# 「58] ヘキサメチレンテトラミン

# 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: ヘキサメチレンテトラミン

(別の呼称:ヘキサミン、メテナミン、シスタミン、シストゲン、ヘキサメチレンアミ

ン)

CAS 番号: 100-97-0 分子式: C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>N<sub>4</sub> 分子量: 140.2

構造式:



# (2)物理化学的性状

本物質は白色の結晶性粉末か無色の光沢のある結晶である1)。

| 融点                          | 280 (昇華) <sup>2)</sup>               |
|-----------------------------|--------------------------------------|
| 比重                          | 1.331(-5 ) <sup>3)</sup>             |
| 蒸気圧                         | 0.004mmHg(25 ) <sup>4)</sup>         |
| 換算係数                        | 1ppm=5.83mg/m³(気体、20 ) <sup>5)</sup> |
| n-オクタノール/水分配係数<br>(log Pow) | -2.13(実測値) <sup>6)</sup>             |
| 加水分解性                       | 酸の存在下で加水分解する                         |
| 解離定数                        | 文献なし 5)                              |
| 水溶性                         | 448,600mg/L(12 ) <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。

# 分解性

好気的: 良分解 $^{9}$ 。TOC、LC による残存量の測定値から算出した分解度はそれぞれ $^{45}$ %、 $^{48}$ %である $^{9}$ 。

嫌気的:報告なし5)

### 非生物的:

(OH ラジカルとの反応性): 大気中での速度定数を  $5.1 \times 10^{-10}$  cm<sup>3</sup>/分子・sec(25)、OH ラジカル濃度を  $5 \times 10^{5}$  分子/cm<sup>3</sup> とした時の半減期は約 15 分である  $^{10}$ 。

# BOD から算出した分解度:

49%(NH<sub>3</sub>)、22%(NO<sub>2</sub>)(試験期間:2週間、被験物質:100mg/L、活性汚泥:30mg/L)<sup>9)</sup>

生物濃縮係数 (BCF): 3.162(計算値)<sup>11)</sup>

# (4) 製造輸入量及び用途

# 生産量・輸入量等

本物質の平成 5 年における製造量等は 46,584t であり、その内訳は製造量が 11,042t、輸入量が 35,542t である  $^{12}$ )。また、OECD に報告している生産量は 10,000t 以上である。

#### 用途

本物質の主な用途は、合成樹脂(熱硬化性)の促進剤、発泡剤、ゴム加硫促進剤、医薬品、火薬、石炭酸ナトリウムおよびカ性ソーダを混合してホスゲンの吸収剤となる<sup>1)</sup>。

## 2. 暴露評価

環境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特定の排出源の影響を受けていない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その大部分がカバーされる高濃度側のデータによって暴露量の評価を行った。原則として統計的検定の実施を含め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。なお、多数のデータが得られている場合は、95 パーセンタイル値を参考として併記している。

## (1) 環境中分布の予測

ヘキサメチレンテトラミンの環境中の分布について、各環境媒体間への移行量の比率を EUSES モデルを用いて算出した結果を表 2.1 に示す。なお、モデル計算においては、面積 2,400km<sup>2</sup>、人口約 800 万人のモデル地域を設定して予測を行った 1)。

| • | 1 // | 77777 |        |
|---|------|-------|--------|
|   |      |       | 分布量(%) |
|   | 大    | 気     | 0.01   |
|   | 水    | 質     | 53.9   |
|   | 土    | 壌     | 13.6   |
|   | 底    | 質     | 32.5   |

表 2.1 ヘキサメチレンテトラミンの各媒体間の分布予測結果

### (2) 各媒体中の存在量の概要

ヘキサメチレンテトラミンの水質及び底質中の濃度について情報の整理を行い以下のデータが得られたが、現時点で暴露評価に利用できる調査例は得られなかった。

媒体 幾何平均 算術平均 最小値 最大値 検出下限値 検出率 譝 測定 擜文 値 値 地域 年 公共用水域・淡水 500 0/1 長野 1983 2 < 500 < 500 μg/L 公共用水域・海水 < 5000 < 5000 80 ~ 5000 0/9全国 1983 2 μg/L 0/11983 2 300 底質(公共用水域・淡水)µg/g < 300 < 300 長野 0/9 1983 2 300~14000 全国 底質 (公共用水域・海水) μg/g <14000 <14000

表 2.2 ヘキサメチレンテトラミンの水質、底質中の存在状況

## (3) 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)

ヘキサメチレンテトラミンの水生生物に対する暴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。評価に耐えるデータは得られなかった。

| - Clo 特質 O T ファブラファブラ O MR及 |                   |       |                       |  |  |  |  |  |
|-----------------------------|-------------------|-------|-----------------------|--|--|--|--|--|
| 媒体                          | 平                 | 均     | 最 大 値 等               |  |  |  |  |  |
|                             | 濃                 | 度     | 濃度                    |  |  |  |  |  |
| 水質                          |                   |       |                       |  |  |  |  |  |
| 公共用水域・淡水                    | 評価に耐える:<br>られなかった | データは得 | 評価に耐えるデータは得られ<br>なかった |  |  |  |  |  |
| 公共用水域・海水                    | 評価に耐える:<br>られなかった | データは得 | 評価に耐えるデータは得られ<br>なかった |  |  |  |  |  |
|                             |                   |       |                       |  |  |  |  |  |

表 2.3 水質中のヘキサメチレンテトラミンの濃度

注):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

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(内分泌撹乱作用に関するものを除く)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 慢 毒性值 生物名 エンドポイント 暴露期間 信頼性 急 Ref. 性 性 /影響内容 [日] No.  $[\mu g/L]$ 藻類 甲殼類 92,500,000 Nitocra spinipes  $LC_{50}$ MOR 4 5185 **36,000,000** Daphnia magna  $EC_{50}$ **IMM** 2 15270 魚類 49,000,000 *Cyprinodon variegatus*  $LC_{50}$ MOR 4 15270 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) IMM (Immobilization): 遊泳阻害、MOR (Mortality): 死亡

# (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、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  $36,000,000\ \mu g/L$  であった。急性毒性値について 1 生物群 (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 1,000 を用いることとし、急性毒性値による PNEC として  $36,000\ \mu g/L$  が得られた。

慢性毒性値については、信頼できるデータは得られなかった。

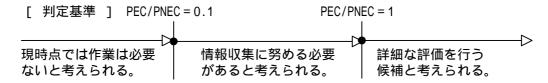
本物質の PNEC としては、甲殻類の急性毒性値をアセスメント係数 1,000 で除した 36,000  $\mu$ g/L を採用する。

# (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

| 媒体 |           | 平均濃度          | 最大値[95 パーセンタイル値]濃度 | PNEC   | PEC/   |
|----|-----------|---------------|--------------------|--------|--------|
|    |           |               | (PEC)              |        | PNEC 比 |
| 水質 | 公共用水域·淡水域 | 評価に耐えるデータは得られ | 評価に耐えるデータは得られ      | 36,000 | -      |
|    |           | なかった          | なかった               | _      |        |
|    | 公共用水域·海水域 | 評価に耐えるデータは得られ | 評価に耐えるデータは得られ      | μg/L   | -      |
|    |           | なかった          | なかった               |        |        |

注:公共用水域・淡水域は、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得られなかったため、生態リスクの判定はできない。本物質は、生産量が 10,000t 以上で、半数は水質中に分配されると予測されている。しかし、PNEC 値は 36,000µg/L とかなり大きな値であることから、環境中濃度の把握を優先的に行う必要性は低いと考えられる。

### 4.引用文献等

# (1)物質に関する基本的事項

- 1) 化学工業日報社(2002): 14102 の化学商品
- 2) Verschueren, K. Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals. 3rd ed. New York, NY: Van Nostrand Reinhold Co., 1996. 1101. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 3) Lide, D.R. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 76th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 1995-1996.,p. 3-317. [HSDB]

- 4) Stranski IN et al; Advances in Catalysis 9:406-14 (1957). [HSDB]
- 5) 財団法人化学物質評価研究機構(1997): 化学物質安全性(ハザード)評価シート
- 6) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd Ed., Van Nostrand Reinhold Co. (1983). [財団法人化学物質評価研究機構(1997): 化学物質安全性(ハザード)評価シート]
- 7) 化学辞典, 東京化学同人(1994). [財団法人化学物質評価研究機構(1997): 化学物質安全性(ハザード)評価シート]
- 8) Yalkowsky SH, Dannenfelser RM; The AQUASOL dATAbASE of Aqueous Solubility. Fifth ed, Tucson, AZ: Univ Az, College of Pharmacy (1992). [HSDB]
- 9) 通産省化学品安全課監修, 化学品検査協会編, 化審法の既存化学物質安全性点検データ集, 日本化学物質安全・情報センター(1992).
- 10) Meylan WM, Howard PH; Chemosphere 26: 2293-99 (1993). [HSDB]
- 11) BCFWIN v2.14
- 12) 平成 5 年度既存化学物質の製造・輸入量に関する実態調査,通商産業省. [財団法人化学物質評価研究機構(1997): 化学物質安全性(ハザード)評価シート]

## (2) 暴露評価

- 1:(財)日本環境衛生センター 平成 13 年度化学物質の暴露評価に関する調査報告書(環境 庁請負業務)
- 2:環境庁保健調査室:昭和59年版化学物質と環境
- (3) 生態リスクの初期評価
  - 1)データベース: U.S.EPA「AQUIRE」
  - 2) 引用文献 (Ref. No.: データベースでの引用文献番号)
  - 5185: Linden, E., B.E. Bengtsson, O. Svanberg, and G. Sundstrom (1979): The Acute Toxicity of 78 Chemicals and Pesticide Formulations Against Two Brackish Water Organisms, the Bleak (*Alburnus alburnus*) and the Harpacticoid. Chemosphere 8(11/12):843-851.
  - 15270: Walton, J.R., and E.M. Davis (1980): Toxicology and Fate of Selected Industrial Chemicals in Aquatic Ecosystems. University of Texas, School of Public Health, Inst. of Environ. Health, Houston, T X:91.