

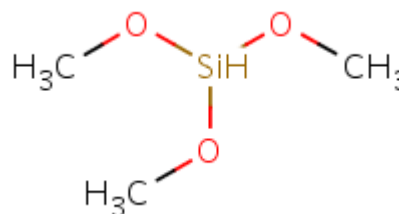
初期評価プロフィール (SIAP)

トリメトキシシラン

物質名 : Trimethoxysilane

化学式 : $C_3H_{10}O_3Si$

CAS No. : 2487-90-3



SIARの概要

削減試験の理由

トリメトキシシランは、水中では急速に加水分解する；半減期は<0.3分(pH7、2°C)である。加水分解産物はメタノールがこの試験で測定されており、またトリメトキシシランの化学構造に基づいて、加水分解は3モルのメタノールと1モルのシラントリオールを生じると予測される。pHと本物質の濃度に基づいてシラントリオールは、凝結されオリゴマーやポリマーを形成する可能性がある。物質は加水分解的に不安定であるために、水溶解度、分配係数および生物分解性は測定されなかった。しかし、これらの指標は、本物質の挙動に関して貴重な情報を提供する。モデル化された値は、トリメトキシシランやシラントリオール両者の水溶解度や分配係数を提供する。水溶液中では、トリメトキシシランへのばく露は一時的であり、観察された毒性は、主として加水分解産物のメタノール、シラントリオールと加水分解産物の架橋により形成可能なオリゴマーによるようである。加水分解産物メタノール(CAS No. 67-56-1)のデータは、SIAMで評価された。メタノールの生物分解性に関する情報は利用可能である；トリメトキシシランおよびシラントリオールの両者は、易生分解性とは予期されない。

生殖/発生毒性試験は、トリメトキシシランについては実施されていない。この物質についての追加試験は勧告されない、その理由は、世界的にトリメトキシシランが場所限定の中間体であり、密閉系(硬質パイプ)で製造、使用されているためである。その場所外への輸送はなく、トリメトキシシランの消費者向け用途はない。製造された全トリメトキシシランは、その場所で密閉系内において消費され、有機機能性シランの製造において、トリメトキシシランは一般的に0.001%、最高で0.2%までが含まれる可能性がある。環境への意図的放出はない。

ヒトの健康

ラットにおいて強制経口投与によるトリメトキシシランへのばく露は、LD₅₀=4.47mL/kg bw(約4291 mg/kg bw)の結果となった。毒性の症状は、二つの最高用量群で抑うつ、努力性呼吸、と運動失調を含んだ。更に追加的なラットの試験では、強制経口投与のLD₅₀は、雄について2.46mL/kg bw(2458 mg/kg bw)および雌について1.56mL/kg bw(約1498 mg/kg bw)であった。いく匹かの動物で観察された毒性の徴候は、抑うつ、流涙、不安定歩行、膨満した腹部、頭と体の収縮、逆毛、衰弱、瀕死の外観、鼻と目の回りの赤い硬表、下痢、毛並みの乱れ、削瘦が含まれた。三番目の強制経口投与試験では、ラット雄のLD₅₀値は、9.33mL/kg(約9857 mg/kg bw)であった。動物は、投与後すぐに反応が緩慢になり、最高投与レベルでは、その後4時間以

内に死亡した。トリメトキシシランのラットにおける吸入 $LC_{50}(4hr)$ は60 ppm(約300 mg/m³)である。二つの最高濃度群(166 ppm(約830 mg/m³)または71 ppm(約355 mg/m³))でのばく露当日における観察は、無意識の瞬きあるいはまぶたの痙攣、眼周囲の濡れ、口と腹部の呼吸、自発運動の減少、運動失調、緩慢な水平立ち直り、を含んでいた。39 ppm(約195 mg/m³)の群では、毛並みの乱れ、眼の回りの濡れ、異常呼吸、運動活性の減少が観察された。低濃度群で(19 ppm(約95 mg/m³))では、毒性の臨床的徴候は観察されなかった。吸入による追加の4時間試験は、 LC_{50} が $31.25 < LC_{50} < 62.5$ ppm (約 $156 < LC_{50} < 312$ mg/m³)および、 $LC_{50} = 53$ ppm(約265 mg/m³;鼻のみばく露)であった。ウサギにおいて、一つの試験で経皮 LD_{50} が雄で7.46mL/kg bw(約7160 mg/kg bw)、雌で6.73mL/kg bw(約6460 mg/kg bw)の結果であった。一匹以上の動物で局所的皮膚影響は、環状赤紅斑、壊死、剥離、かさぶた、脱毛症が含まれた。抑うつ、流涎、虚脱、削瘦、および鼻の周りの透明または赤い分泌物が、観察された毒性の徴候であった。肺の組織病理は膿瘍、うっ血、出血、浮腫、肺胞組織球増加症、単核細胞、黒色の沈着物を含んでいた。もう一つの試験では、トリメトキシシランを雄ウサギの皮膚に被覆処理で24時間塗布し、14日間観察した。この試験による経皮の LD_{50} は6.30mL/kg bw(約6050 mg/kg bw)であった。皮膚に明確な環状紅斑が観察され、全体的な解剖所見は、うっ血した両肺、斑文状の肝臓、斑文状の腎臓を伴った。

トリメトキシシランは、皮膚に対して腐食性であり、中程度から重篤までの眼の刺激性物質であることが示された。気道刺激の徴候は、作業者と、反復ばく露の後に実験動物で観察された。トリメトキシシランは、皮膚感作性物質ではない。

いくつかの反復吸入ばく露試験が、様々のばく露期間について、ラットと他の哺乳動物でトリメトキシシランについて実施されてきた。ラットの群は、10、25、50 ppm(約50、125、250 mg/m³)のトリメトキシシランを設定濃度として、7時間/日、5日間吸入でばく露された； LC_{50} 値は13 ppm(約65 mg/m³)であった。全体的な臨床観察は、呼吸器系が毒性の標的器官であることを示した。ラットのトリメトキシシランへの反復(9日)ばく露は、5 ppm(25 mg/m³)で致死性であり、死因が気道傷害のためと思われる死亡例を伴った；NOECは0.2 ppm(約1 mg/m³)およびLOAECは1 ppm(約5 mg/m³)であった。全身毒性の徴候は観察されず、組織病理学的変化は気道(接触部位)でのみ見られた。ラットによるトリメトキシシラン5 ppm(約25 mg/m³)および10 ppm(約50 mg/m³)の吸入反復ばく露(28日間)は致死性であり、死亡例は恐らく気道損傷の結果であろう。体重、臓器重量、臨床病理学、病理学的観察、死亡に基づいて、この試験からのNOAECは0.5 ppm(約2.4 mg/m³)であろう。これらの反復ばく露試験の各々では、呼吸器官そして/または死の重篤な影響を生じる最高ばく露濃度においてさえ、他の器官や組織は病理学的損傷がなかった。ラットのトリメトキシシラン蒸気への90日間のばく露(0.02、0.1、0.5 ppm；約0.1、0.5、2.5 mg/m³)は、4週間の回復期間後には、この研究の間にモニターされた生物学的パラメーターにおいてばく露と関連する影響を生じなかった。この90日ラット吸入試験でのNOECは、少なくとも0.5 ppm(約2.5 mg/m³)と決定された。マウスとハムスターの群は、10、25、50 ppm(約50、125、250 mg/m³)のトリメトキシシランの設定濃度で7時間/日、5日間吸入によりばく露された； LC_{50} 値は、14 ppm(約70 mg/m³；マウス)と72 ppm(約360 mg/m³；ハムスター)であった。全体的な臨床観察は、呼吸器系が毒性の標的器官であることを示唆した。

トリメトキシシランは、*in vitro* による細菌の復帰突然変異試験で陰性であった。トリメトキシシランは、非活性化系下で構造的染色体異常、数的染色体異常に誘発に対して*in vitro* で陰性であったが、S-9活性化系の存在下では陽性であった。トリメトキシシランは、*in vivo* で小核誘発物質とは考えられなかった。有効な

情報は、この物質は遺伝毒性でありそうもないことを示唆する。

トリメトキシシラン0.5 ppm(約2.5 mg/m³)までへの90日間のばく露、または5 ppm(約25 mg/m³)への9日間のばく露は、ラットの生殖臓器毒性のいかなる徴候も生じなかった。トリメトキシシランの発生毒性試験は実施されていない。上記に記されたように「削減試験理由」の下で、トリメトキシシランは局所限定的な毒性介在物質であるので追加試験は必要ない。

環境

トリメトキシシランは、環境に関連するpHと温度条件の範囲において加水分解的に不安定である。pH7と2°Cで半減期は<0.3分である。加水分解は、3モルのメタノールと1モルのシラントリオールを生じると予期される。シラントリオール(500 ppm超の濃度で)は縮合し、高度に架橋した高分子量のポリマーを形成するので、さらにばく露の可能性を減少する。もしトリメトキシシランが徐々に放出され、生じるシラントリオールの濃度が重合するほどには充分に高くない場合は、シラントリオールは大部分がモノマーとして存在するだろう。トリメトキシシランの融点は-113.6°C、沸点は84.4°C(1013hPa)である。蒸気圧は75.11hPa(20°C)である。トリメトキシシランの推定水溶解度は、1,000,000 mg/Lである；推定のlogK_{ow}は-1.22。本化学物質は加水分解的に不安定であるので、水溶解度とlogK_{ow}値は用いることができないだろう。シラントリオールの推定水溶解度は、同様に1,000,000 mg/Lである；推定logK_{ow}は-2.91。

全体的なトリメトキシシランのOHラジカル反応速度定数に関しては、間接的な光分解によるOH反応速度定数は 2.5×10^{-12} cm³/分子・秒であり、 5.0×10^5 分子/cm³のOHラジカル濃度を用いて、半減期は6.4日と推定される。消失の形態としての光分解は、トリメトキシシランが加水分解的に不安定であるので有りそうも無い。水蒸気との反応は、空気中のトリメトキシシランの主な分解過程であると推定される。大気中のトリメトキシシラン加水分解から生じる産物は、さらにヒドロキシラジカルと反応すると予期される。加水分解産物シラントリオールについて、間接的な光分解に基づく大気中酸化による半減期は1.6日と決定された；全体的なOHラジカル反応速度定数は 10.35×10^{-12} cm³/分子・秒である。

大気、土壌と水の各々に対して1000 kg/hの負荷速度を用いたフガシティーモデル・レベルIIIは、全3区分に同時に放出される時、次のトリメトキシシランの分布%を示す：大気=47.6%；土壌=47.6%；水=4.8%；底質=0%。しかし加水分解的に不安定ある故に、トリメトキシシランは環境中には見出されそうもない。従って、加水分解産物シラントリオールのレベルIIIのフガシティーモデルが、大気、土壌と水の各々に1000 kg/hの負荷速度を用いたと想定して行われた。モデルはシラントリオールが、全三つの区分に同時に放出される時、次の分布%を推定した；大気=1.07%、土壌=56.7%、水=42.24%、底質=0.08%。モデルは、トリメトキシシランが易生分解性で無いことを示唆する。予測される生分解は加水分解物である易生分解性のメタノールを反映することが予期される。シラントリオールと縮合シラントリオールは無機化合物であり、標準的な生分解性試験は適用できない。シラントリオールの生物蓄積はまた、その低いLogK_{ow}値を考えるならば、起こりそうも無い。

トリメトキシシランの急速な加水分解のために、観察される水生毒性は主に加水分解産物に起因するようである。淡水魚類(*Oncorhynchus mykiss*)におけるトリメトキシシランのLC₅₀(96hr)およびLC₀は ≥ 100 mg/Lである。オオミジンコ(*daphnia magna*)に対するトリメトキシシランのEC₅₀(48hr)は>100 mg/L(止水

式)である。トリメトキシシランを用いた藻類試験では、 $E_bC_{50}(72hr)$ 値は >100 mg/L、および $NOEbC$ は <6.3 mg/Lであった。 $E_rC_{50}(72hr)$ 値 >100 mg/Lおよび $NOErC$ <6.3 mg/Lであった。

ばく露

担当国における2001年の製造量は1702トンであった。トリメトキシシランは、担当国では輸入していない；世界的に、この物質は限られた場所で使用される中間体であり、輸出されない。製造の際は、この物質は密閉系で取扱われている(硬管)。トリメトキシシランは、他の化学物質(有機機能性シラン類)の製造で鍵をにぎる中間体としてとして用いられている。最終工業製品は、一般に0.001%未満の含有率であるが、0.2%までのトリメトキシシランを含む可能性もある。本物質は使用の間に反応し、化学的同一性を失う。

環境への意図的放出はない。この物質の反応性は、水中の親物質を破壊するので、トリメトキシシランの環境ばく露は制限される。既知および予期される反応により、メタノール、シラントリオール、または高架橋、高分子量のポリマーへのばく露が生じる可能性がある。

担当国における五箇所のプラントで、トリメトキシシランは使用/製造されている。トリメトキシシランの反応特性は、湿気を排除した密閉系での取り扱いを必要とする。トリメトキシシランは密閉された反応器で製造され、直接ストリッパーに供給されている。ストリッパーは、軽留分(溶媒)を分離し、それを反応器にリサイクルする；粗トリメトキシシランは、冷却され、硬管により、貯蔵タンクに転送される。粗トリメトキシシランは硬管を経由してストリッパーに移送され、それから縮合後にタンクへ移される。重留分は、ストリッパーの底から除去され、重留分貯蔵タンクへ直接パイプ移送される。このタンクは、燃焼機に硬管でつながれている。トリメトキシシランは意図的に反応するタンクへ硬管により移される。製造の間、トリメトキシシランへの意図的ばく露はない。トリメトキシシランは、産業顧客マーケットで売却されないので、製造の元の場所から輸送されない。

トリメトキシシランを用いる消費者用途はない；本物質は他の化学物質(有機機能性シラン)の製造で重要な中間体として用いられる。トリメトキシシランは消費者市場で売却されない。

勧告と勧告の理由、推奨される追加作業の性質

ヒトの健康

この化学物質は、追加作業の優先順位は低い。この化学物質は、ヒト健康に対して有害性を示す性質を持つ(皮膚に対する腐食性、緩和から重篤な眼刺激性、呼吸器官刺激性そして/または反復投与毒性試験における呼吸不全による死亡)。メタノールと対応するシラントリオールへの急速な加水分解のため、および担当国により提出されたばく露データ(密閉系の場所にあるばく露が制限された中間体であり、世界的に輸送されない)に基づいて一国における用途パターンに関連して、この化学物質は追加研究の現在の優先順位は低い。それにもかかわらず、これらの性質は化学的安全性の専門家や消費者により注意されるべきである。諸国は、担当国により提出されていない他のばく露シナリオを研究することを望むかも知れない。

環境

本化学物質は、現在のところ、低い有害性プロファイルに基づき、追加の作業についての優先性は低い。

[著作権および免責事項について]

[著作権]

本資料の著作権は弊センターに帰属します。引用、転載、要約、複写（電子媒体への複写を含む）は著作権の侵害となりますので御注意下さい。

[免責事項]

本資料に掲載されている情報については、万全を期しておりますが、利用者が本情報を用いて行う一切の行為について、弊センターは何ら責任を負うものではありません。また、いかなる場合でも弊センターは、利用者が本情報を利用して被った被害、損失について、何ら責任を負いません。