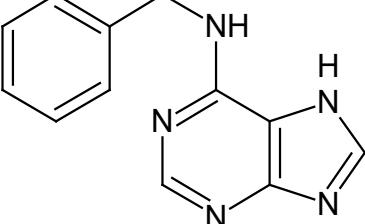


ベンジルアデニン（別名ベンジルアミノプリン）

I. 農薬の製造に用いられる農薬原体の規格（案）

| 有効成分 | | | |
|----------|---------------------------|--|-------------|
| 一般名 | 化学名 | 構造式 | 含有濃度 |
| ベンジルアデニン | 6-(<i>N</i> -ベンジルアミノ)プリン |  | 970 g/kg 以上 |

農薬原体の分析法

農薬原体中のベンジルアデニンの分析法

ベンジルアデニンの農薬原体をメタノールに溶解し、リン酸緩衝液/メタノールで定容後、C18カラムを用いて高速液体クロマトグラフ（HPLC）により、リン酸緩衝液/メタノールで分離し、紫外吸収（UV）検出器（検出波長：204 nm）によりベンジルアデニンを検出及び定量する。定量には絶対検量線法を用いる。

II. ベンジルアデニンの農薬原体の組成に係る評価概要

1. 申請者

住友化学株式会社

2. 有効成分の基本情報

2.1 登録名 ベンジルアミノプリン
6-(N-ベンジルアミノ)プリン

2.2 一般名 benzyladenine (ISO)

2.3 化学名

IUPAC名: N-benzyl-7H-purin-6-amine

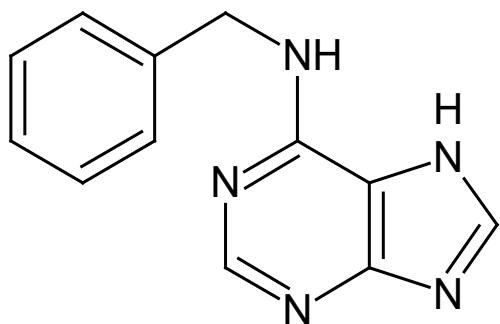
CAS名: N-(phenylmethyl)-1H-purin-6-amine
(CAS No. 1214-39-7)

2.4 コード番号 6-BA、ABG-3191、16262

2.5 分子式、構造式、分子量

分子式 C₁₂H₁₁N₅

構造式



分子量 225.26

3. 有効成分の物理的・化学的性状

表3-1：有効成分の物理的・化学的性状

| 試験項目 | 純度(%) | 試験方法 | 試験結果 | 資料 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|--|-------|---|---|-----|---|-------------|--|--|-----|------|-------|-----|------|-------|-------------|--|--|-----|------|-------|-----|------|-------|-----------------|--|--|-----|------|-------|-----|------|-------|-----|
| 蒸気圧 | 98.5 | OECD 104 | $<6.0 \times 10^{-7}$ Pa (25 °C) | 3-1 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 融点 | 99.7 | OECD 102 | 233 °C | 3-2 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 沸点 | 98.6 | OECD 103 | 測定不能 (246 °C以上で分解) | 3-3 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 熱安定性 | 99.7 | OECD 113 | 250 °C以上で分解 | 3-4 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 水 | 98.5 | OECD 105 | 0.076 g/L (20 °C) | 3-1 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| ヘプタン | 98.5 | OECD 105 | <0.0001 g/L (20 °C) | 3-1 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| キシレン | | | 0.012 g/L (20 °C) | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| クロロホルム | 99 | 40 CFR 158.690 | 0.288 g/L (26°C) | 3-5 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| アセトン | 98.5 | OECD 105 | 1.39 g/L (20 °C) | 3-1 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| イソプロパノール | | | 4.71 g/L (20 °C) | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 酢酸エチル | | | 0.866 g/L (20 °C) | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 解離定数 (pK _a) | 99.7 | OECD 112 | 4.10、10.0 (20°C) | 3-6 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 1-オクタノール／水分配係数 (log P _{ow}) | 98.5 | OECD 107 | 2.16 (22°C) | 3-1 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 加水分解性 | 99.5 | OECD 111 | 安定 (50 °C、5日間、pH 4、7及び9) | 3-7 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 水中光分解性 | 98.6 | EPA 161-2 OPPTS 835.2210 | 半減期 525 時間 (pH 7、25±1 °C、652~661 W/m ² 、300~800 nm) | 3-8 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 紫外可視吸収 (UV/VIS) スペクトル | 99.7 | <table border="1"> <thead> <tr> <th>極大吸収波長 (nm)</th> <th>吸光度</th> <th>モル吸光係数 (L mol⁻¹ cm⁻¹)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td colspan="3">中性 (pH 6.9)</td> </tr> <tr> <td>207</td> <td>1.89</td> <td>28400</td> </tr> <tr> <td>269</td> <td>1.36</td> <td>20300</td> </tr> <tr> <td colspan="3">酸性 (pH 1.1)</td> </tr> <tr> <td>204</td> <td>1.55</td> <td>23300</td> </tr> <tr> <td>275</td> <td>1.22</td> <td>18300</td> </tr> <tr> <td colspan="3">アルカリ性 (pH 13.0)</td> </tr> <tr> <td>216</td> <td>1.46</td> <td>22000</td> </tr> <tr> <td>275</td> <td>1.22</td> <td>18200</td> </tr> </tbody> </table> | 極大吸収波長 (nm) | 吸光度 | モル吸光係数 (L mol ⁻¹ cm ⁻¹) | 中性 (pH 6.9) | | | 207 | 1.89 | 28400 | 269 | 1.36 | 20300 | 酸性 (pH 1.1) | | | 204 | 1.55 | 23300 | 275 | 1.22 | 18300 | アルカリ性 (pH 13.0) | | | 216 | 1.46 | 22000 | 275 | 1.22 | 18200 | 3-9 |
| 極大吸収波長 (nm) | 吸光度 | モル吸光係数 (L mol ⁻¹ cm ⁻¹) | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 中性 (pH 6.9) | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 207 | 1.89 | 28400 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 269 | 1.36 | 20300 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 酸性 (pH 1.1) | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 204 | 1.55 | 23300 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 275 | 1.22 | 18300 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| アルカリ性 (pH 13.0) | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 216 | 1.46 | 22000 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 275 | 1.22 | 18200 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

4. 農薬原体の組成分析

ベンジルアデニンの農薬原体の組成分析に用いられた分析法は、ベンジルアデニン及び1 g/kg 以上含有されている不純物について、選択性、検量線の直線性、精確さ及び併行精度が確認されており、科学的に妥当であった。

農薬の製造に用いられる農薬原体の組成分析において、定量された分析対象の含有濃度の合計は988～1001 g/kg であった。

5. 有効成分の毒性

ベンジルアデニンの農薬原体を用いた各種毒性試験（資料5-1～5-18）が提出された。有効成分の毒性は、内閣府食品安全委員会において以下のとおり評価された（資料5-19）。

¹⁴Cで標識したベンジルアデニンのラットを用いた動物体内動態試験の結果、ベンジルアデニン経口投与後48時間における吸収率は少なくとも63.4%と算出された。残留放射能濃度は肝臓、腎臓及び肺で高く、投与放射能は主に尿中に排泄された。尿中の主要代謝物は[8]、[27]及び[28]（[6]を含む。）であり、少量代謝物として[29]（[7]を含む。）、[30]、[31]、[32-1]及び[32-2]が同定された。糞では代謝物[27]、[28]（[6]を含む。）及び[29]が、胆汁中では代謝物[6]、[31]、[32-2]及び[33]が同定された。尿、糞及び胆汁中において未変化のベンジルアデニンは検出されなかった。また、代謝物[27]の生成時に代謝物[9]（アデニン）が遊離し、一部が生体で利用されている可能性が推定された。

各種毒性試験結果から、ベンジルアデニン投与による影響は、主に体重（増加抑制）、肝臓（重量増加等）及び腎臓（尿細管上皮変性等：ラット及びイヌ）に認められた。

神経毒性、発がん性、繁殖能に対する影響及び遺伝毒性は認められなかった。

ラットを用いた発生毒性試験において、胎児に水頭が認められた。ウサギにおいて、催奇形性は認められなかった。

ウサギを用いた発生毒性試験①において、無毒性量が設定できなかったが、最小毒性量において認められた毒性所見は体重增加抑制及び摂餌量減少であり、同様の所見はより低い用量まで検討されたウサギを用いた発生毒性試験②においても認められ、無毒性量が得られている。食品安全委員会は、各試験で得られた無毒性量又は最小毒性量のうち最小値は、ウサギを用いた発生毒性試験②の無毒性量6.25 mg/kg 体重/日であったことから、これを根拠として、安全係数100で除した0.062 mg/kg 体重/日を許容一日摂取量（ADI）と設定した。

また、ベンジルアデニンの単回経口投与等により生ずる可能性のある毒性影響に対する無毒性量のうち最小値は、ラットを用いた90日間亜急性毒性試験③の35 mg/kg 体重/日であったことから、これを根拠として、安全係数100で除した0.35 mg/kg 体重を急性参考用量（ARfD）と設定した。

（URL：<https://www.fsc.go.jp/fsciis/evaluationDocument/show/kya20241002132>）

6. 不純物の毒性

農薬の製造に用いられるベンジルアデニンの農薬原体中に含有されている不純物には、考慮すべき毒性を有する不純物は認められなかった。

7. 農薬原体の同等性

農薬の製造に用いられるベンジルアデニンの農薬原体と毒性試験に用いられた農薬原体は、その組成及び毒性を比較した結果、同等であった。

評価資料

| 資料番号 | 報告年 | 表題、出典（試験施設以外の場合） 試験施設、報告書番号 GLP適合状況（必要な場合）、公表の有無 |
|------|------|--|
| | 2025 | 農薬原体の組成に係る審査報告書 ベンジルアデニン（ベンジルアミノプリン） 農林水産省消費・安全局農産安全管理課、独立行政法人農林水産消費安全技術センター 未公表 |
| 2-1 | 2024 | ベンジルアミノプリン原体中の成分の種類及びその含有濃度に関する報告書 住友化学株式会社 未公表 |
| 3-1 | 2000 | Determination of Some Physico-Chemical Properties of ABG-3191 TNO Prins Maurits Laboratory、TZP-0005 GLP、未公表 |
| 3-2 | 2023 | 6-benzyladenine: Determination of Melting Point 一般財団法人残留農薬研究所、TZP-0024 GLP、未公表 |
| 3-3 | 2009 | 6-benzyladenine: Boiling Point Huntingdon Life Sciences Ltd、TZP-0003 GLP、未公表 |
| 3-4 | 2023 | 6-benzyladenine: Thermal Stability 一般財団法人残留農薬研究所、TZP-0028 GLP、未公表 |
| 3-5 | 1991 | PHYSICAL AND CHEMICAL PROPERTIES CHARACTERIZATION OF 6-BENZYLADENINE CODE 16262 Abbott Laboratories、TZP-0004 GLP、未公表 |
| 3-6 | 2023 | 6-benzyladenine: Dissociation Constant 一般財団法人残留農薬研究所、TZP-0029 GLP、未公表 |
| 3-7 | 2003 | 6-Benzyladenine - Determination of the Abiotic Degradation of the Test Substance by Hydrolysis at Three Different pH Values Following OECD Guideline 111 Springborn Smithers Laboratories、TZM-0002 GLP、未公表 |
| 3-8 | 2009 | Photodegradation of [¹⁴ C]6-Benzyladenine in Buffered Water Valent Technical Center、TZM-0007 GLP、未公表 |
| 3-9 | 2023 | 6-benzyladenine: Ultraviolet-Visible(UV/VIS)Absorption Spectra 一般財団法人残留農薬研究所、TZP-0030 GLP、未公表 |
| 3-10 | 2023 | 6-benzyladenine: Infrared Spectrum 一般財団法人残留農薬研究所、TZP-0026 GLP、未公表 |
| 3-11 | 2022 | NMR spectra of 6-benzyladenine, pure active ingredient Nisso Chemical Analysis Co., Ltd.、TZP-0022 GLP、未公表 |
| 3-12 | 2023 | 6-benzyladenine: Mass Spectrum 一般財団法人残留農薬研究所、TZP-0027 GLP、未公表 |
| 4-1 | 2019 | 6-BA (SOURCE A): BATCH ANALYSIS AgroChemex Environmental Ltd、TZP-0012 GLP、未公表 |
| 4-2 | 2022 | 6-BA: BATCH ANALYSIS AgroChemex Environmental Ltd、TZP-0020 |

ベンジルアデニン（別名ベンジルアミノプリン）の農薬原体の組成に係る評価報告書

令和7年8月1日 農業資材審議会農薬分科会農薬原体部会（第25回）

| | | |
|------|------|---|
| | | GLP、未公表 |
| 5-1 | 2006 | [¹⁴ C]-6BA: Absorption, Distribution, Metabolism and Excretion in the Rat GLP、未公表 |
| 5-2 | 2018 | 6-Benzyladenine: Acute Oral Toxicity – Up-And-Down Procedure in Rats GLP、未公表 |
| 5-3 | 1992 | 4-Week Dietary Range-Finding Study with 6-Benzyladenine in Rats GLP、未公表 |
| 5-4 | 1992 | 13-Week Dietary Toxicity Study with 6-Benzyladenine in Rats GLP、未公表 |
| 5-5 | 2022 | 6-Benzyladenine: Repeated Dose 90-Day Oral Toxicity Study in Dogs GLP、未公表 |
| 5-6 | 2003 | ABG-3191 - Two Generation Reproduction Study in Rats GLP、未公表 |
| 5-7 | 1990 | Evaluation of the Effects of Orally Administered 6-Benzyladenine (ABBOTT-39313) on the Embryonic and Fetal Development of the Rat (Segment II TFR) GLP、未公表 |
| 5-8 | 2008 | A Prenatal Developmental Toxicity Study of 6-Benzyladenine in Rabbits GLP、未公表 |
| 5-9 | 2010 | Bacterial Reverse Mutation Assay with a Confirmatory Assay GLP、未公表 |
| 5-10 | 2003 | 6-Benzyladenine - <i>In vitro</i> Mammalian Cell Gene Mutation Test on L5178Y Mouse Lymphoma Cells TK ^{+/−} (Microwell method) GLP、未公表 |
| 5-11 | 1987 | Mutagenicity Test on 6-Benzyladenine 16262 in the <i>in vivo</i> Mouse Micronucleus Assay GLP、未公表 |
| 5-12 | 2018 | 6-Benzyladenine: Acute Dermal Toxicity in Rats GLP、未公表 |
| 5-13 | 1990 | An Acute Inhalation Toxicity Study of 6-Benzyladenine in the Rat GLP、未公表 |
| 5-14 | 2000 | Acute eye irritation/corrosion study with ABG-3191 in albino rabbits GLP、未公表 |
| 5-15 | 1991 | Primary Dermal Irritation Study in Albino Rabbits with 6-Benzyladenine GLP、未公表 |
| 5-16 | 2000 | Sensitization study with ABG-3191 in guinea pigs (maximization test) GLP、未公表 |
| 5-17 | 2022 | 6-BA Technical Powder (6-Benzyladenine Technical Powder): 21/28 Day Repeated Dose Dermal Toxicity Study in Wistar Rats GLP、未公表 |
| 5-18 | 2020 | 6-Benzyladenine: <i>In Vitro</i> 3T3 Neutral Red Uptake Phototoxicity Test GLP、未公表 |
| 5-19 | 2025 | 農薬評価書 ベンジルアデニン（第2版）令和7年6月 食品安全委員会 |