

[2 7] ヘキサデシルトリメチルアンモニウム=ブロミド

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：ヘキサデシルトリメチルアンモニウム=ブロミド
 (別の呼称：セチルトリメチルアンモニウムブロマイド)

CAS 番号：57-09-0

化審法官報告示整理番号：2-184

化管法政令番号：2-69

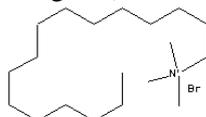
RTECS 番号：BQ7875000

分子式：C₁₉H₄₂BrN

分子量：364.45

換算係数：1ppm=14.90mg/m³(気体、25°C)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は刺激性のある結晶である¹⁾。

融点	237～243°C ^{2), 3)}
沸点	520.11°C(MPBPWIN ⁴⁾ により計算)
密度	
蒸気圧	4.02 × 10 ⁻¹¹ mmHg(=5.36 × 10 ⁻⁹ Pa)(MPBPWIN ⁴⁾ により計算)
分配係数 (1-オクタノール/水) (logK _{ow})	3.18(KOWWIN ⁵⁾ により計算)
水溶性 (水溶解度)	100g/L ²⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

ヘキサデシルトリメチルアンモニウム=ブロミドの分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性	
<u>好氣的分解</u>	
分解率：BOD 0%、TOC 17%、HPLC 19%、UV-VIS 0% (試験期間：4 週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L) ⁶⁾	
化学分解性	
<u>OH ラジカルとの反応性 (大気中)</u>	
反応速度定数：3.42 × 10 ⁻¹¹ cm ³ /(分子・sec) (25°C、AOPWIN ⁷⁾ により計算)	
半減期：1.9～18.8 時間 (OH ラジカル濃度を 3 × 10 ⁶ ～3 × 10 ⁵ 分子/cm ³ ⁸⁾ と仮定して計算)	
生物濃縮性 (蓄積性が無い又は低いと判断される化学物質 ⁹⁾)	
濃縮倍率：407～741 (設定濃度：0.05mg/L、試験期間：8 週間) ⁶⁾	
濃縮倍率：444～677 (設定濃度：0.005mg/L、試験期間：8 週間) ⁶⁾	

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の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10tである。

② 用途

本物質の主な用途は、加工剤(繊維柔軟剤)、触媒(相間異動)、その他(消毒剤)とされている¹⁰⁾。

(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二種指定化学物質（政令番号：69）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

ヘキサデシルトリメチルアンモニウム=ブロミド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

PRTR データが得られなかったため、Level III Fugacity Model¹⁾による媒体別分配割合予測の結果²⁾を表 2.1 に示す。

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

排出先	大気	水	土壌	大気/水/土壌
排出速度 (kg/時間)	1000	1000	1000	1000 (各々)
大気	1.1	0.0	0.0	0.2
水	5.5	97.6	0.9	25.5
土壌	93.3	0.0	99.1	73.6
底質	0.1	2.4	0.0	0.6

(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

本物質の環境中等の濃度について情報の整理を行ったが、信頼性が確認された調査例はなかった。

(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。

表 3.1 生態毒性の概要

生物種	急性	慢性	毒性値 [µg/L]	生物名	生物分類	エンドポイント/ 影響内容	暴露期間 [日]	信頼性			Ref. No.
								a	b	c	
藻類	○		<u>30</u>	<i>Microcystis aeruginosa</i>	藍藻類 (アオコ)	EC ₅₀ GRO	4	○			1)-12631
	○		90	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO	4	○			1)-12631
甲殻類	○		160	<i>Echinogammarus tibaldii</i>	端脚類	LC ₅₀ MOR	4			○	1)-19942
	○		240	<i>Echinogammarus tibaldii</i>	端脚類	LC ₅₀ MOR	4			○	1)-18621
	○		720	<i>Echinogammarus tibaldii</i>	端脚類	LC ₅₀ MOR	4			○	1)-18621
魚類	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
その他	○		<u>960</u>	<i>Colpidium campylum</i>	原生動物 繊毛虫	EC ₅₀ POP	1	○			1)-16260

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
 エンドポイント) EC₅₀ (Median Effective Concentration) : 半数影響濃度、LC₅₀ (Median Lethal Concentration) : 半数致死濃度
 影響内容) GRO (Growth) : 生長 (植物)、成長 (動物)、MOR (Mortality) : 死亡、POP (Population) : 個体群の変化

(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 *Microcystis aeruginosa* に対する生長阻害の 96 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 30 µg/L、その他の生物では原生動物繊毛虫 *Colpidium campylum* に対する個体群の変化の 24 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 960 µg/L であった。急性毒性値について 1 生物群 (藻類) 及びその他の生物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 1000 を用いることとし、藻類の毒性値 (30 µg/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 0.03 µg/L が得られた。

慢性毒性値については、信頼できる毒性値は得られなかった。

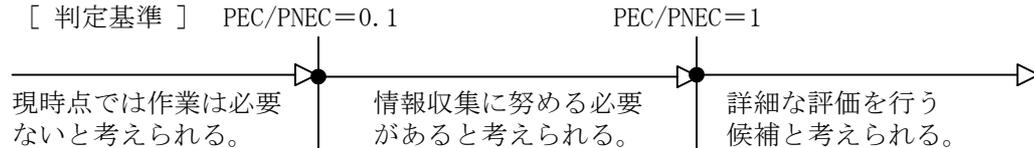
本物質の PNEC としては、藻類の急性毒性値をアセスメント係数 1000 で除した 0.03 µg/L を採用する。

(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れなかった	我が国におけるデータは得られなかった	0.03 μg/L	—
	公共用水域・海水	我が国におけるデータは得られなかった	我が国におけるデータは得られなかった		—

注：公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。



現地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。

本物質の化管法の製造・輸入量区分は 10t であるが、PRTR 排出量は得られていない。本物質は繊維柔軟剤や消毒剤に用いられており、水域への放出も懸念されるが、水溶性が高く難分解性であり、水域に放出されるとその大半が水域中に留まると予測されている。藻類の急性毒性値から求めた PNEC 値は 0.03μg/L と小さいが、生態毒性に関する知見は限られている。したがって、生産量や環境中への排出に関する情報の把握に努めるとともに、試験の実施を通じて生態毒性に関する知見を充実させ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) 東京化学同人 (1989) : 化学大辞典.
- 2) RICHARDSON, M.L. and GANGOLLI, S. (1995) *Dictionary of Substances and Their Effects; Index*, Royal Society of Chemistry
- 3) BUDAVARI, S., ed. (1996) *The Merck Index*, 12th ed., Whitehouse Station, Merck & Co.
- 4) U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWIN™ v1.41
- 5) U.S. Environmental Protection Agency, KOWWIN™ v1.67
- 6) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ、0663
- 7) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v1.91
- 8) 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.
- 9) 通産省公報 (1993.12.28)
- 10) 環境省(2003) : PRTR 法指定化学物質有害性データ.

(2) 暴露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPIWIN™ v3.11
- 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)- : U.S.EPA 「AQUIRE」

12631 : Lewis, M.A., and B.G. Hamm (1986): Environmental Modification of the Photosynthetic Response of Lake Plankton to Surfactants and Significance to a Laboratory-Field Comparison. *Water Res.* 20(12):1575-1582.

16260 : Dive, D., S. Robert, E. Angrand, C. Bel, H. Bonnemain, L. Brun, Y. Demarque, A. Le Du, and Bouhouti El (1989): A Bioassay Using the Measurement of Growth Inhibition of a Ciliate Protozoan: *Colpidium campylum* Stokes. *Hydrobiologia* 188/189:181-188.

18621 : Pantani, C., G. Pannunzio, M. De Cristofaro, A.A. Novelli, and M. Salvatori (1997): Comparative Acute Toxicity of Some Pesticides, Metals, and Surfactants to *Gammarus italicus* Goedm. and *Echinogammarus tibaldii* Pink. and Stock. *Bull.Environ.Contam.Toxicol.* 59(6):963-967.

19942 : Pantani, C., N. Spreti, A.A. Novelli, A.V. Ghirardini, and P.F. Ghetti (1995): Effect of Particulate Matter on Copper and Surfactants Acute Toxicity to *Echinogammarus tibaldii* (Crustacea, Amphipoda). *Environ.Technol.* 16(3):263-270.