「17] N.N-ジメチルドデシルアミン=N=オキシド

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: N.N-ジメチルドデシルアミン=N=オキシド

(別の呼称:アルキルアミンオキサイド、ドデシルジメチルアミンオキシド)

CAS 番号: 1643-20-5

化審法官報告示整理番号:2-198

化管法政令番号:1-166 RTECS 番号:JR6650000

分子式: C₁₄H₃₁NO 分子量: 229.46

換算係数:1ppm=9.38mg/m³(気体、25℃)

構造式:



(2) 物理化学的性状

本物質は白色結晶で、潮解性がある1)。

融点	132∼133°C ²⁾
沸点	426.62℃(推定値)³)
密度	
蒸気圧	6.23×10^{-8} mmHg(= 8.30×10^{-6} Pa) (25°C) ²⁾
分配係数(1-オクタノール/水)(logKow)	4.67 4)
解離定数(pKa)	
水溶性(水溶解度)	190g/L(25°C) ⁵⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

N,N-ジメチルドデシルアミン=N=オキシドの分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性

好気的分解(分解性が良好と判断される物質⁶⁾)

分解率:BOD 63%、TOC 68%、LC-MS 100%(試験期間:4週間、被験物質濃度:

100mg/L、活性汚泥濃度:30mg/L)⁷⁾

化学分解性

OH ラジカルとの反応性(大気中)

反応速度定数: 2.72×10⁻¹¹cm³/(分子·sec) (25℃、AOPWIN⁸⁾ により計算)

半減期: $2.4\sim24$ 時間 (OH ラジカル濃度を $3\times10^6\sim3\times10^5$ 分子/cm^{3 9)} と仮定して

計算)

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量·輸入量等

「化学物質の製造・輸入量に関する実態調査」によると平成13年度実績はアルキル(又は

アルケニル,アルキル又はアルケニルのうち少なくとも 1 個は $C=8\sim24$ で他は $C=1\sim5$)アミンオキサイドとして $1,000\sim10,000t$ 未満である 10 。OECD に報告している生産量は $1,000t\sim10,000t$ である。化学物質排出把握管理促進法(化管法)の製造・輸入量区分は 1,000t である。

② 用 途

本物質の主な用途は有機化学製品用(洗剤等)、添加剤(繊維用、油用、その他)¹⁰⁾や、界面活性剤である¹¹⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

化学物質排出把握管理促進法第一種指定化学物質(政令番号:166)として指定されている。

2. 暴露評価

生態リスクの初期評価のため、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一般環境等からの暴露を評価することとし、安全側に立った評価の観点から高濃度側のデータによって暴露評価を行った。データの信頼性を確認した上で最大濃度を評価に用いている。

(1) 環境中への排出量

N,N-ジメチルドデシルアミン=N=オキシドは化管法の第一種指定化学物質である。同法に基づき集計された平成13年度の届出排出量・移動量及び届出外排出量を表2.1に示す。

総排出量 (kg/年) 届出 届出外 (国による推計) 排出量 (kg/年) 移動量 (kg/年) 排出量 (kg/年) 届出 届出外 合計 事業所 非対象業 排出量 排出量 公共用水 業象技 土壌. 埋立 下水道 家庭 移動体 大気 全排出•移動量 465 3884 30614 291629 1544225 1835854 1836321

表 2.1 平成 13 年度 PRTR データによる排出量及び移動量

_業種別届出量(割合)						
化学工業	(100%)	105 (22.6%)		0	3879 (99.9%)	
その他の製造業	0	0	0	0	5 (0.1%)	100 (0.3%)
飲料・たばこ・飼料製造業	0	360 (77.4%)		0	0	0

総排出量の構成比 (%)				
届出	届出外			
0.03	99.97			

本物質の平成 13 年度における環境中への総排出量は、1,836,321kg と報告されており、そのうち届出排出量は 467kg で全体の 0.03%であった。届出排出量のうち 2kg が大気へ、465kg が公共用水域へ排出されるとしており、公共用水域への排出量が多い。その他に下水道への移動量が 4 t 届け出られている。主な排出源は、大気への排出が多い業種は化学工業(100%)であり、公共用水域への排出が多い業種は飲料・たばこ・飼料製造業(77.4%)及び化学工業(22.6%)であった。

表 2.1 に示したように PRTR 公表データでは、届出排出量は媒体別に報告され、その集計結果が公表されているが、届出外排出量の推定は媒体別には行われていない。届出外排出量の媒体別配分を「PRTR データ活用環境リスク評価支援システム」 $^{1)}$ で別途行っているが、本物質については媒体別の配分がされていない。本物質の主な用途が界面活性剤であること、届出排出量のほとんどが公共用水域に排出されること、水溶解度も 190g/L(25°C)と高いことを考慮して届出外排出量をすべて公共用水域へ排出されるとした。その結果と届出排出量を媒体別に合計したものを表 2.2 に示す。

表 2.2 環境中への推定排出量

		推定排出量(kg)
大	気	2
水	域	1,836,319
土	壌	0

(2) 媒体別分配割合の予測

本物質の環境中の媒体別分配割合を PRTR データ活用環境リスク評価支援システム(改良版)を用いて予測した²⁾。予測の対象地域は、平成13年度環境中への推定排出量が最大であった愛知県(水域への排出量117t)とした。予測結果を表2.3に示す。

表 2.3 媒体別分配割合の予測結果

		分配割合 (%)
大	気	0.0
水	域	40.4
土	壌	0.0
底	質	59.6

⁽注)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

本物質の水質及び底質中の濃度について情報の収集を試みたが、信頼性が確認された調査例は得られなかった。

(4) 水生生物に対する暴露の推定(水質に係る予測環境中濃度:PEC)

本物質について、実測データに基づき水生生物に対する暴露の推定を行うことはできなかった。

3. 生態リスクの初期評価

生態リスクの初期評価として、水生生物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) 生態毒性の概要

本物質の水生生物に対する影響濃度に関する知見の収集を行い、その信頼性を確認したものについて生物群、毒性分類別に整理すると表 3.1 のとおりとなる。

生物種	急	慢	毒性値	生物名	生物分類	エンドポイント	暴露期間	ſ	言頼性		Ref.
工10/1里	性	性	[µg/L]		上10万粮	/影響内容	[目]	a	b	c	No.
藻類		0	0.9	Pseudokirchneriella subcapitata	緑藻類	NOEC GRO(AUG)	3	0			1)
		0	4	subcapitata	緑藻類	NOEC GRO(RATE)*	3	0			1)
	0			subcapitata	緑藻類	EC ₅₀ GRO(AUG)	3	\circ			1)
	0		100	Pseudokirchneriella subcapitata	緑藻類	EC ₅₀ GRO(RATE)*	3	0			1)
甲殼類		0	360	Daphnia magna	オオミジンコ	NOEC REP	21	\circ			1)
	0		2,230	Daphnia magna	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	0			1)
魚類	0		29,900	Oryzias latipes	メダカ	LC ₅₀ MOR	4	0			1)
その他	_	_	_	_	_	_	_	_	_	_	_

表 3.1 生態毒性の概要

太字の毒性値は、PNEC 算出の際に参照した知見として本文で言及したもの、下線を付した毒性値は PNEC 算出の根拠として採用されたものを示す。

信頼性) a: 毒性値は信頼できる値である、b: ある程度信頼できる値である、c: 毒性値の信頼性は低いあるいは不明

エンド・ボーイント) EC50 (Median Effective Concentration) : 半数影響濃度、LC50 (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)、成長(動物)、IMM(Immobilization):遊泳阻害、MOR(Mortality):死亡、REP(Reproduction):繁殖、再生産

- () 内) 試験結果の算出法: AUG (Area Under Growth Curve) 生長曲線下の面積により求めた結果、RATE 生長速度より求めた結果
- *):文献1)をもとに、試験時の設定濃度を用いて0-72時間の毒性値を再計算したもの2)

(2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて、信頼できる知見のうち生物群ごとに値の最も低いものを整理し、そのうち最も低い値に対して情報量に応じたアセスメント係数を適用することにより、予測無影響濃度 (PNEC) を求めた。

急性毒性値については、藻類では Pseudokirchneriella subcapitata に対する生長阻害の速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC_{50}) が $100~\mu g/L$ 、甲殻類では Daphnia magna に対する遊泳阻害の 48 時間半数影響濃度 (EC_{50}) が $2,230~\mu g/L$ 、魚類では Oryzias latipes に対する 96 時間半数致死濃度 (LC_{50}) が $29,900~\mu g/L$ であった。急性毒性値について 3 生物群(藻類、甲殻類及び魚類)の信頼できる知見が得られたため、アセスメント係数として $100~\epsilon$ 用いることとし、上記の毒性値のうち最も低い値(藻類の $100~\mu g/L$)にこれを適用することにより、急性毒性値による PNEC として $1~\mu g/L$ が得られた。

慢性毒性値については、藻類では Pseudokirchneriella subcapitata に対する生長阻害の速度法

による 72 時間無影響濃度(NOEC)が $4 \mu g/L$ 、甲殻類では *Daphnia magna* に対する繁殖阻害の 21 日間無影響濃度(NOEC)が $360 \mu g/L$ であった。慢性毒性値について 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、アセスメント係数として 100 を用いることとし、上記の毒性値のうち最も低い値(藻類の $4 \mu g/L$)にこれを適用することにより、慢性毒性値 による PNEC として $0.04 \mu g/L$ が得られた。

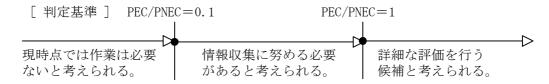
本物質の PNEC としては、以上により求められた PNEC のうち低い値である、藻類の慢性 毒性値をアセスメント係数 100 で除した $0.04\,\mu\text{g/L}$ を採用する。

(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

媒体		平均濃度	最大値濃度(PEC)	PNEC	PEC/
					PNEC 比
水質	公共用水域·淡水	我が国におけるデータは得ら	我が国におけるデータは得られ	0.04	_
		れなかった	なかった	ца/І	
	公共用水域·海水	我が国におけるデータは得ら	我が国におけるデータは得られ	μg/L	_
	, , , , , , , , , , , , , ,	れなかった	なかった		

注:公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。



現時点では評価に耐える十分なデータがないため、生態リスク評価の判定はできない。

OECD に報告している生産量は $1,000\sim10,000$ t 未満で、PRTR 排出量は届出外も含めると 1,800t が水域に排出されると推測されている。本物質は良分解性であるが、界面活性剤として用いられており、水溶解度が高い。また、藻類の慢性毒性値から求めた PNEC 値は $0.04\mu g/L$ と小さい値を示している。以上のことから、本物質の環境中の存在状況について把握に努める必要があると考えられる。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 講談社サイエンティフィク (1985): 有機化合物辞典.
- 2) 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, p.596.
- 3) U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWINTM v1.41
- 4)U.S. Environmental Protection Agency, KOWWINTM v1.67
- 5) U.S. Environmental Protection Agency, WSKOWWINTM v1.41
- 6) 通産省公報(1995.12.28)
- 7) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ、1180
- 8) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWINTM v1.91
- 9) 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, p.xiv.
- 10) 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.
- 11) 化学工業日報社(2003): 14303 の化学商品

(2) 暴露評価

- 1) 環境省環境リスク評価室、(社) 環境情報科学センター(2003): PRTR データ活用環境 リスク評価支援システム 2.0
- 2) (独)国立環境研究所(2004):平成 15 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書

(3) 生態リスクの初期評価

- 1) 環境庁 (1999): 平成 10 年度 生態影響試験実施事業報告
- 2) (独) 国立環境研究所 (2004): 平成 15 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書