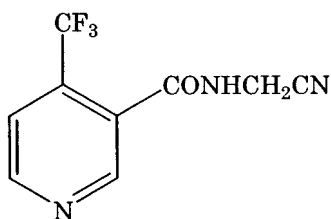
N-シアノメチル-4-(トリフルオロメチル)ニコチンアミド (別名フロニカミド) 及びこれを含有する製剤は、「劇物」から除外することが適当と思われる。

1. 物理的・化学的性状

1.1 有効成分の名称及び化学構造

- 1) 一般名 フロニカミド
 flonicamid (ISO名)
- 2) 別名 商品名 ウララ
 試験名 IKI-220
- 3) 化学名
 IUPAC *N*-シアノメチル-4-(トリフルオロメチル)ニコチンアミド
 N-cyanomethyl-4-(trifluoromethyl)nicotinamide
 CA *N*-(シアノメチル)-4-(トリフルオロメチル)-3-ピリジンカルボキサミド
 N-(cyanomethyl)-4-(trifluoromethyl)-3-pyridinecarboxamide

4) 構造式



- 5) 分子式 C₉H₆F₃N₃O
6) 分子量 229.2
7) CAS No. 158062-67-0

1.2 有効成分の物理的・化学的性状

- 1) 外観・臭気 白色固体（粉末）、無臭 （官能法）
- 2) 密度 1.54 g/cm³ (20°C) 比重ビン法 (OECD ガイドライン No. 109)
- 3) 融点 157.5°C DSC 法 (OECD ガイドライン No.102)
- 4) 沸点 DSC のデータでは 330°C付近で分解のため、沸点又は沸点範囲を求めることはできなかった。 (OECD ガイドライン No.103)
- 5) 蒸気圧 2.55 × 10⁻⁶ Pa (25°C) 気体飽和法 (OPPTS ガイドライン 830.7950)

6) 溶解度 水溶解度(20°C) フラスコ振とう法 (OPPTS ガイドライン 830.7840)
脱イオン水: 5.2 g/l (20°C)

有機溶媒 (20°C) フラスコ振とう法 (OPPTS ガイドライン 830.7840)			
アセトン	186.7g/l	酢酸エチル	33.9g/l
メタノール	110.6g/l	ジクロロメタン	4.5g/l
トルエン	0.55g/l	ヘキサン	0.0002g/l
n-オクタノール	3.0g/l	アセトニトリル	146.1g/l
2-プロパノール	18.7g/l		

7) 解離定数 $pK_a=11.60 \pm 0.03$ (20±1°C) 吸光光度法 (OECD ガイドライン 112)

8) 分配係数 (n-オクタノール/水) $\log P_{ow} = 0.3$
(液体クロマトグラフ法(OECD ガイドライン No. 117)、29.8°C)

9) 安定性

① 熱 DSC で 25°C から 150°C まで測定したが、この測定中に、顕著な被験物質の吸熱又は発熱作用は認められなかった。また、測定後、重量変化と外観上に変化が認められなかったことより、この試験条件下では空气中で熱に安定であると考えられた。

(DSC 法 (OECD ガイドライン No.113))

② 加水分解性 酸、アルカリ 25°C 暗所における希薄水溶液中での pH と半減期は次の通り。

pH	4	5	7	9
半減期(日)	安定	安定	安定	204

③ 水中光分解性

フロニカミドの滅菌蒸留水中における光照射 30 日後の残存率は 96%、滅菌河川水中における光照射 30 日後の残存率は 90%であった。一方、暗所対照区のフロニカミドは、滅菌蒸留水及び滅菌河川水中における 30 日後の残存率がいずれも 98%であった。暗所対照区のフロニカミドは試験期間中を通して安定であった。

2. 毒性

<毒性試験一覧表>

・フロニカミド原体

試験の種類・ 期間	供試 動物	1群当り 供試数	投与 方法	投与量 (mg/kg)	LD50 値または 無毒性量 (mg/kg)	備考 (報告年)
急性毒性 14日間観察	ラット	♂ 5 ♀ 5	経口	♂♀ 625、1,250、 2,500、5,000	♂ 884 ♀ 1,768	(2001)
急性毒性 14日間観察	ラット	♂ 5 ♀ 5	経皮	♂ 5,000 ♀ 5,000	♂ >5,000 ♀ >5,000	(2000)
急性毒性 14日間観察	ラット	♂ 5 ♀ 5	吸入 4時間 (ガス)	♂ 4.9 mg/L ♀ 4.9 mg/L	♂ >4.9 mg/L ♀ >4.9 mg/L	(2000)
皮膚刺激性 72時間観察	ウサギ	6	貼付	0.5g/ 背部4時間貼付	刺激性なし	(2000)
眼刺激性 72時間観察	ウサギ	非洗眼 6		0.07g/右眼 結膜囊	弱い刺激性	(2000)