

[5] *N,N*-ジメチルオクタデシルアミン

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： <i>N,N</i> -ジメチルオクタデシルアミン (別の呼称： <i>N,N</i> -ジメチル- <i>n</i> -オクタデシルアミン)
CAS 番号：124-28-7
化審法官報公示整理番号：2-176 (<i>N,N,N</i> -トリ-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C8~24で他はH又はC1~5) アミン)、2-185 (<i>N</i> -アルキル [又はアルケニル (C16~28)] - <i>N,N</i> -ジアルキル (C1~5 又は H) アミン)
化管法政令番号：
RTECS 番号：RG4200000
分子式：C ₂₀ H ₄₃ N
分子量：297.56
換算係数：1 ppm = 12.17 mg/m ³ (気体、25°C)
構造式：

(2) 物理化学的性状

本物質は常温ではアミン臭のある白色の固体¹⁾である。

融点	22.9°C ²⁾ 、22.89°C ³⁾ 、22°C(760 mmHg) ⁴⁾
沸点	347°C(730 mmHg、分解) ⁴⁾ 、350°C (MPBPVPWIN ⁵⁾ により計算)
密度	0.806 (20°C) ⁴⁾
蒸気圧	6.7 mmHg(=8.9×10 ⁻⁴ Pa) (20°C)、1.35 mmHg(=1.8×10 ⁻³ Pa) (25°C) ⁴⁾ 、1.7×10 ⁻⁴ mmHg(=0.022Pa) (25°C、MPBPVPWIN ⁵⁾ により計算)
分配係数 (1-オクタノール/水) (log Kow)	8.4 (KOWWIN ⁶⁾ により計算)
解離定数 (pKa)	
水溶性 (水溶解度)	7 mg/L(20°C) ⁴⁾ 、8.9×10 ⁻³ mg/L (25°C、WSKOWWIN ⁷⁾ により計算)

(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 ⁸⁾)
分解率：BOD 56% (平均値)、TOC 94% (平均値)、GC 100% (平均値)
(試験期間：4週間、被験物質濃度：30 mg/L、活性汚泥濃度：100 mg/L) ⁹⁾

化学分解性

OH ラジカルとの反応性 (大気中)

反応速度定数： $1.0 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$ (AOPWIN¹⁰)により計算)

半減期： 0.63～6.3 時間 (OH ラジカル濃度を $3 \times 10^6 \sim 3 \times 10^5 \text{ 分子/cm}^3$ ¹¹⁾と仮定し計算)

生物濃縮性

生物濃縮係数(BCF)： 700 (BCFBAF¹²) により計算)

土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc)： 2.1×10^5 (KOCWIN¹³) により計算)

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

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^{14),15),16),17),18)}。

表 1.1 製造・輸入数量の推移

平成(年度)	21	22	23	24	25
製造・輸入数量(t) ^{a)}	1,124 ^{b)}	4,000 ^{c),d)}	6,000 ^{c),d)}	5,000 ^{c),d)}	6,000 ^{c),d)}
		— ^{c),e),f)}	— ^{c),e),f)}	— ^{c),e),f)}	X ^{c),f),g)}

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。

d) 「*N,N,N*-トリ-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 C8～24 で他は H 又は C1～5) アミン」としての値を示す。

e) 公表されていない。

f) 「*N*-アルキル [又はアルケニル (C=16～28)] -*N,N*-ジアルキル (C=1～5 又は H) アミン」としての値を示す。

g) 届出事業者が 2 社以下のため、製造・輸入数量は公表されていない。

「化学物質の製造・輸入に関する実態調査」による製造 (出荷) 及び輸入量の推移を表 1.2 に示す^{19),20),21)}。

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	— ^{c)}	1,000～10,000 t/年未満	1,000～10,000 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家等のうち、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。

b) 「*N,N,N*-トリ-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 C8～24 で他は H 又は C1～5) アミン」としての値。

c) 公表されていない。

② 用途

本物質の主な用途は、両性界面活性剤・アミノキサイド・第四級アンモニウム塩・樹脂処理剤・消毒剤・カチオン染料原料、顔料フラッシング剤、医薬部外品添加剤(薬用石けん、化粧品等)とされている²²⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

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:270)に指定されていた。

2. 曝露評価

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基本的には水生生物の生息が可能な環境を保持すべき公共用水域における化学物質の曝露を評価することとし、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が得られなかったため、Mackay-Type Level III Fugacity Model¹⁾により媒体別分配割合の予測を行った。予測結果を表 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	0.1	0.0	0.0	0.0
水域	0.1	27.0	0.0	0.3
土壌	99.7	0.0	100.0	98.8
底質	0.2	73.0	0.0	0.9

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 ^{a)}	算術 平均値	最小値	最大値 ^{a)}	検出 下限値	検出率	調査地域	測定年度	文献
公共用水域・淡水 μg/L	0.0017	0.0036	<0.0008	0.015	0.0008	5/8	全国	2013	2)
公共用水域・海水 μg/L	<0.0008	<0.0008	<0.0008	<0.0008^{b)}	0.0008	0/4	全国	2013	2)
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) 最大値また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。

b) 統一の検出下限値未満の検出値として0.00055 μg/Lがある。

(4) 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 2.3 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 0.015 µg/L 程度、海水域では概ね 0.0008 µg/L 未満となった。

表 2.3 公共用水域濃度

水 域	平 均	最 大 値
淡 水	0.0017 µg/L 程度 (2013)	0.015 µg/L 程度 (2013)
海 水	概ね 0.0008 µg/L 未満 (2013)	概ね 0.0008 µg/L 未満(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. 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、魚類及びその他生物）ごとに整理すると表 3.1 のとおりとなった。

表 3.1 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		○	0.99 *1	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO (RATE)	3	B*2	B*2	2)-1
	○		1.8 *1	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (RATE)	3	B*2	B*2	2)-1
		○	5.17	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	NOEC GRO (RATE)	3	B	B	3)-1
	○		14.1	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO (RATE)	3	B	B	3)-1
甲殻類		○	2.74 *3	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	B*2	B*2	2)-2
	○		15.5	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	B*2	B*2	1)
	○		74	<i>Americamysis bahia</i>	アミ科	LC ₅₀ MOR	4	B	B	4)-1
	○		510	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	A	A	3)-2
魚類	○		79.3	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4	B*2	B*2	1)
	○		180	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	ニジマス	LC ₅₀ MOR	4	B	B	3)-3
その他			—	—	—	—	—	—	—	—

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 : 試験は条件付きで信頼できる、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 : 毒性値は条件付きで採用できる、C : 毒性値は採用できない

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、

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 1) をもとに、試験中の実測濃度を用いて、速度法により再計算した値

*2 界面活性作用のある助剤を用いているため、試験の信頼性、採用の可能性ともに「B」とした

*3 文献1)をもとに、試験中の実測濃度（時間加重平均値）に基づき算出した値

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¹⁾は、OECD テストガイドライン No.201 (1984) に準拠し、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)、0.00152、0.00274、0.00494、0.00889、0.0160 mg/L (公比 1.8) であった。試験溶液の調製には、助剤として硬化ひまし油 (HCO-40) 0.160 mg/L が用いられた。被験物質の実測濃度（試験開始時と終了時の幾何平均値）は 0 (対照区、助剤対照区)、0.563、0.718、0.990、1.31、1.78 µg/L であった²⁾⁻¹。速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は、実測濃度に基づき 1.8 µg/L、速度法による 72 時間無影響濃度 (NOEC) は、実測濃度に基づき 0.99 µg/L であった²⁾⁻¹。

2) 甲殻類

環境省¹⁾は、OECD テストガイドライン No.202 (1984) 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。試験は半止水式(24 時間後換水)で行われ、設定試験濃度は 0 (対照区、助剤対照区)、0.00953、0.0171、0.0309、0.0556、0.100 mg/L (公比 1.8) であった。試験溶液の調製には、試験用水として脱塩素水道水（硬度 61.0 mg/L、CaCO₃ 換算）が、助剤として硬化ひまし油 (HCO-40) 1.00 mg/L が用いられた。被験物質の実測濃度は、試験開始時及び換水前に、それぞれ設定濃度の 82~90%及び 23~49%であった。48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は、実測濃度（時間加重平均値）に基づき 15.5 µg/L であった。

また、環境省¹⁾は、OECD テストガイドライン No.211 (1998) に準拠し、オオミジンコ *Daphnia magna* の繁殖試験を実施した。試験は半止水式（毎日換水）で行われ、設定試験濃度は 0 (対照区、助剤対照区)、0.00313、0.00625、0.0125、0.0250、0.0500 mg/L (公比 2.0) であった。試験溶液の調製には、試験用水として脱塩素水道水（硬度 61.0 mg/L、CaCO₃ 換算）が、助剤として硬化ひまし油 (HCO-40) 0.500 mg/L が使用された。被験物質の実測濃度（時間加重平均値）は 0 (対照区、助剤対照区)、1.40、2.74、4.99、10.6 µg/L (全親個体が死亡した最高濃度区は除く) であった²⁾⁻²。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 2.74 µg/L であった²⁾⁻²。

3) 魚類

環境省¹⁾は、OECD テストガイドライン No.203 (1992) に準拠し、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（24 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)、0.0593、0.0889、0.133、0.200、0.300 mg/L (公比 1.5) であった。試験溶液の調製には、試験用水として脱塩素水道水（硬度 47.1 mg/L、CaCO₃ 換算）が、助剤として硬化ひまし油 (HCO-40) が用いられた。被験物質の実測濃度（試験開始時と終了時の幾何平均値）は 0 (対照区、助剤対照区)、0.0472、0.0722、0.112、0.184、0.236 mg/L であっ

た。96時間半数致死濃度 (LC₅₀) は、実測濃度に基づき 79.3 µg/L であった。

(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 ₅₀ (生長阻害)	1.8 µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	48時間 EC ₅₀ (遊泳阻害)	15.5 µg/L
魚類	<i>Oryzias latipes</i>	96時間 LC ₅₀	79.3 µg/L

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 1.8 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 0.018 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)	0.99 µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	21日間 NOEC (繁殖阻害)	2.74 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]

2つの毒性値のうち小さい方の値 (藻類の 0.99 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 0.0099 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 0.0099 µg/L を採用する。

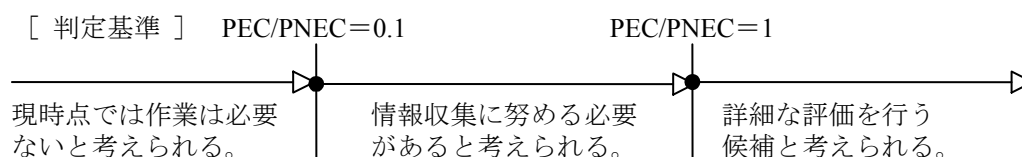
(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

水質	平均濃度	最大濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
公共用水域・淡水	0.0017 µg/L程度 (2013)	0.015 µg/L程度 (2013)	0.0099 µg/L	1.5
公共用水域・海水	概ね0.0008 µg/L未満 (2013)	概ね0.0008 µg/L未満 (2013)		<0.08

注：1) 水質中濃度の () 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は 0.0017 µg/L 程度、海水域では概ね 0.0008 µg/L 未満であった。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 0.015 µg/L 程度、海水域では概ね 0.0008 µg/L 未満であった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は淡水域では 1.5、海水域では 0.08 未満となるため、詳細な評価を行う候補であると考えられる。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 東京化成工業株式会社 (2013) : 安全性データシート N,N-Dimethyl-n-octadecylamine.
- 2) Haynes.W.M.ed. (2013) : CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, (Version 2013), CRC Press.
- 3) O'Neil, M.J. ed. (2013) : The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 15th Edition, The Royal Society of Chemistry.
- 4) European Chemical Agency : Information on Registered Substances, dimantine. (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>, 2015.7.8 現在)
- 5) U.S. Environmental Protection Agency, MPBPVPWIN™ v.1.43.
- 6) U.S. Environmental Protection Agency, KOWWIN™ v.1.68.
- 7) U.S. Environmental Protection Agency, WSKOWWIN™ v.1.42.
- 8) 通産省公報(1989.12.28).
- 9) N-アルキル[又はアルケニル(C16~28)]-N,N-ジアルキル(C1~5 又は H)アミン[N,N-ジメチル-n-オクタデシルアミン(被験物質番号 K-861)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).
- 10) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.92.
- 11) 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.
- 12) U.S. Environmental Protection Agency, BCFBAF™ v3.01.
- 13) U.S. Environmental Protection Agency, KOCWIN™ v.2.00.
- 14) 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.
- 15) 経済産業省(2012) : 一般化学物質等の製造・輸入数量(22年度実績)について, (http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/H22jisseki-matome-ver2.html, 2012.3.30 現在).
- 16) 経済産業省(2013) : 一般化学物質等の製造・輸入数量(23年度実績)について, (http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/H23jisseki-matome.html, 2013.3.25 現在).
- 17) 経済産業省(2014) : 一般化学物質等の製造・輸入数量(24年度実績)について, (http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/H24jisseki-matome.html, 2014.3.7 現在).
- 18) 経済産業省(2015) : 一般化学物質等の製造・輸入数量(25年度実績)について, (http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/H25jisseki-matome.html, 2015.3.27 現在).
- 19) 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, 2005.10.現在).

- 20) 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, 2007.4.6 現在).
- 21) 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,http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/kakuhou19.html, 2009.12.28 現在).
- 22) 化学工業日報社 (2015)：実務者のための化学物質等法規制便覧 2015年版.

(2) 曝露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPI Suite™ 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) 生態リスクの初期評価

- 1) 環境省(2001)；平成12年度 生態影響試験
- 2) 1. 国立環境研究所(2010)：平成21年度化学物質環境リスク初期評価等実施業務報告書
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) European Chemical Agency：Information on Registered Substances, dimantine.
(<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>, 2015.12.9 現在)
 1. Exp Key Toxicity to aquatic algae and cyanobacteria.001. (2012)
 2. Exp Supporting Short-term toxicity to aquatic invertebrates.001. (2010)
 3. Exp Key Short-term toxicity to fish.001. (1996)
- 4) U.S.EPA(2003)：High Production Volume Information System, FND Ether Amines Category HPV Chemicals Challenge - Appendix, *N,N*-dimethyl-1-Octadecanamine.
 1. Springborn Laboratories. 1987. Acute Toxicity of B0793.02 to Mysid Shrimp (*Mysidopsis bahia*). Unpublished Report No. BW-87-4-2359. Springborn Bionomics, Inc., MA, USA. Contained in: Initial Submission, Toxicological Investigation of *N,N*-dimethyloctyldecylamine. U.S. EPA Doc. No. FYI-OTS-0794-1164.