

(案)

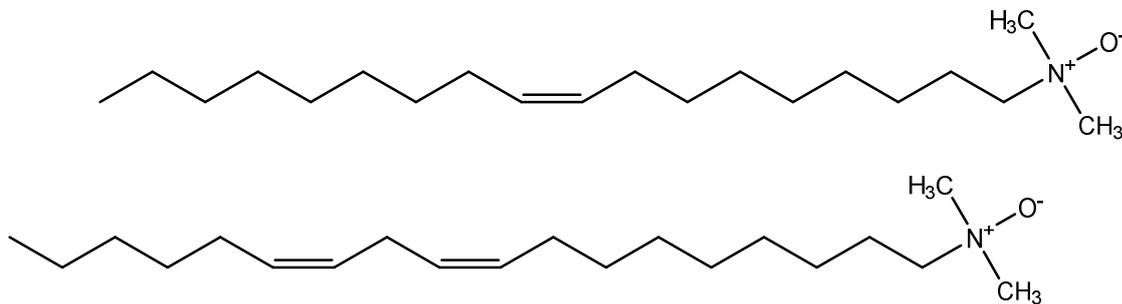
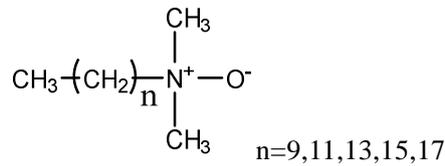
## 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価

物理化学的性状等の詳細資料

*N, N*-ジメチルアルカン-1-アミン=オキシド(C = 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)、(*Z*)-*N, N*-ジメチルオクタデカ-9-エン-1-アミン=オキシド又は(9*Z*, 12*Z*)-*N, N*-ジメチルオクタデカ-9, 12-ジエン-1-アミン=オキシド

優先評価化学物質通し番号 169



平成 30 年 3 月

経済産業省

# 目 次

1		
2	1 評価対象物質の性状 .....	1
3	1-1 評価対象物質の設定 .....	1
4	1-2 物理化学的性状及び濃縮性 .....	2
5	1-3 分解性 .....	5
6	2 【付属資料】 .....	8
7	2-1 物理化学的性状等一覧 .....	8
8	2-2 その他 .....	8
9		
10		

# 1 評価対象物質の性状

本章では、モデル推計に用いる物理化学的性状データ、環境中における分解性に係るデータを示す。

## 1-1 評価対象物質の設定

本章では、5章のモデル推計に用いる物理化学的性状データ、環境中における分解性に係るデータを示す。なお、*N,N*-ジメチルアルカン-1-アミン=オキシド(C=10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)(*Z*)-*N,N*-ジメチルオクタデカ-9-エン-1-アミン=オキシド又は(*9Z*, *12Z*)-*N,N*-ジメチルオクタデカ-9, 12-ジエン-1-アミン=オキシド(以下「AO」という。)はアルキル鎖長及び不飽和度が異なる混合物である。AOは、平成26年4月1日に化審法の優先化学物質に指定され、それに包含される優先番号101の*N,N*-ジメチルドデシルアミン=*N*-オキシド(C<sub>12</sub>AO(以下、C<sub>n</sub>AOのnはアルキル鎖長を示す。))は指定取消となった。

OECD(2006)に記載された各CAS番号に対応するAOのアルキル鎖長の分布は表1のとおりである(化審法における指定範囲に該当する物質のCAS番号のみ記載)。

本評価に用いるAOの物理化学的性状等は、化審法における製造・輸入数量における出荷数量全体のおよそ85%を占める(平成26年度実績)C<sub>12</sub>AO(CAS:1643-20-5)を主に、一部OECD(2006)において代表的な組成のAOとされているC<sub>10-16</sub>AO(CAS:70592-80-2)の値を採用した。

表1 各CAS番号に対応するAOのアルキル鎖長の分布(%)

CAS No.	Chemical Name	Avg. Chain Length	C <sub>8</sub>	C <sub>10</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>14</sub>	C <sub>16</sub>	C <sub>18</sub>	C <sub>20</sub>
1643-20-5	1-Dodecanamine, N, N-dimethyl-, N-oxide	12.0		0-1	98-100	0-1			
70592-80-2	Amines, C10-16-alkyldimethyl, N-oxides	12.9		<1	41-75	22-51	4-9	<1	
68955-55-5	Amines, C12-18-alkyldimethyl, N-oxides	13.5		0-3	50-64	18-26	9-17	6-14	0-2
3332-27-2	1-Tetradecanamine, N, N-dimethyl-, N-oxide	14.0			2-6	86-97	1-10		
2605-79-0	1-Decanamine, N, N-dimethyl-, N-oxide	10.0		96-100	0-4				
61788-90-7	Amine oxides, cocoalkyldimethyl	13.0		<1-3	64-74	21-30	2-13	<1-9	
85408-48-6	Amines, C10-18-alkyldimethyl, N-oxides	13.2		2	58	24	10	6	
85408-49-7	Amines, C12-16-alkyldimethyl, N-oxides	13.4		0-3	40-62	20-50	9-13	5-9	
7128-91-8	1-Hexadecanamine, N, N-dimethyl-, N-oxide	16.0				<3	>94	<2	
2571-88-2	1-Octadecanamine, N, N-dimethyl-, N-oxide	18.0					<5	>94	<5

(OECD2006)より抜粋

1-2 物理化学的性状及び濃縮性

モデル推計に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を表 2 に示す。なお、表中の下線部は、評価 において精査した結果、評価 から変更した値を示している。

表 2 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ<sup>1)</sup>

項目	単位	採用値	詳細	評価 I で用いた値(参考)
分子量	-	229.4	C <sub>12</sub> AO の値	229.4
融点		(132) <sup>2)</sup>	C <sub>12</sub> AO の測定値の平均値	132 <sup>2)</sup>
沸点		- <sup>2)</sup>	90-200 で分解	426.6 <sup>2,3)</sup>
蒸気圧	Pa	5.88 × 10 <sup>-6 4)</sup>	C <sub>12</sub> AO の 25 の測定値を 20 に補正	5.88 × 10 <sup>-6 4)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	4.1 × 10 <sup>5 2)</sup>	C <sub>12</sub> AO の室温の測定値	9.7 × 10 <sup>4 5)</sup>
1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)	-	2.7 <sup>2)</sup>	C <sub>10-16</sub> AO の臨界ミセル濃度 <sup>6)</sup> とオクタノール溶解度 <sup>1)</sup> を用いて算出した logPow の推計値	4.67 <sup>2,4)</sup>
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	5.18 × 10 <sup>-6 3)</sup>	HENRYWIN (V.3.20)による 20 における C <sub>12</sub> AO の推計値	5.18 × 10 <sup>-6 3)</sup>
土壌吸着係数 (Kd)	L/kg	25.5 <sup>2)</sup>	C <sub>10-16</sub> AO の pH7.9 における Kd の測定値の平均値 <sup>1)</sup>	Koc:2772 <sup>3)</sup>
生物濃縮係数 (BCF)	L/kg	28.1 <sup>2,3)</sup>	BCFBFWIN (v.3.01)による C <sub>12</sub> AO の推計値	24 <sup>3)</sup>
生物蓄積係数 (BMF)	-	1 <sup>7)</sup>	logPow と BCF から設定	2
解離定数 (pKa)	-	4.1 <sup>2)</sup>	C <sub>10-16</sub> AO の測定値	- <sup>8)</sup>

1) 平成 28 年度第 3 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議 (平成 29 年 3 月 2 日) で了承された値

2) OECD (2006)

7) MHLW, METI, MOE (2014)

3) EPI Suite (2012)

8) 評価 I においては解離定数は考慮しない

4) MOE (2004)

-: 値を設定しないことを示す

5) MITI (1995a)

括弧内はモデルを動かすための参考値であることを示す。

6) Mukerjee et al (1971)

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

融点

評価 では OECD (2006) に記載された C<sub>12</sub>AO の測定値 (130 ~ 134 ) の平均値(132 ) を用いた。他の信頼性の定まった情報源がないことから、評価 においても OECD (2006) に記載された C<sub>12</sub>AO の測定値 (130 ~ 134 ) を採用し、参考値として C<sub>12</sub>AO の測定値の平均値(132 ) を用いる。

沸点

評価 では MPBPWIN (v1.43) による C<sub>12</sub>AO の推計値 (426.6 ) を用いた。OECD (2006) には、90-200 で分解が起こるとしており、評価 においては沸点を設定しない。

蒸気圧

評価 では MOE (2004) に記載された C<sub>12</sub>AO の 25 における測定値(8.30 × 10<sup>-6</sup> Pa) を 20 の

1 値に補正したもの ( $5.88 \times 10^{-6}$  Pa) を用いた。他に信頼性の定まった情報源に測定値はないため、  
2 評価 においてもこの値( $5.88 \times 10^{-6}$  Pa)を用いる。

#### 3 4 水に対する溶解度

5 評価 では既存点検事業 MITI (1995a)に記載された C<sub>12</sub>AO の 20 ~ 25 における測定値( 100  
6 g/L)を 20 の値に補正したもの( $9.7 \times 10^4$  mg/L) を用いた。OECD (2006) においては、C<sub>10-16</sub>AO  
7 は室温で  $4.1 \times 10^5$  mg/L まで溶解するとの記載があるため、評価 においてはこの値( $4.1 \times 10^5$   
8 mg/L)を用いる。

#### 9 10 logPow

11 評価 では MOE (2004)に記載された、KOWWIN (v1.68)を用いた C<sub>12</sub>AO の推計値(4.67) を用  
12 いた。OECD (2006)では、界面活性剤について logPow を正確に測定することは不可能であると  
13 されており、KOWWIN による推計値には正確性に限りがあるとの記載もある。そこで、OECD  
14 (2006)では、C<sub>10-16</sub>AO の臨界ミセル濃度(0.070 ~ 3.8 g/L (Mukerjee et al (1971))とオクタノール  
15 への溶解度(33.9 g/L) (OECD (2006))を用いて算出した logPow の推計値(0.95 ~ 2.7)が記載されて  
16 いる。界面活性剤については、logPow の正確な測定が不可能であり、臨界ミセル濃度とオクタノ  
17 ールへの溶解度からの推計では不確実性が残ることから、評価 においては安全側の値として最  
18 大値(2.7)を用いる。

#### 19 20 ヘンリー係数

21 評価 では HENRYWIN (v3.20) を用いた 20 における C<sub>12</sub>AO の推計値 ( $5.18 \times 10^{-6}$  Pa·  
22 m<sup>3</sup>/mol) を用いた。信頼性の定まった情報源に測定値はないため、評価 においてもこの値 ( $5.18$   
23  $\times 10^{-6}$  Pa·m<sup>3</sup>/mol) を用いる。

#### 24 25 土壌吸着係数

26 評価 では KOCWIN (v2.00) を用いた 20 における C<sub>12</sub>AO の炭素補正土壌吸着係数 (K<sub>oc</sub>)  
27 の推計値 (2772 L/kg)を用いた。ただし、KOCWIN の結果には、AO は第四級アンモニウム化合  
28 物であり、第四級アンモニウム化合物の土壌吸着はイオン交換によるメカニズムで生じていると  
29 示唆される、と記載されていた。また、KOCWIN には第四級アンモニウム化合物のトレーニング  
30 セットを含んでいないため、AO の K<sub>oc</sub> の推計は KOCWIN の範囲外であるとの記載が計算結果  
31 にあった。OECD (2006)では、3 種類の土壌タイプで測定された土壌吸着係数 (K<sub>d</sub>) の測定値  
32 (C<sub>12</sub>AO : 8 L/kg、56 L/kg、16 L/kg、C<sub>14</sub>AO : 24 L/kg、17 L/kg、33 L/kg)が記載されており、  
33 K<sub>d</sub> の測定値を表 3 に示す。評価 において淡水域の水及び底質間隙水の pH として 7.6、海水域  
34 の水及び底質間隙水の pH として 8.2 を想定しているため、表 3 より pH7.6 ~ 8.2 の範囲である  
35 Soil type 3 から得られた K<sub>d</sub> の値(18 L/kg 及び 33 L/kg)の算術平均値(25.5 L/kg)を評価 では用  
36 いる。

1

表 3 OECD(2006)に記載された Kd 値

アルキル鎖長	Kd	土壌番号	pH	有機物含有率	粘土含有率
C12	8 L/kg	Soil type 1	6.1	2.70%	3.20%
	56 L/kg	Soil type 2	4.6	0.80%	11%
	18 L/kg	Soil type 3	7.9	2.60%	24%
C14	24 L/kg	Soil type 1	6.1	2.70%	3.20%
	17 L/kg	Soil type 2	4.6	0.80%	11%
	33 L/kg	Soil type 3	7.9	2.60%	24%

2

3 BCF

4 評価 1 では BCFBAFWIN (v3.01)を用いた 20 における C<sub>12</sub>AO の推計値(23.66 L/kg)を用い  
5 た。信頼性の定まった情報源に測定値はないため、評価 1 においては C<sub>12</sub>AO の logPow (2.7) と  
6 BCFBAFWIN を用いた 20 における C<sub>12</sub>AO の推計値 (28.1 L/kg) を用いる。

7

8 BMF

9 評価 2 では logPow と BCF の値から化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技  
10 術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。)(MHLW, METI, MOE (2014)) に従って設定した  
11 値 (2) を用いた。信頼性の定まった情報源に測定値はないため、評価 2 においては、logPow の  
12 値(2.7)と BCF の値(28.1 L/kg)から技術ガイダンスに従って設定した値(1) を用いる。

13

14 解離定数

15 本物質は弱い塩基性物質である。OECD (2006)には酸性溶液中でカチオン種  $[R(CH_3)_2 N^+ \cdot OH]$ と  
16 して存在し、中性又は塩基性溶液では中性種 $[R(CH_3)_2 NO \cdot H_2O]$ と存在しているとの記載があり、  
17 C<sub>10-16</sub>AO の 25-26.9°C における酸解離定数の測定値(4.1)が記載されている。カチオン種 $[R(CH_3)_2$   
18  $N^+ \cdot OH]$ の存在率は、pH=5 で 11.2%、pH=6 で 1.2%、pH=7 で 0.1%、pH=8 で 0%、pH=9 で 0%と  
19 なり、中性種が環境の pH で主に存在すると考えられる。

1-3 分解性

エラー！参照元が見つかりません。にモデル推計に採用した分解に係るデータを表 4 に示す。

表 4 分解に係るデータのまとめ<sup>1)</sup>

項目		半減期 (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	OH ラジカルとの反応	0.59 C <sub>12</sub> AO の反応速度定数の推計値 <sup>2,3,4,5)</sup> から OH ラジカル濃度 5 × 10 <sup>5</sup> molecule/ cm <sup>3</sup> として算出
		オゾンとの反応	NA
		硝酸ラジカルとの反応	NA
水中	水中における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	5 C <sub>12</sub> AO の OECD TG301C 試験結果 <sup>3,4,6)</sup> より、技術ガイダンス <sup>7)</sup> に従い設定
		加水分解	- OECD (2006) において水中で安定とされている
		光分解	NA
土壌	土壌における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	5 水中生分解の項参照
		加水分解	- 水中加水分解の項参照
底質	底質における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	20 水中生分解半減期の 4 倍と仮定
		加水分解	- 水中加水分解の項参照

1) 平成 28 年度第 3 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議（平成 29 年 3 月 2 日）で了承された値

2) MOE (2004)

6) MITI (1995b)

3) NITE (2007)

7) MHLW, METI, MOE (2014)

4) OECD (2006)

NA: 情報が得られなかったことを示す

5) EPI-Suite (2012)

-: 無視できると考えられることを示す

上記分解項目について、精査概要を以下に示す。なお、「総括分解半減期」とは、分解の機序を区別しない環境媒体ごとのトータルの半減期のことを示す。

大気

大気中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期についても、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応に関する情報は得られなかった。

-1 OH ラジカルとの反応の半減期

大気中における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値に関する情報は得られなかったため、AOPWIN (v1.92) を用いた C<sub>12</sub>AO の反応速度定数の推計値 (2.7×10<sup>-11</sup> cm<sup>3</sup>/ molecule/s) を半減期算出に採用する。この反応速度定数は MOE (2004)、NITE (2007)、OECD (2006) にも記載されている。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンス(MHLW, METI, MOE (2014))より 5×10<sup>5</sup> molecule/cm<sup>3</sup>とした場合、半減期は 0.59 日と算出される。評価 においてはこの値 (0.59 日) を用いる。

1 水中

2 水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期について光  
3 分解の反応に関する情報は得られなかったが、生分解と加水分解の機序別の反応に関する情報  
4 が得られた。

5 -1 生分解の半減期

6 MITI (1995b) において被験物質濃度 100 mg/L (C<sub>12</sub>AO)、活性汚泥濃度 30 mg/L で 28 日間  
7 試験を行った結果、BOD 分解度、TOC 分解度及び LC-MS 分解度はそれぞれ 63%、68%及び  
8 100%であった。OECD (2006) 及び日本石鹼洗剤工業会(2001)においても微生物を用いた下水  
9 処理のモデルとなる連続活性汚泥試験で、二酸化炭素発生量測定での分解率が 69~76%、  
10 C<sub>12</sub>AO としての除去率が 99.8%以上であることなどから、好気的な条件下では生分解されやす  
11 いとしている。また、OECD (2006)には、様々な鎖長の AO の分解度試験結果が表 5 の通りま  
12 とめられており、嫌気性条件下でも分解するとの記載がある。MITI (1995b)において易分解性  
13 試験における分解度が 60%以上であることから、技術ガイダンスより表層水における生分解半  
14 減期は 5 日と算出される。評価 においてはこの値(5 日)を用いる。

15  
16 表 5 OECD (2006)に記載された分解度試験の結果

CAS 番号	アルキ ル鎖長	平均 鎖長	試験方法	28 日間におけ る分解度	判定結果	参考文献
2605-79- 0	C10	C10	OECD 301E	97% DOC	Readily biodegradable	Th. Goldschmidt AG (1997)
70592- 80-2	C10-16	C12.9	OECD 301B	63.1% ThO <sub>2</sub> (26 日間)	Ultimately biodegradable	The Procter & Gamble Company (1977B)
61788- 90-7	C12-14	C13.0	OECD 301D	93% ThO <sub>2</sub>	Readily biodegradable	Akzo Chemie (1987)
85408- 49-7	C12-16	C13.4	OECD 301D	48% ThO <sub>2</sub> (30 日間)	Inherently biodegradable	Henkel KGaA (2000)
68955- 55-5	C12-18	C13.5	OECD 301D	82% ThO <sub>2</sub>	Readily biodegradable	Akzo Nobel Chemicals (19901)

17  
18 なお、下水処理場での活性汚泥による除去率については、OECD (2006)において C<sub>12</sub>AO 及  
19 び C<sub>10-16</sub>AO の OECD 303A 試験結果(除去率：>99.8%)及び C<sub>10-16</sub>AO の米国、オランダにおけ  
20 る除去率の測定値(米国：>96%、オランダ：>94.9~99.5%)の記載があった。NITE (2007) に  
21 においても、除去率の測定値(>99%)の記載があった。

22 -2 加水分解の半減期

23 OECD (2006) において水中(pH4-9)では安定と記載されている。

24  
25 土壌

26 土壌中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、生分解と加水分解の機序別の  
27 反応に関する情報が得られた。

28 -1 生分解の半減期

29 土壌中での生分解半減期の測定値が得られなかったため、評価 においては技術ガイダンス  
30 に従い、水中における生分解半減期と同じ値(5 日)を用いる。

31 -2 加水分解の半減期

32 OECD (2006) において水中(pH4-9)では安定と記載されている。

1

2 底質

3 底質中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、生分解と加水分解の機序別の  
4 反応に関する情報が得られた。

5 -1 生分解の半減期

6 底質での生分解半減期の測定値が得られなかったため、評価 においては技術ガイダンスに  
7 従い、水中における生分解半減期に「4」を乗じた値(20 日)を用いる。

8 -2 加水分解の半減期

9 OECD (2006) において水中(pH4-9)では安定と記載されている。

10

1 2 【付属資料】

2 2-1 物理化学的性状等一覧

3 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

4  
5 出典)

6 EPI Suite(2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11, 2012.

7 MHLW, METI, MOE(2014): 化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイ  
8 ダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

9 MITI(1995a): MITI. アルキルアルキル(又はアルケニル, アルキル又はアルケニルのうち少  
10 くとも1個はC 8 ~ 24で他はC 1 ~ 5)アミンオキサイド [N, N-ジメチルドデシルア  
11 ミンN-オキシド(被験物質番号 K-1180)にて試験実施]の物理化学性状の測定, 既存化学  
12 物質点検, 1995.

13 MITI(1995b): MITI. アルキルアルキル(又はアルケニル, アルキル又はアルケニルのうち少  
14 くとも1個はC 8 ~ 24で他はC 1 ~ 5)アミンオキサイド [N, N-ジメチルドデシルア  
15 ミンN-オキシド(被験物質番号 K-1180)にて試験実施]の微生物による分解度試験, 既存  
16 化学物質点検, 1995.

17 MOE(2004): MOE. 化学物質の生態リスク初期評価 第3巻, [17]N, N-ジメチルドデシル  
18 アミン = N = オキシド. 2004.

19 Mukerjee P and Mysels K. (1971). Critical Micelle Concentrations of Aqueous Surfactant  
20 Systems. Office of Standard Reference Data National Bureau of Standards Washington,  
21 D.C. (NSRDS-NBS 36).

22 NITE(2007): NITE. 化学物質の初期リスク評価書, N, N-ジメチルドデシルアミンN-オ  
23 キシド. Ver. 1.0, No. 21, 2007.

24 OECD(2006): OECD. SIDS Initial Assessment Report For SIAM 22, Amine Oxides. 2006.

25 日本石鹼洗剤工業会(2001): 日本石鹼洗剤工業会. 界面活性剤のヒト健康影響および環境影響  
26 に関するリスク評価. N,N-ジメチルドデシルアミン = N-オキシドのヒト健康影響および環境影  
27 響に関するリスク評価. 2001

28

29 2-2 その他

30 特になし。