

初期評価プロファイル (SIAP)

けい酸エチル類

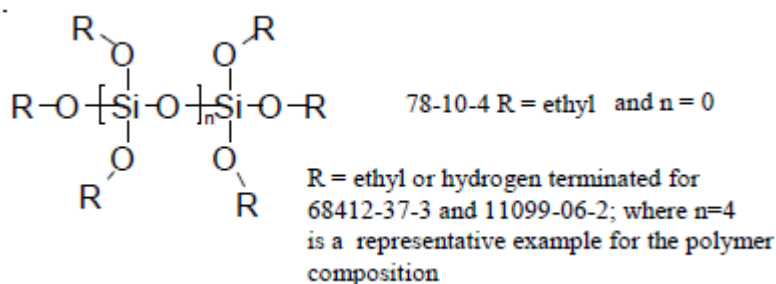
物質名とCAS No. :

o-けい酸テトラエチル、Tetraethyl orthosilicate (TEOS), CAS No. : 78-10-4

けい酸エチル、Silicic acid, ethyl ester (PEOS) CAS No. : 11099-06-2

けい酸テトラエチルの加水分解物、Silicic acid (H₄SiO₄), tetraethyl ester, hydrolyzed (PEOS)

CAS No. : 68412-37-3



SIARの結論の要旨

カテゴリーの理論的根拠

o-けい酸テトラエチル (TEOS) および、けい酸エチル (PEOS) (けい酸、テトラエチルの加水分解物と同じ) は水との接触で加水分解し、それぞれメタけい酸 (CAS No.10193-36-9) または、けい酸 (CAS No.7699-41-4) とエタノール (CAS No.64-17-5) を生成することが予期される。TEOS (CAS No.78-10-4) も同様に加水分解し、PEOSを生成することがある。エタノールはOECD HPVプログラムで以前に評価された。メタけい酸とけい酸は反応し、様々の長さの鎖と様々の環化および枝分かれ度のオリゴマー、ホモポリマーを形成すると予期される。これらのオリゴマーおよびホモポリマーはこの評価ではPEOSにより代表され、互換性のある2つのCAS 番号 (CAS No.11099-06-2およびCAS No.68412-37-3) であらわされる。化学構造、物理化学的特性 (加水分解) および毒性学的特性の類似性に基づき、およびモノマーのデータはその重合体の毒性よりも高い毒性を示す可能性が高い、とする法則に基づき、TEOSとPEOSをグループとすること、およびTEOSのデータをPEOSのヒト健康指標を補足するために用いることは適切である。

物理的—化学的特性

TEOSおよびPEOSは液体である。TEOSおよびPEOSはそれぞれ、融点が-82.2°C (測定値) と-62.37°C (推定値)、沸点が1013hPaで166.5°C (測定値) と124.66°C (推定値)、および蒸気圧が20°Cで2.51hPa (測定値) と7.25hPa (推定値) である。Si-O-Et結合の化学的反応性に従って、水溶性の定量的推定は、加水分解物の定性的分析と環境試験データの注意深い観察で代用される。TEOSの次にPEOSが、最も溶解性の低いことから、TEOSもPEOSも溶解性は低いと予想される。

ヒトの健康

TEOSまたはPEOSの何れも、トキシコキネティクス、代謝、または分布に関するデータは入手できない。しかし、経口および吸入による反復投与試験で観察された変性/壊死性腎障害は、TEOSが全身的に吸収されることを示唆している。OECD TG 403試験で、鼻のみエアロゾル雰囲気にはばく露した場合、Wiskf(SPF71)ラットでTEOSのLC₅₀(4-hr)は、10.0 mg/L (雄)、16.8 mg/L (雌)であった。毒性の臨床徴候は、死亡、運動行動と運動呼吸、眼瞼の縁をおおうカサブタ状の血による完全閉瞼にまでおよぶ眼瞼の狭窄、震えと剛直性の痙攣を含んでいた。チアノーゼおよび反射運動の減少が個々の動物に生じた。剖検所見には、肺の赤およびオレンジ色の着色が含まれる。OECD TG 401に従った試験で、ラット(WISW(SPF Cpb)およびSprague-Dawley)の雌雄に対して、TEOSとPEOSの経口LD₅₀は2000 mg/kg bwを超えている。毒性の臨床的徴候は目立たなかった。TEOSはウサギの皮膚に中程度の刺激性があった(OECD TG 404)。PEOSはウサギの皮膚に刺激性がなかった(FIFRA/TSCA試験ガイドライン)。TEOSは動物試験の標準的な刺激性試験(OECD TG 405)で眼刺激性はなかったが、*in vitro*試験において中程度/重度の眼刺激性があり、Wiskf(SPF71)ラットの4時間の吸入毒性試験中に眼刺激性を引き起こした。PEOSはウサギについて僅かな眼刺激性があった(FIFRA/TSCA TG)。気道刺激性に関するデータはTEOSおよびPEOSについて入手出来なかった。しかし、TEOSを用いた急性吸入毒性試験で、気道刺激性を示す徴候が観察された。Buelher 試験またはOECD TG 406に従うと、TEOSおよびPEOSはモルモットに対して皮膚感作性ではなかった。

TEOSの反復投与毒性は、経口で7日間にわたる用量設定試験および組合せ反復投与/生殖/発生毒性スクリーニング試験によって調査された。

Sprague-Dawley ラット (3/性/用量) に、TEOSを0、200、600、1000 mg/kg bw/日の用量で7日間に渡って毎日経口ばく露した結果、試験の最高用量で雄に死亡例(2/3)があった。臨床所見としては顕著な体重の減少または体重の増加抑制が両性にあった。剖検で、両性に腎臓の肥大と異常な着色が用量に相関して記録され、腎臓の高重量と相関していた。雄では、前立腺と精嚢がサイズにおいて減少した。用量レベル600および1000 mg/kg bw/日は雄の耐量を超えていると考えられた。0、10、50、100 mg/kg bw/日のTEOSへの雄は交配前から、交配期間、屠殺まで、また雌は交配前から、交配期間、妊娠期間、授乳期、出産4日目まで(少なくとも4週間)のSprague-Dawley ラット (10/性/用量) による反復経口ばく露[OECD TG 422]は、100 mg/kg bw/日で授乳期に一過性の体重増加抑制が生じた。何れの用量でも、雄の体重の変化は報告されていない。雄において、100、50 mg/kg bw/日で処置に関連した変性/壊死性の腎障害(100 mg/kg bw/日で9/10、50 mg/kg bw/日で4/10に僅かな変性/壊死性の腎障害)が、更に雌の100 mg/kg bw/日で軽度の変性/壊死性の腎障害が3/10に認められた；しかし雌の50または10 mg/kg bw/日で所見はなかった。これは、ナトリウム、カリウムおよびグルコースの血漿中濃度が若干低いことに関連していた。尿細管腎障害の観察と関連する臨床化学的变化に基づき、NOAELは雄10 mg/kg bw/日および雌50 mg/kg bw/日であった。LOAELは雄50および雌100 mg/kg bw/日であった。ICR雄マウス10匹の群をTEOSの50、100 ppmに6 hr/d、5 d/week、2または4週間ばく露した。鼻粘膜の微視的变化が全ばく露マウスに観察された。尿細管間質性腎炎が100 ppm、2または4週間ばく露のマウスに観察されたが、50 ppmには観察されなかった。ICR雄マウス10匹の群をTEOS 200 ppmに6 時間/日、5 日/週、2または4週間ばく露した。2または4週間後にばく露マウスに体重の減少が観察された；2週間ばく露の群は2週間の観察期間中に回復した、が4週間ばく露群は回復しなかった。尿細管間質性腎炎が2または4週間ばく露したマウスで観察された、しかし臨床化学は腎臓の機能障害を確認しなかった。鼻粘膜の中への多形核好中球の浸潤も2週間か4週のばく露に続き直ちに観察された。全身性の腎臓

影響についてNOAECは50 ppmであった。局所呼吸影響のLOAECは50 ppmであった。

*Sulmonella typhimurium*の複数の系統を用いた細菌による復帰突然変異試験で、TEOSおよびPEOSは代謝活性化系の有無何れでも陰性であった(Directive 84/449/EEC, B.14 and Directive 92/69/EEC, B. 14)。TEOSを用いた *in vitro* 染色体異常試験の結果は代謝活性化系の有無何れでも陰性であった (OECD TG 473)。これらの結果に基づき、TEOSおよびPEOSは*in vitro* で非遺伝子毒性であると考えられる。

TEOSまたはPEOSの発がん性に関するデータは入手できなかった。

先に言及したTEOSのスクリーニング試験 (OECD TG 422) において、*Sprague-Dawley*ラットの生殖または発生に関して最高試験用量まで、何ら有害な影響は認められなかった。TEOSの生殖/発生毒性のNOAELはラットで100 mg/kg bw/日であった。母獣毒性のNOAELは50 mg/kg bw/日であった。これらの結果に基づき、TEOSは生殖または発生毒性物質ではない可能性が高いと考えられる。

このカテゴリーの化学物質は、ヒトの健康に対して有害性を示す特性を有する[皮膚、眼と気道刺激性 (TEOS)、および眼刺激性 (PEOS)、更に反復投与毒性 (腎臓と気道)]。OECD HPVプログラムの目的のためにヒトの健康有害性を特定する適切なスクリーニングレベルデータが入手可能である。

環境

米国EPA(U.S.Environmental Protection Agency)とSRC(Syracuse Research Corporation)により開発されたEPISuiteプログラムは、その分子構造内にケイ素を含む化学物質についてはまだ検証されていない；よって推定値に関しては不確かさがあり、以下のような報告にはいつも注意を以て用いなければならない。

全ての化学物質は加水分解の対象である。TEOSの加水分解による半減期は4.4 hr (pH7) である。PEOSについては、加水分解は個々の成分の溶解度に依存する。他の加水分解生成物はメタけい酸、けい酸、およびエタノールであると予期される。大気中でヒドロキシラジカルとの反応による間接的光酸化は、TEOSは0.4日、PEOSは1.1日の半減期を伴って生じると予期される。TEOSのDOC-die away試験は28日間で98%が生分解する結果であった。TEOSは好氣的条件下で易生分解性である。PEOSの modified sturm test は28日間で47%が生分解する結果であった。PEOSは好氣的条件下で易生分解性でない。

大気、水系、土壌への等量の継続的分配によるレベルIIIフガシティーモデル予測 (Epiwin v 3.20) は、TEOSは主に土壌に (74.1、51%)、少量が大気 (17.6%) および水系 (8.3%) に、底質へは無視できる量 (0.0%) が分布することを示唆した；PEOSはもっと均等に水系と土壌へ (それぞれ46.4、51%)、少量が大気 (2.5%) と底質 (<1%) に分布するだろう。これらの物質の化学的反応性に基づき、生物蓄積性は低いと考えられる。加水分解を通して、TEOSとPEOSは反応して異なる物質を生成するので、エチルエステルのBCFは推定できないが、加水分解生成物が主要な場合には低いと予期される。

TEOSと *Brachydanio rerio*を用いた96時間試験で245 mg/L (測定値) の LC₀ (96 hr) が確定した。PEOSと *Brachydanio rerio*を用いた96時間試験で119 mg/L (測定値) のLC₀が確定した。流水条件下でのTEOSのEC₅₀ (48 hr) はミジンコ(*Daphnia magna*) に対して>75 mg/L (測定値) であった。PEOSのEC₅₀ (48 hr)

はミジンコ(*Daphnia magna*) に対して > 193 mg/Lであった。これらの試験では、影響は観察されなかった。TEOSと*Pseudokirchneriella subcapitata* に対して72時間のErC₅₀とEbC₅₀は > 100 mg/L (急速な加水分解のために、設定濃度で表示) であった。生長速度あるいはバイオマスのNOEC(72 hr)は100 mg/Lと決定された。*Scenedesmus subspicatus* はTEOSおよびPEOSに72時間ばく露された；細胞生長に基づきEbC₅₀ (72 hr) は、それぞれ889.2および >207 mg/Lであり、生長速度に基づきEbC₅₀(0-72hr) *は、それぞれ > 1039.3 および > 207 mg/Lであった。NOECはTEOSについて115.5mg/L、PEOSについては115 mg/Lであった。

JETOC註：*ErC₅₀ (0-72hr) の間違いと思われる。

このカテゴリーの化学物質は、環境に対して低い有害性を有する。OECDのHPVプログラムの目的とする環境有害性について特性付けるために、適切なスクリーニングレベルのデータが入手可能である。

ばく露

TEOSとPEOSの地域別2005年製造量 (トン単位) :

地域	TEOS	PEOS
北アメリカ	約 380.4	< 0.45 (製造) < 453.6 (輸入)
ヨーロッパ	約 2948.4	約 7810.9
日本	約 399.2	約 562.5

けい酸エチル類の従来の用途分野：

- ・強力な腐食防止における亜鉛リッチ塗料用のバインダー
- ・精密鑄造と耐熱材用バインダー
- ・シリコンチップ上のSiO₂層形成
- ・化学工業における有機ポリマーの修飾
- ・石材強化用バインダー
- ・船舶塗装および保護塗装
- ・繊維被覆のためのクリアカップリング剤

けい酸エチル類は、最近の材料の製造用のゾルーゲル法での使用が増えている：加水分解と凝縮過程によって、液体(「ゾル」)を固体(「ゲル」)に変換する。アルコキシシラン類か有機機能性シラン類の使用によって、ミクロン以下の、または球状のシリカパウダー類、薄膜コーティング類、ファイバー類、多孔性(エーロゲル)または高密度材料を製造することが可能である。これらの材料は多くの分野で使用される、例えば、クロマトグラフィー、ガラスおよび顔料の表面コーティング、セラミックス産業、触媒の製造、およびポリマー修飾のために使用される。

塗料では、取引顧客は一般に調剤にそれを加える前にPEOSの加水分解を作る；プロセスのこの時点で、親物質は既に変化している。塗料の中のPEOS加水分解物の使用レベルは10—20 %の範囲である。TEOSは半導体製造において原料としても使用される。TEOSとPEOSはドラムと缶に入れて陸路および海路によって輸送される。

製造の際に意図的に環境中に放出されることはなく、両化合物の加水分解のため、親物質へのばく露は限定的であろう。TEOSは開放系と密閉系の両方で製造されており、常に工学的管理が行われる。TEOSとPEOSは施設内のドラム缶か缶に入れて貯蔵される。担当国のOSHA(Occupational Safety and Health Administration)はばく露許容濃度(PEL)、8時間荷重平均濃度(TWA) 100 ppm (850 mg/m³)を設定している。更に、OSHAは、けい酸エチル類へのばく露を最小限にするためのガイダンスを発行しており、そこでは適切な工学的管理について検討している。吸入と経皮による職業ばく露は可能性があるが、これらの工学的管理の実行とPELの厳守によって管理されるであろう。

TEOSは <6 % のレベルで、間接的な食物接触を伴う消費者用シーラントおよび一部の金型製品で使用される。PEOSは <0.1 % のレベルで、消費者用シーラントおよび接着剤で使用される。使用時に(製品が空気/湿気に触れるとすぐに)、PEOSはエタノールを放出し、シーラントが硬化しながら架橋するように製品が開発されているので、消費者シーラントおよび接着剤は、設計上未反応のPEOSを含む。

したがって、当該物質は使用の間に反応し、シーラント剤または接着剤の中に最終的に存在するとは予想されない。

[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。