

## [13] メチル＝ドデカノアート

### 1. 物質に関する基本的事項

#### (1) 分子式・分子量・構造式

物質名：メチル＝ドデカノアート

(別の呼称：ドデカン酸メチル)

CAS 番号：111-82-0

化審法官公示整理番号：2-798 (脂肪酸 (C=9~24) アルキル (C=1~12) エステル)

化管法政令番号：

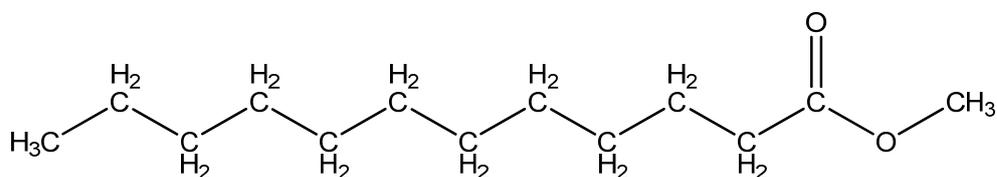
RTECS 番号：OF0670000

分子式：C<sub>13</sub>H<sub>26</sub>O<sub>2</sub>

分子量：214.34

換算係数：1 ppm = 8.77 mg/m<sup>3</sup> (気体、25°C)

構造式：



#### (2) 物理化学的性状

本物質は無色透明な液体である<sup>1)</sup>。

融点	5.0°C <sup>2),4)</sup> 、5.2°C <sup>3)</sup>
沸点	267°C (760 mmHg) <sup>2),3)</sup> 、250°C <sup>4)</sup>
密度	0.8702 g/cm <sup>3</sup> (20°C) <sup>2)</sup> 、0.87 g/cm <sup>3</sup> (20°C) <sup>4)</sup> 、 比重：0.867~0.873 (20°C) <sup>5)</sup>
蒸気圧	4.11×10 <sup>-3</sup> mmHg (=0.548 Pa) (25°C) <sup>3)</sup> 、 1.20×10 <sup>-3</sup> mmHg (=0.160 Pa) (25°C) <sup>6)</sup>
分配係数 (1-オクタノール/水) (log Kow)	6.0 <sup>4)</sup> 、6.5 (25°C) <sup>6)</sup>
解離定数 (pKa)	
水溶性 (水溶解度)	<4.4 mg/L (20°C) <sup>7)</sup> 、0.694 mg/L (藻類試験培地) <sup>8)</sup> 、 0.376 mg/L (脱塩素水道水) <sup>8)</sup> 、0.483 mg/L (脱塩素 水道水) <sup>8)</sup>

#### (3) 環境運命に関する基礎的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性

好氣的分解 (分解性が良好と判断される物質<sup>9)</sup>)

分解率：BOD 78%、GC 100%

(試験期間：4 週間、被験物質濃度：100 mg/L、活性汚泥濃度：30 mg/L)<sup>10)</sup>

化学分解性

OH ラジカルとの反応性 (大気中)

反応速度定数： $13 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$  (AOPWIN<sup>11</sup>) により計算)

半減期：0.4～4 日 (OH ラジカル濃度を  $3 \times 10^6 \sim 3 \times 10^5 \text{ 分子/cm}^3$ <sup>12</sup>) と仮定し、一日を 12 時間として計算)

加水分解性

半減期：5.14 日 (25℃)<sup>6)</sup>

生物濃縮性

生物濃縮係数 (BCF)：73 (BCFBAF<sup>13</sup>) により計算)

土壌吸着性

土壌吸着定数 (Koc)：1,300 (KOCWIN<sup>14</sup>) により計算)

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の化審法に基づき公表された製造・輸入数量の推移を表 1.1 に示す<sup>15),16)</sup>。

表 1.1 製造・輸入数量の推移

平成(年度)	21	22	23	24	25	26
製造・輸入数量(t) <sup>a)</sup>	2,949 <sup>b)</sup>	2,731 <sup>c)</sup>	5,300 <sup>c)</sup>	4,906 <sup>c)</sup>	4,559 <sup>c)</sup>	4,490 <sup>c)</sup>

注：a) 平成 22 年度以降の製造・輸入数量の届出要領は、平成 21 年度までとは異なっている。

b) 製造数量は出荷量を意味し、同一事業所内での自家消費分を含んでいない値を示す。

c) 製造数量は出荷量を意味し、同一事業者内での自家消費分を含んでいない値を示す。

脂肪酸 (C=9～24) アルキル (C=1～12) エステルの「化学物質の製造・輸入量に関する実態調査」による製造 (出荷) 及び輸入量を表 1.2 に示す<sup>17)</sup>。

表 1.2 製造 (出荷) 及び輸入量

平成(年度)	13	16	19
製造 (出荷) 及び 輸入量 <sup>a)</sup>	100～1,000 t/年未満	10,000～100,000 t/年未満	10,000～100,000 t/年未満

注：a) 化学物質を製造した企業及び化学物質を輸入した商社等のうち、1 物質 1 トン以上の製造又は輸入をした者を対象に調査を行っているが、全ての調査対象者からは回答が得られていない。

本物質は、天然にはオリスのアブソリュート、リンゴ、バナナ、ベリー類に存在するとされている<sup>18)</sup>。

② 用途

本物質の主な用途は工業原料 (乳化剤や界面活性剤の中間体など)、塗料添加剤である<sup>6)</sup>。また、本物質は食品衛生法第 10 条に基づき食品添加物 (指定添加物)<sup>19)</sup> に指定されているほか、国際化粧品香料協会 (IFRA) が作成した世界で使用されている消費財の香料成分リスト

<sup>20)</sup>に掲載されている。

#### (5) 環境施策上の位置付け

本物質は、生態影響の観点から化学物質審査規制法優先評価化学物質（通し番号：29）に指定されている。

本物質は、生態影響の観点から水環境保全に向けた取組のための要調査項目に選定されている。

なお、本物質は旧化学物質審査規制法（平成15年改正法）において第三種監視化学物質（通し番号：272）に指定されていた。

## 2. 曝露評価

環境リスクの初期評価のため、わが国の一般的な国民の健康や水生生物の生存・生育を確保する観点から、実測データをもとに基本的には化学物質の環境からの曝露を中心に評価することとし、データの信頼性を確認した上で安全側に立った評価の観点から原則として最大濃度により評価を行っている。

### (1) 環境中への排出量

本物質は化学物質排出把握管理促進法（化管法）第一種指定化学物質ではないため、排出量及び移動量は得られなかった。

### (2) 媒体別分配割合の予測

化管法に基づく排出量及び下水道への移動量が得られなかったため、Mackay-Type Level III Fugacity Model<sup>1)</sup>により媒体別分配割合の予測を行った。結果を表 2.1 に示す。

表 2.1 Level III Fugacity Model による媒体別分配割合 (%)

排出媒体	大気	水域	土壌	大気/水域/土壌
排出速度 (kg/時間)	1,000	1,000	1,000	1,000 (各々)
大気	97.3	7.7	1.4	6.7
水域	0.8	86.5	0.2	19
土壌	1.8	0.1	98.4	73.1
底質	0.1	5.7	0.0	1.3

注：数値は環境中で各媒体別に最終的に分配される割合を質量比として示したもの。

### (3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の環境中等の濃度について情報の整理を行った。媒体ごとにデータの信頼性が確認された調査例のうち、より広範囲の地域で調査が実施されたものを抽出した結果を表 2.2 に示す。

表 2.2 各媒体中の存在状況

媒体	幾何 平均値 <sup>a)</sup>	算術 平均値	最小値	最大値 <sup>a)</sup>	検出 下限値	検出率	調査地域	測定年度	文献	
一般環境大気	μg/m <sup>3</sup>									
室内空気	μg/m <sup>3</sup>									
食物	μg/g									
飲料水	μg/L									
地下水	μg/L									
土壌	μg/g									
公共用水域・淡水	μg/L	<b>0.0052</b>	0.0067	<0.0052	<b>0.017</b>	0.0052	8/15	全国	2013	2)
公共用水域・海水	μg/L	<b>&lt;0.0052</b>	0.0077	<0.0052	<b>0.038</b>	0.0052	1/7	全国	2013	2)

媒 体	幾何 平均値 <sup>a)</sup>	算術 平均値	最小値	最大値 <sup>a)</sup>	検出 下限値	検出率	調査地域	測定年度	文 献
底質(公共用水域・淡水) µg/g									
底質(公共用水域・海水) µg/g									
魚類(公共用水域・淡水) µg/g									
魚類(公共用水域・海水) µg/g									

注：a) 最大値又は幾何平均値の欄の**太字**で示した数字は、曝露の推定に用いた値を示す。

#### (4) 人に対する曝露量の推定（一日曝露量の予測最大量）

公共用水域・淡水の実測値を用いて、人に対する曝露の推定を行った（表 2.3）。化学物質の  
人による一日曝露量の算出に際しては、人の一日の呼吸量、飲水量及び食事をそれぞれ 15  
m<sup>3</sup>、2 L 及び 2,000 g と仮定し、体重を 50 kg と仮定している。

表 2.3 各媒体中の濃度と一日曝露量

	媒 体	濃 度	一 日 曝 露 量
平 均	大 気 一般環境大気	データは得られなかった	データは得られなかった
	室内空気	データは得られなかった	データは得られなかった
	水 質		
	飲料水	データは得られなかった	データは得られなかった
	地下水	データは得られなかった	データは得られなかった
	公共用水域・淡水	<b>0.0052 µg/L 程度 (2013)</b>	<b>0.00021 µg/kg/day 程度</b>
最 大 値	食 物	データは得られなかった	データは得られなかった
	土 壤	データは得られなかった	データは得られなかった
	大 気 一般環境大気	データは得られなかった	データは得られなかった
	室内空気	データは得られなかった	データは得られなかった
	水 質		
	飲料水	データは得られなかった	データは得られなかった
地下水	データは得られなかった	データは得られなかった	
公共用水域・淡水	<b>0.017 µg/L 程度 (2013)</b>	<b>0.00068 µg/kg/day 程度</b>	
	食 物	データは得られなかった	データは得られなかった
	土 壤	データは得られなかった	データは得られなかった

吸入曝露の予測最大曝露濃度を設定できるデータは得られなかった。

表 2.4 人の一日曝露量

媒体		平均曝露量 (μg/kg/day)	予測最大曝露量 (μg/kg/day)
大気	一般環境大気		
	室内空気		
水質	飲料水		
	地下水		
	公共用水域・淡水	0.00021	0.00068
食物			
土壌			
経口曝露量合計		0.00021	0.00068
総曝露量		0.00021	0.00068

経口曝露の予測最大曝露量は、表 2.4 に示すとおり、公共用水域・淡水のデータから算定すると 0.00068 μg/kg/day 程度となった。

物理化学的性状から考えて生物濃縮性は高くないと推測されることから、本物質の環境媒体から食物経由の曝露量は少ないと考えられる。

#### (5) 水生生物に対する曝露の推定（水質に係る予測環境中濃度：PEC）

本物質の水生生物に対する曝露の推定の観点から、水質中濃度を表 2.5 のように整理した。水質について安全側の評価値として予測環境中濃度（PEC）を設定すると、公共用水域の淡水域では 0.017 μg/L 程度、同海水域では 0.038 μg/L 程度となった。

表 2.5 公共用水域濃度

水域	平均	最大値
淡水	0.0052 μg/L 程度 (2013)	0.017 μg/L 程度 (2013)
海水	0.0052 μg/L 未満程度 (2013)	0.038 μg/L 程度 (2013)

注：1) 環境中濃度での（）内の数値は測定年度を示す。

2) 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。

### 3. 健康リスクの初期評価

健康リスクの初期評価として、ヒトに対する化学物質の影響についてのリスク評価を行った。

#### (1) 体内動態、代謝

本物質の体内動態、代謝に関して知見は得られなかった。

なお、本物質のような中程度の長さの直鎖エステルは消化管から速やかに吸収され、加水分解によりアルコールとカルボン酸になり、脂肪酸経路を介して CO<sub>2</sub> へと酸化されて呼気中に排泄されるか、抱合体となって尿中に排泄される<sup>1)</sup>。

#### (2) 一般毒性及び生殖・発生毒性

##### ① 急性毒性

表 3.1 急性毒性

動物種	経路	致死量、中毒量等
ラット	経口	LD <sub>50</sub> > 2,000 mg/kg <sup>2)</sup>
ラット	吸入	LC <sub>50</sub> > 5,000 mg/m <sup>3</sup> (4hr) <sup>3)</sup>

注：( ) 内の時間は曝露時間を示す。

ヒトの急性症状に関する情報は得られなかったが、経口投与したラットでは投与に伴う異常はみられなかった<sup>2)</sup>。吸入曝露したラットでは曝露終了から 1 時間後の観察時に嗜眠、円背姿勢、努力性呼吸が全数でみられ、円背姿勢は 2 日後まで持続した<sup>3)</sup>。

##### ② 中・長期毒性

ア) Sprague-Dawley ラット雌雄に 0、250、500、750、1,000 mg/kg/day を 2 週間強制経口投与した予備試験では各群で死亡はなく、一般状態、体重、臓器重量、血液、血液生化学にも影響はなかった<sup>4)</sup>。この結果から、NOAEL を 1,000 mg/kg/day 以上とする。

イ) Sprague-Dawley ラット雌雄各 12 匹を 1 群とし、0、250、500、1,000 mg/kg/day を交尾前 14 日から雄に 45 日間、雌に哺育 3 日までの 41～55 日間強制経口投与した結果、各群で死亡はなく、一般状態、体重、臓器の重量や組織、血液、血液生化学にも影響はなかった<sup>4)</sup>。この結果から、NOAEL を 1,000 mg/kg/day 以上とする。

ウ) USC ラット雌雄各 10 匹を 1 群とし、無脂肪飼料に 0、100 mg/rat/day の本物質 (250 mg/kg/day 程度) を添加して 12 週間投与した結果、生存率や体重に有意な影響はなかった<sup>5)</sup>。

##### ③ 生殖・発生毒性

ア) Sprague-Dawley ラット雌雄各 12 匹を 1 群とし、0、250、500、1,000 mg/kg/day を交尾前 14 日から雄に 45 日間、雌に哺育 3 日までの 41～55 日間強制経口投与した結果、各群で交尾能、受胎能、性周期への影響はなく、出産率や出生率、4 日生存率等にも影響はなかった。

また、奇形や変異の発生率増加もなかった<sup>4)</sup>。この結果から、NOAEL を 1,000 mg/kg/day 以上とする。

イ) USC ラット雌 10 匹を 1 群とし、無脂肪飼料に 0、100 mg/rat/day の本物質 (250 mg/kg/day 程度) を添加して 12 週間投与した後に未処置の雄と交尾させた結果、いずれの群も出産はみられなかった。このため、無脂肪飼料に本物質を添加しても生殖能低下を改善する効果はないと考えられた<sup>5)</sup>。

#### ④ ヒトへの影響

ア) ボランティア 10 人の前腕部皮膚 (直径 3 cm) にそれぞれ 10、20% の本物質、20 人の前腕部皮膚にそれぞれ 50、100% の本物質を 30 分間塗布した結果、いずれの被験者にも刺激反応はみられなかった<sup>6)</sup>。

イ) ボランティア 20 人の背部 (直径 3 cm) に 70  $\mu$ L の本物質を 24 時間塗布した結果、6 人に軽度の紅斑、あるいは落屑がみられた<sup>7)</sup>。

### (3) 発がん性

#### ① 主要な機関による発がんの可能性の分類

国際的に主要な機関での評価に基づく本物質の発がんの可能性の分類については、表 3.2 に示すとおりである。

表 3.2 主要な機関による発がんの可能性の分類

機 関 (年)		分 類
WHO	IARC	—
EU	EU	—
USA	EPA	—
	ACGIH	—
	NTP	—
日本	日本産業衛生学会	—
ドイツ	DFG	—

#### ② 発がん性の知見

##### ○ 遺伝子傷害性に関する知見

*in vitro* 試験系では、代謝活性化系 (S9) 添加の有無にかかわらずネズミチフス菌<sup>8,9)</sup>、大腸菌<sup>9)</sup>で遺伝子突然変異、チャイニーズ・ハムスター肺細胞 (CHL)<sup>10)</sup>、ヒト末梢血リンパ球<sup>11)</sup>で染色体異常を誘発しなかった。

*in vivo* 試験系については、知見が得られなかった。

## ○ 実験動物に関する発がん性の知見

実験動物での発がん性に関して、知見は得られなかった。

## ○ ヒトに関する発がん性の知見

ヒトでの発がん性に関して、知見は得られなかった。

## (4) 健康リスクの評価

### ① 評価に用いる指標の設定

非発がん影響については一般毒性及び生殖・発生毒性等に関する知見が得られているが、発がん性については十分な知見が得られず、ヒトに対する発がん性の有無については判断できない。このため、閾値の存在を前提とする有害性について、非発がん影響に関する知見に基づき無毒性量等を設定することとする。

経口曝露については、中・長期毒性イ) に示したラットの試験から得られた NOAEL 1,000 mg/kg/day 以上（最高用量で影響なし）を慢性曝露への補正が必要なことから 10 で除した 100 mg/kg/day が信頼性のある最も低用量の知見と判断し、これを無毒性量等に設定する。

吸入曝露については、無毒性量等の設定ができなかった。

### ② 健康リスクの初期評価結果

表 3.3 経口曝露による健康リスク (MOE の算定)

曝露経路・媒体		平均曝露量	予測最大曝露量	無毒性量等		MOE
経口	飲料水	—	—	100 mg/kg/day	ラット	—
	公共用水域・淡水	0.00021 µg/kg/day 程度	0.00068 µg/kg/day 程度			15,000,000

経口曝露については、公共用水域・淡水を摂取すると仮定した場合、平均曝露量は 0.00021 µg/kg/day 程度、予測最大曝露量は 0.00068 µg/kg/day 程度であった。無毒性量等 100 mg/kg/day と予測最大曝露量から、動物実験結果より設定された知見であるために 10 で除して求めた MOE (Margin of Exposure) は 15,000,000 となる。環境媒体から食物経由で摂取される曝露量は少ないと推定されることから、その曝露を加えても MOE が大きく変化することはないと考えられる。

従って、本物質の経口曝露による健康リスクについては、現時点では作業は必要ないと考えられる。

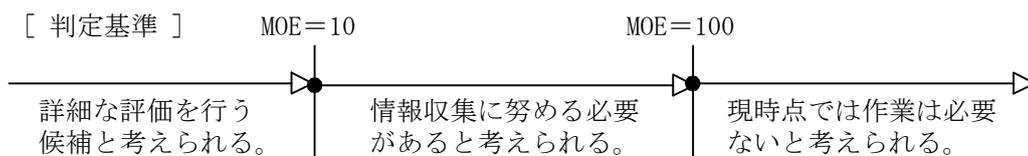
表 3.4 吸入曝露による健康リスク (MOE の算定)

曝露経路・媒体		平均曝露濃度	予測最大曝露濃度	無毒性量等		MOE
吸入	環境大気	—	—	—	—	—
	室内空気	—	—			—

吸入曝露については、無毒性量等が設定できず、曝露濃度も把握されていないため、健康

リスクの判定はできなかった。

なお、吸収率を 100%と仮定し、経口曝露の無毒性量等を吸入曝露の無毒性量等に換算すると  $333 \text{ mg/m}^3$  となるが、無毒性量等設定のエンドポイントが「最高用量で影響なし」であったことから、実際はさらに高い濃度と考えられる。一方、本物質は食品や飲料等に天然の香り成分として含まれ<sup>12)</sup>、香水や化粧品、食品添加物に香料として使用されている<sup>13)</sup>。このため、一般環境大気中の濃度が問題になる可能性は低いと考えられることから、本物質の一般環境大気からの吸入曝露による健康リスクの評価に向けて吸入曝露の情報収集等を行う必要性は低いと考えられる。



#### 4. 生態リスクの初期評価

水生生物の生態リスクに関する初期評価を行った。

##### (1) 水生生物に対する毒性値の概要

本物質の水生生物に対する毒性値に関する知見を収集し、その信頼性及び採用の可能性を確認したものを生物群（藻類、甲殻類、魚類及びその他の生物）ごとに整理すると表 4.1 のとおりとなった。

表 4.1 水生生物に対する毒性値の概要

生物群	急性	慢性	毒性値 [μg/L]	生物名	生物分類／和名	エンドポイント ／影響内容	曝露期間 [日]	試験の 信頼性	採用の 可能性	文献 No.
藻類		○	<b>5.9</b> *1	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO (RATE)	3	B	B	2)
		○	39.6	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO (RATE)	3	B	B	1)
	○		<b>78.4</b> *1	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC <sub>50</sub> GRO (RATE)	3	B	B	2)
	○		324	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC <sub>50</sub> GRO (RATE)	3	B	B	1)
			810	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC <sub>10</sub> GRO	4	C	—	4)-1
		○	1,460	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC <sub>50</sub> GRO	4	C	C	4)-1
甲殻類		○	<b>81.4</b>	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	A	A	1)
	○		<b>225</b>	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC <sub>50</sub> IMM	2	A	A	1)
魚類	○		<b>&gt;524</b> *2	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC <sub>50</sub> MOR	4	A	A	1)
	○		>100,000	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC <sub>50</sub> MOR	4	B	B	3)- 2010208
	○		>1,000,000	<i>Lepomis macrochirus</i>	ブルーギル	LC <sub>50</sub> MOR	4	C	C	4)-2
その他			—	—	—	—	—	—	—	

急性／慢性：○印は該当する毒性値

**毒性値**（太字）：PNEC 導出の際に参照した知見として本文で言及したもの

**毒性値**（太字下線）：PNEC 導出の根拠として採用されたもの

試験の信頼性：本初期評価における信頼性ランク

A：試験は信頼できる、B：試験はある程度信頼できる、C：試験の信頼性は低い、D：信頼性の判定不可、

E：信頼性は低くないと考えられるが、原著にあたって確認したものではない

採用の可能性：PNEC 導出への採用の可能性ランク

A：毒性値は採用できる、B：毒性値はある程度採用できる、C：毒性値は採用できない、

—：採用の可能性は判断しない

エンドポイント

EC<sub>10</sub> (10% Effective Concentration)：10%影響濃度、EC<sub>50</sub> (Median Effective Concentration)：半数影響濃度、

LC<sub>50</sub> (Median Lethal Concentration)：半数致死濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration)：無影響濃度

## 影響内容

GRO (Growth) : 生長 (植物)、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、  
REP (Reproduction) : 繁殖、再生産

## 毒性値の算出方法

RATE : 生長速度より求める方法 (速度法)

- \*1 文献2) をもとに、試験時の実測濃度 (試験開始時及び終了時の幾何平均値) を用いて、速度法により再計算した値
- \*2 限度試験 (毒性値を求めるのではなく、定められた濃度において影響の有無を調べる試験) により得られた値

評価の結果、採用可能とされた知見のうち、生物群ごとに急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて最も小さい毒性値を予測無影響濃度 (PNEC) 導出のために採用した。その知見の概要は以下のとおりである。

## 1) 藻類

環境省<sup>1)</sup>は「新規化学物質等に係る試験の方法について (化審法テストガイドライン)」(2003) 及び OECD テストガイドライン No.201 (2004) に準拠して、緑藻類 *Pseudokirchneriella subcapitata* (旧名 *Selenastrum capricornutum*) の生長阻害試験を GLP 試験として実施した。設定試験濃度は 0 (対照区、助剤対照区)、0.0375、0.0750、0.150、0.300、0.600 mg/L (公比 2.0) であった。試験溶液の調製には、助剤として *N,N*-ジメチルホルムアミド (DMF) が 0.100 mL/L 用いられた。被験物質の実測濃度 (試験開始時及び終了時の幾何平均値) は、<0.00286 (対照区、助剤対照区)、0.0059、0.00805、0.0119、0.304 mg/L であり、試験開始時及び終了時において、それぞれ設定濃度の 98.3~108%及び 8.98~25.8%であった。毒性値の算出には実測濃度が用いられた。速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC<sub>50</sub>) は 78.4 µg/L、72 時間無影響濃度 (NOEC) は 5.9 µg/L であった<sup>2)</sup>。

## 2) 甲殻類

環境省<sup>1)</sup>は、「新規化学物質等に係る試験の方法について (化審法テストガイドライン)」(2003) 及び OECD テストガイドライン No.202 (2004) に準拠して、オオミジンコ *Daphnia magna* の急性遊泳阻害試験を GLP 試験として実施した。試験は流水式 (96倍容量換水/日) で行われ、設定試験濃度は 0 (対照区、助剤対照区)、0.153、0.244、0.391、0.625、1.00 mg/L (公比 1.6) であった。試験溶液の調製には、試験用水として硬度 29.2 mg/L (CaCO<sub>3</sub>換算) の脱塩素水道水が、助剤として *N,N*-ジメチルホルムアミド (DMF) が 0.100 mL/L 用いられた。被験物質の実測濃度 (0、48時間後の算術平均値) は、<0.0495 (対照区、助剤対照区)、0.0577、0.102、0.119、0.203、0.351 mg/L であり、0及び48時間後において、それぞれ設定濃度の 39~47.5%及び 21.4~38.8%であった。遊泳阻害に関する 48時間半数影響濃度 (EC<sub>50</sub>) は、実測濃度に基づき 225 µg/L であった。

また、環境省<sup>1)</sup>は「新規化学物質等に係る試験の方法について (化審法テストガイドライン)」(2003) 及び OECD テストガイドライン No.211 (1998) に準拠して、オオミジンコ *Daphnia magna* の繁殖試験を GLP 試験として実施した。試験は流水式 (48倍容量換水/日) で行われ、設定試験濃度は 0 (対照区、助剤対照区)、0.0625、0.125、0.250、0.500、1.00 mg/L (公比 2.0) であった。試験溶液の調製には、試験用水として硬度 41.7 mg/L (CaCO<sub>3</sub>換算) の脱塩素水道水が、助剤として *N,N*-ジメチルホルムアミド (DMF) が 0.100 mL/L 用いられた。被験物質の実測濃度

(0、3、9、15日後の算術平均値)は、<0.00248 (対照区、助剤対照区)、0.00955、0.0333、0.0814、0.213、0.409 mg/Lであり、試験中を通じて設定濃度の9.83-50.4%であった。繁殖阻害(累積産仔数)に関する21日間無影響濃度 (NOEC) は、実測濃度に基づき81.4 µg/Lであった。

### 3) 魚類

環境省<sup>1)</sup>は、「新規化学物質等に係る試験の方法について(化審法テストガイドライン)」(2003)及びOECDテストガイドライン No.203 (1992)に準拠して、メダカ *Oryzias latipes* の急性毒性試験をGLP試験として実施した。試験は流水式(96倍容量換水/日)で行われ、設定試験濃度は0(対照区、助剤対照区)、1 mg/L(限度試験)であった。試験溶液の調製には、試験用水として硬度29.2 mg/L(CaCO<sub>3</sub>換算)の脱塩素水道水が、助剤として *N,N*-ジメチルホルムアミド(DMF)が0.100 mL/L用いられた。被験物質の実測濃度(0、96時間後の算術平均値)は、<0.0495(対照区、助剤対照区)、0.524 mg/Lであり、0及び96時間後において、それぞれ設定濃度の49.5%及び52.4%であった。濃度区においても対照区及び助剤対照区と同様に死亡は見られず、96時間半数致死濃度(LC<sub>50</sub>)は、実測濃度に基づき524 µg/L超とされた。

#### (2) 予測無影響濃度(PNEC)の設定

急性毒性及び慢性毒性のそれぞれについて、上記本文で示した最小毒性値に情報量に応じたアセスメント係数を適用し、予測無影響濃度(PNEC)を求めた。

##### 急性毒性値

藻類	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	72時間 EC <sub>50</sub> (生長阻害)	78.4 µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	48時間 EC <sub>50</sub> (遊泳阻害)	225 µg/L
魚類	<i>Oryzias latipes</i>	96時間 LC <sub>50</sub>	524 µg/L 超

アセスメント係数：100 [3生物群(藻類、甲殻類及び魚類)について信頼できる知見が得られたため]

これらの毒性値のうち、最も小さい値(藻類の78.4 µg/L)をアセスメント係数100で除することにより、急性毒性値に基づくPNEC値0.78 µg/Lが得られた。

##### 慢性毒性値

藻類	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	72時間 NOEC (生長阻害)	5.9 µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	21日間 NOEC (繁殖阻害)	81.4 µg/L

アセスメント係数：100 [2生物群(藻類及び甲殻類)の信頼できる知見が得られたため]

これらの毒性値のうち、小さい方の値(藻類の5.9 µg/L)をアセスメント係数100で除することにより、慢性毒性値に基づくPNEC値0.059 µg/Lが得られた。

本物質のPNECとしては、藻類の慢性毒性値から得られた0.059 µg/Lを採用する。

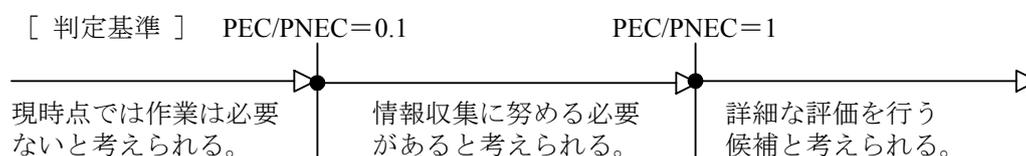
## (3) 生態リスクの初期評価結果

表 4.2 生態リスクの初期評価結果

水質	平均濃度	最大濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
公共用水域・淡水	0.0052 µg/L 程度 (2013)	0.017 µg/L 程度 (2013)	0.059 µg/L	0.3
公共用水域・海水	0.0052 µg/L 未満程度 (2013)	0.038 µg/L 程度 (2013)		0.6

注：1) 環境中濃度での ( ) 内の数値は測定年度を示す

2) 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む



本物質の公共用水域における濃度は、平均濃度で見ると淡水域で 0.0052 µg/L 程度、海水域では 0.0052 µg/L 未満程度であった。安全側の評価値として設定された予測環境中濃度 (PEC) は、淡水域で 0.017 µg/L 程度、海水域では 0.038 µg/L 程度であった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域で 0.3、海水域では 0.6 となるため、情報収集に努める必要があると考えられる。

本物質については有害性情報の充実について検討することが望ましいと考えられる。

## 5. 引用文献等

## (1) 物質に関する基本的事項

- 1) Fenaroli's Handbook of Flavor Ingredients. Volume 2. Edited, translated, and revised by T.E. Furia and N. Bellanca. 2nd ed. Cleveland: The Chemical Rubber Co., 1975., p. 378[Hazardous Substances Data Bank (<http://toxnet.nlm.nih.gov/>, 2015.12.17 現在) ].
- 2) Haynes.W.M.ed. (2013) : CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, (Version 2013), CRC Press.
- 3) Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997) : Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 209.
- 4) Verschueren, K. ed. (2009) : Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 5th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).
- 5) European Chemicals Agency : Information on Registered Substances, Methyl laurate. (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>, 2016.6.7 現在).
- 6) OECD High Production Volume Chemicals Program (2014) : SIDS (Screening Information Data Set) Initial Assessment Report, Methyl laurate.
- 7) YALKOWSKY, S.H. and HE, Y. (2003) Handbook of Aqueous Solubility Data Second, Boca Raton, London, New York, Washington DC, CRC Press, p.979.
- 8) 環境省 (2005) : 平成 16 年度 生態影響試験.
- 9) 通産省公報(1995.12.28).
- 10) 脂肪酸(C=9~24)アルキル(C=1~12)エステル[ドデカン酸メチル(被験物質番号 K-1225)にて試験実施]の微生物による分解度試験. 化審法データベース(J-CHECK).
- 11) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.92.
- 12) Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., and Michalenko, E.M. ed. (1991) : Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xiv.
- 13) U.S. Environmental Protection Agency, BCFBAF™ v.3.01.
- 14) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.00.
- 15) 経済産業省(通商産業省) 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律(化審法)第二十五条の二第二項の規定に基づき、同条第一項の届出に係る製造数量及び輸入数量を合計した数量として公表された値.
- 16) 経済産業省 : 化学物質の製造輸入数量  
([http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/kasinhou/information/volume\\_index.html](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/volume_index.html), 2016.05.12 現在).
- 17) 経済産業省 (2003) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 13 年度実績)の確報値, ([http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/new\\_page/10/2.htm](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/new_page/10/2.htm), 2005.10.2 現在). 経済産業省 (2007) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査(平成 16 年度実績)の確報値,

([http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/kasinhou/jittaichousa/kakuhou18.html](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/jittaichousa/kakuhou18.html), 2007.4.6 現在). ; 経済産業省(2009) : 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査 (平成 19 年度実績) の確報値,

([http://www.meti.go.jp/policy/chemical\\_management/kasinhou/kakuhou19.html](http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/kakuhou19.html), 2009.12.28 現在).

- 18) 化学工業日報社 (2005) : 合成香料 化学と商品知識 (増補改訂版) .
- 19) 厚生労働省 : 指定添加物リスト  
([http://www.mhlw.go.jp/file/06-Seisakujouhou-11130500-Shokuhinanzendu/121015-01\\_1.pdf](http://www.mhlw.go.jp/file/06-Seisakujouhou-11130500-Shokuhinanzendu/121015-01_1.pdf), 2016.11.17 現在).
- 20) 国際化粧品香料協会 : 成分([http://www.ifraorg.org/en/ingredients#.WDKVovb\\_paQ](http://www.ifraorg.org/en/ingredients#.WDKVovb_paQ), 2016.11.21 現在).

## (2) 曝露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPIWIN™ v.4.11.
- 2) 環境省環境保健部環境安全課 (2014) : 平成 25 年度化学物質環境実態調査.

## (3) 健康リスクの初期評価

- 1) European Food Safety Authority (2008): Flavouring Group Evaluation 2, Revision 1: Branched- and straight-chain aliphatic saturated primary alcohols and related esters of primary alcohols and straight-chain carboxylic acids and one straight-chain aldehyde from chemical groups 1 and 2 (Commission Regulation (EC) No 1565/2000 of 18 July 2000).
- 2) 化学物質点検推進連絡協議会(1996): ドデカン酸メチルエステルのラットを用いる単回経口投与毒性試験. 化学物質毒性試験報告. 4: 383-384.
- 3) European Chemicals Agency : Information on Registered Substances, methyl laurate. Acute toxicity: inhalation. 001 Key| Experimental Result (2010).  
(<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>, 2016.12.1 現在).
- 4) 化学物質点検推進連絡協議会(1996): ドデカン酸メチルエステルのラットを用いる反復経口投与毒性・生殖発生毒性併合試験. 化学物質毒性試験報告. 4: 385-396.
- 5) Alfin-Slater RB, Morris RS, Hansen H, Proctor JF. (1965): Effects of non-essential fatty acids on essential fatty acid deficiency. J Nutr. 87: 168-172.
- 6) European Chemical Agency : Information on Registered Substances, methyl laurate. Exposure related observations in humans: other data. 001 Weight of evidence (1994).  
(<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>, 2016.12.1 現在).
- 7) Sato A, Obata K, Ikeda Y, Ohkoshi K, Okumura H, Ozawa N, Ogawa T, Katsumura Y, Kawai J, Tatsumi H, Honoki S, Hiramatsu I, Hiroshima H, Okada T, Kozuka T. (1996): Evaluation of human skin irritation by carboxylic acids, alcohols, esters and aldehydes, with nitrocellulose-replica method and closed patch testing. Contact Dermatitis. 34: 12-16.

- 8) Banduhn N. (1992): Henkel KGaA, unpublished data. Report-No. 920020. Cited in: European Commission - European Chemicals Bureau (2000): IUCLID Dataset Year 2000 CD-ROM edition.
- 9) 化学物質点検推進連絡協議会(1996): ドデカン酸メチルエステルの細菌を用いる復帰突然変異試験. 化学物質毒性試験報告. 4: 397-403.
- 10) 化学物質点検推進連絡協議会. (1996): ドデカン酸メチルエステルのチャイニーズ・ハムスター培養細胞を用いる染色体異常試験. 化学物質毒性試験報告. 4: 405-408.
- 11) European Chemical Agency : Information on Registered Substances, methyl laurate. Genetic toxicity: *in vitro*. 002 Key| Experimental Result (2010). (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>, 2016.12.1 現在).
- 12) Burdock GA. (2009): Fenaroli's handbook of flavor ingredients. 6th Edition. CRC Press.
- 13) Ash M, Ash I. (2008): Handbook of green chemicals. 2nd Edition. Synapse Information Resources, Inc.

#### (4) 生態リスクの初期評価

- 1) 環境省 (2005) : 平成 16 年度 生態影響試験
- 2) 国立環境研究所 (2016) : 平成 27 年度化学物質環境リスク初期評価等実施業務報告書
- 3) その他  
2010208 : 上田成一、松尾保雄、白井玄爾、山口道雄 (1993): 化学物質の魚類急性毒性および藻類生長阻害. 長崎県衛生公害研究所報 39 : 85-87.
- 4) European Chemicals Agency : Information on Registered Substance, Methyl laurate (<https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>, 2016.6.10 現在).
  1. Exp Supporting Toxicity to aquatic algae and cyanobacteria 002 (1993).
  2. Exp Supporting Short-term toxicity to fish 001 (1977).