

初期評価プロファイル (SIAP)

有機粘土カテゴリー

	Organoclays Category
CAS No.と 構造式	<p><b>71011-26-2:</b> Quaternary ammonium compounds, benzyl(hydrogenated tallow alkyl)dimethyl, chlorides, compounds with hectorite, (Benzyl monoalkyl chain quaternary ammonium compound <i>[B(Alk)2M] hectorite</i>). Same as CAS numbers 94891-33-5 and 12691-60-0.</p> <p><b>68953-58-2:</b> Quaternary ammonium compounds, bis(hydrogenated tallow alkyl)dimethyl, salts with bentonite, (Dialkyl chain quaternary ammonium compound <i>[2M(2Alk)] bentonite</i>). Same as CAS numbers 1340-69-8 and 73138-28-0.</p> <p><b>71011-27-3:</b> Quaternary ammonium compounds, bis(hydrogenated tallow alkyl)dimethyl, chlorides, compounds with hectorite, (Dialkyl chain quaternary ammonium compound <i>[2M(2Alk)] hectorite</i>). Same as CAS numbers 94891-31-3, 97280-96-1 and 12001-31-9.</p> <p><b>68153-30-0:</b> Quaternary ammonium compounds, benzylbis(hydrogenated tallow alkyl)methyl, chlorides, compounds with bentonite, (Benzyl dialkyl chain quaternary ammonium compound <i>[B(2Alk)M] bentonite</i>). Same as CAS numbers 121888-66-2 and 89749-77-9.</p> <p><b>97952-68-6:</b> Quaternary ammonium compounds, benzylbis(hydrogenated tallow alkyl)methyl, salts with montmorillonite, (Benzyl dialkyl chain quaternary ammonium compound <i>[B(2Alk)M] montmorillonite</i>).</p> <p><b>71011-24-0, 71011-25-1, 121888-68-4 and 89749-78-0:</b> Quaternary ammonium compounds, benzyl(hydrogenated tallow alkyl)dimethyl, chlorides, compounds with bentonite; (Benzyl monoalkyl chain quaternary ammonium compound <i>[B(Alk)2M] bentonite</i>).</p> <p><b>91080-57-8 and 91080-56-7:</b> Quaternary ammonium compounds, benzyl (hydrogenated tallow alkyl) dimethyl, chlorides, compounds with smectite (Benzyl monoalkyl chain quaternary ammonium compound <i>[B(Alk)2M] smectite</i>). Note that 91080-56-7 is [di-C10-C22 alkyl, dimethyl].</p> <p><b>68911-87-5:</b> Bis(hydrogenated tallow alkyl)dimethylammonium with montmorillonite (Dialkyl chain quaternary ammonium compound <i>[2M(2Alk)] montmorillonite</i>).</p> <p><b>91081-06-0:</b> Bis(hydrogenated tallow alkyl)dimethylammonium with smectite (Dialkyl chain quaternary ammonium compound <i>[2M(2Alk)] smectite</i>). Note this substance is [di-C10-C22 alkyl, dimethyl].</p> <p><b>121888-67-3:</b> Quaternary ammonium compounds, benzylbis(hydrogenated tallow alkyl)methyl, salts with hectorite (Benzyl dialkyl chain quaternary ammonium compound <i>[B(2Alk)M] hectorite</i>)</p>
分子構造	<p>種々の分子構造 四級アンモニウム化合物(カチオン類)は以下の一般式で表される。  <math display="block">N^+ R_1 R_2 R_3 R_4</math> R1, R2, R3, R4 は四級化合物(塩)のN(窒素元素)上の置換基であり、以下のように示される：  メチル – 1 個または 2個 置換  ベンジル – 0個 または 1 個置換  アルキル(C14-22) – 1個、 2個 、3個 置換</p> <p>粘土類 (アニオン) は次の構成物からなる  珪素、水素、酸素(ヘクトライト、モントモリロナイト)；ナトリウム、リチウム、マグネシウム(ヘクトライト)；ナトリウム、リチウム、マグネシウム、(ヘクトライト)；ナトリウム、カルシウム、カリウム、アルミニウム、マグネシウム(モントモリロナイト、ベントナイト)；アルミニウム(スメクタイト)。</p>

## SIARの概要

## カテゴリーの理論的根拠

有機粘土カテゴリー内で化合物類をグループ化することを支持する主な要素は構造的類似性である。4つの粘土(ベントナイト、スメクタイト、モンモリロナイト、ヘクトライト)はこのカテゴリー内でCAS No.で代表されている。これらの粘土は密接に関連しており、ある場合には構造的類似粘土材料と呼ばれるように相互変換的に用いられてきた。ベントナイトは天然に存在する材料であり、主に粘土鉱物モンモリロナイトから成る、次にモンモリロナイトはスメクタイトと呼ばれる層状ケイ酸塩の仲間である。ヘクトライトは、また、スメクタイトグループ(ステベンサイトとサポナイトと共に)に含まれる。これらの粘土鉱物の一つが優勢な堆積物は、その粘土鉱物名によって呼ばれる。よって、このカテゴリーの粘土鉱物における類似性を考慮して、グループ間の定義の違いは粘土と反応する有機カチオンである。

全スメクタイト粘土鉱物類(このカテゴリーには、ヘクトライトとモンモリロナイトを含む)は類似の構造的性質を持つ。それらは平面的無機ポリマーであり、層構造をなしている。個々の固体結晶は、1単位セル(または、約1ナノメートル)から1000ナノメートルまでの厚みであり、0.8–1.5meq/gの陰性の荷電を通常帯びている。この荷電はそれぞれの粘土表面に広くカチオンを引き付ける。天然に存在するスメクタイトに共通のナトリウムとカルシウムのカチオンは、層表面に強い親水性を与え、カルシウムカチオンは、ナトリウムカチオンよりより強くに粘土に結合する。カチオンは、4級のアンモニウムカチオンと容易に置換され有機粘土物質を生じる。ナトリウムとカルシウムのカチオンに比較して、4級のアンモニウムイオンは粘土に強くに結合し本質的に非常に疎水性のある有機粘土化合物(塩)を生じる。

CAS No.は、多くの明確な化合物を示唆するように決められてきた。このカテゴリーの見かけの複雑さは、(1)4要素からなる化合物(塩)が、3つの異なる粘土タイプと複合体を形成していること、(2)同じアルキル(C14-22)部分が、異なる原料(タロー油、または、食用油)に由来していることから生じている。

## ヒトの健康

B(Alk)2Mベントナイトのトキシコキネティックデータに基づいて、有機粘土化合物は、経口ばく露(強制)後に吸収されると予期されず、糞便中に直接、急速に排出され、尿と胆汁には無視出来る程度に排出されるだろう。これらの物質の組織中保持や全身の取り込みに関する証拠はなかった。消費者製品と工業製品に関して報告された粒子径分布に基づいて、これらの物質は吸入性ではないと考えられる。これらの物質は、物理化学的性質並びにこれらの報告された粒子サイズに基づいて経皮吸収されることも予期されない。

多くの急性毒性試験は、B(2Alk)Mモンモリロナイトを除いた全有機粘土カテゴリーメンバーで実施されてきた。試験は、吸入LC<sub>50s</sub>(4hr)が>5.0 mg/L、経口(強制投与)LD<sub>50s</sub>が>5,000 mg/kg bwであり、より低次の毒性を示している。B(Alk)2MヘクトライトのLC<sub>50</sub>(1hr)は>200 mg/Lである。幾つかの試験において、急性吸入に伴う共通の臨床徴候は、一過性の体重減少と不規則性呼吸を含んでいた。経口試験で観察された臨床徴候は、下痢、急速呼吸、立毛、腹部膨満、運動失調、昏睡を含んでいた。急性経皮毒性試験は有機粘土では行われなかった。有機粘土は皮膚刺激性がなかった。眼刺激性は通常ヒトにおいては最小(化合物の物理的性質による刺激と記録されている)であるが、動物では中程度の刺激性が観察されたことが報告されている。2M(2Alk)ベントナイトとB(Alk)2Mベントナイト、B(2Alk)Mヘクトライトを用いて実施された皮膚感作性

試験は、これらの有機粘土材料は感作性物質ではないことを示す。

経口経由(強制投与または混餌)とOECD TG407に類似の方法による反復投与毒性試験は、2M(2Alk)ベントナイトとB(Alk)2MベントナイトとB(2Alk)Mヘクトライトを用いて実施された。2M(2Alk)ベントナイトに対するNOAELは、12週の混餌試験で25%(約12500-25000 mg/kg bw/日)であり、試験された最高用量であった。28日ラット経口(強制)試験におけるB(Alk)2MベントナイトのNOAELは1,000 mg/kg bw/日であり、試験された唯一の用量であった。28日ラット経口(強制)試験におけるB(2Alk)Mヘクトライトに対するLOAELは、血液凝固時間の減少、塩化物とカルシウムレベルの減少、副腎重量の増加に基づいて、1000 mg/kg bw/日、試験された唯一の投与量であった。他の有機粘土カテゴリー(B(Alk)2Mヘクトライト、2M(2Alk)ヘクトライト、B(2Alk)Mベントナイト、およびB(2Alk)Mモンモリロナイト)についても、反復投与毒性は同様であると予期される。

カテゴリーメンバー、B(Alk)2Mヘクトライト、2M(2Alk)ベントナイト、2M(2Alk)ヘクトライトは細菌による復帰変異試験(代謝活性化の有無で)が、そしてB(Alk)2Mヘクトライトは、マウスリンパ球細胞を用いて*in vitro*で試験が行われた;これらの物質はこれらの試験で遺伝子変異原性について陰性であった。B(Alk)2Mベントナイトは、同様に細菌による復帰変異原性試験で陰性であった。*in vivo*染色体異常と*in vivo*小核試験で、B(Alk)2MベントナイトおよびB(2Alk)Mヘクトライトは、両方とも染色体異常に対して陰性であった。これらの物質の追加試験は、物理化学的性質のため適切ではない。

これらの物質の発がん性に関して利用可能なデータはない。不純物である吸入性結晶性シリカ(B(Alk)2Mヘクトライトに0.2%; 2M(2Alk)ベントナイトに0.1-5%; B(2Alk)Mベントナイトに0.1-10%のレベルで存在する可能性がある)は既知のヒト発がん性物質であると認められている(IARCグループ1)。

B(2Alk)Mヘクトライトを、0、50、225と1,000 mg/kg bw/日の投与量で用いた1世代生殖試験は、ラットで発生毒性を引き起こす可能性について実施された。本物質は、催奇形性は見出されず、どの用量でも如何なる生殖毒性もなかった。B(2Alk)Mヘクトライトには生殖毒性または、発生影響のないことに基づいて、担当国の有機粘土物質は、1,000 mg/kg bw/日までの用量では発生毒性または、生殖毒性を証明することは予期されない。

## 環境

約180°Cから始まり約600°Cまで極端に加熱されるとき幾らかの分解があるかもしれないが、有機粘土は融解あるいは沸騰もしない。有機粘土は、流動性がある固体粉末であり、本質的に水、有機溶剤、脂質に不溶で、環境条件下では蒸発性がない。カテゴリーの全メンバーは粉末であり、蒸発しないので蒸気圧は関連性がない。有機粘土は、本質的に水と脂質に不溶であるので、分配係数は厳密には決定され得ない。物質(全カテゴリーメンバー)の密度は1.4から1.8の範囲内である。有機粘土は、本質的に爆発性でなく、更に酸化剤でもない。

有機粘土は、主に土壌または底質中に見出されると予期されるが、より小さい粒子は水に懸濁する可能性がある。大気の光分解の予測もまたこれらの化合物の特性から関連性がない。有機粘土は、pH範囲3-11を超えた塩基または酸に耐性があるので、加水分解しないだろう。それらの物理化学的特性の故に有機粘土を、EPIWINを用いて環境区分への分配について評価することはできない。

B(Alk)2M ベントナイトを用いた別個の3つのOECD TG 306試験で、生分解性は、28日間で試験によっては4.7から33.4%に渡っていた。それらの化合物の構造と化学的性質と同様に、これらのデータに基づいて、他の有機粘土メンバーもまた同様に限られた生分解性であることが予想される。生分解は、有機粘土の有機成分(例えば、アルキル4級アンモニウム塩)にのみ関連するということは注意されるべきである。

魚類急性毒性試験は、B(Alk)2Mベントナイトを用いて実施されてきた。淡水のニジマスでLC<sub>50</sub>(96hr)は>約500 mg/L(設定濃度)であった。ニジマス(*Onchorhynchus mykiss*)を用いた半止水式試験では、この物質についてLC<sub>50</sub>(21d)は>1.0 mg/L(設定濃度)であった。

急性水生無脊椎動物試験が実施されてきた。ミジンコ(*Daphnia magna*)に対する設定濃度EC<sub>50</sub>値は、カテゴリーメンバーに対して2M(2Alk)ベントナイトは>100 mg/L(48hr)、B(2Alk)2Mベントナイトは300 mg/L(96hr)、および<500 mg/L(48hr)、B(2Alk)Mヘクトライトは>100 mg/L(96hr)であった。B(Alk)2M ベントナイトに対する<約500 mg/Lの値があるのは、この試験が1つの用量しか用いていないので、EC<sub>50</sub>が決定できないことによる。カテゴリーメンバーに対する他の種(*Mysidopsis*, *Acartia tonsa*)のEC<sub>50</sub>値も同様であるか、あるいはより低い毒性を示した。

水生植物*Skletonema costatum*に対する急性毒性に関するデータが利用出来る。ErC<sub>50</sub>(72hr)は、2M(2Alk)ベントナイトに対して>1,000 mg/L(設定)であった。B(2Alk)Mベントナイトを用いた3つの試験で、ErC<sub>50</sub>(72hr)値は、23.8、82.3、>1,000 mg/Lであった。いくつかの試験は、EC<sub>50</sub>が23.8 mg/Lを報告した試験も含め、物理的な毒性の誘発が示されたようである；しかしその試験は、分散剤の証拠について追加的な情報を提出しなかった。B(2Alk)Mヘクトライトに対してEbC<sub>50</sub>(72hr)が>100 mg/L(設定)、ErC<sub>50</sub>(0-24hr)が>100 mg/L(設定)、およびNOECが100 mg/L(設定)であった。

慢性水生毒性試験はB(2Alk)Mヘクトライトに対しても利用可能である。*Daphnia magna*におけるEC<sub>50</sub>(繁殖、21d)が7.6 mg/L(設定)、そしてNOECが3.2 mg/Lであった。32 mg/Lで起きた死亡(遊泳障害)は、一部は試験物質の物理的な影響によるためであると考えられた。

底質改良生物(re-worker)泥エビ(*Corophium volutator*)の毒性評価ではLC<sub>50</sub>値は、2M(2Alk)ベントナイトが>10,000、2M(2Alk)ヘクトライトが>1,269、B(2Alk)Mベントナイトが>10,000 mg/kgであった。

いくつかの陸生試験もまた実施されている。ミミズ急性毒性試験でNOEC(14d)は、B(Alk)2MベントナイトとB(2Alk)Mヘクトライトに対して1,000 mg/kgであった。B(2Alk)Mヘクトライトを用いてコショウソウ(*Lipidum sativum*)の播種における発芽と初期生長期の試験では、LOECが1 mg/kg(NOECは決定されていない)、LC<sub>50</sub>が9 mg/kgであった。B(2Alk)Mヘクトライトにばく露した小麦(*Tritium aestivum*)とダイコン(*Raphanus sativus*)の播種の発芽と初期生長期のEC<sub>50</sub>sは、>100 mg/kgであった。NOECsは両者とも試験された最高用量の100 mg/kgであった。

## ばく露

米国(担当国)の2005年の生産量は：

B(Alk)2Mヘクトライト=146万ポンド(約662トン)

2M(2Alk)ベントナイト=7304万ポンド(約33,130トン)

2M(2Alk)ヘクトライト=931万ポンド(約3223トン)

B(2Alk)Mベントナイト=1567万ポンド(約7108トン)

B(2Alk)Mモンモリロナイト=0ポンド(0トン)

当該有機粘土カテゴリーに共通の機能的特徴は、非水液体(non-aqueous fluids)に対するレオロジカル剤および/またはレオロジカル添加剤としての用途である。レオロジカル添加剤は、液体または粉末の流動性の制御手法と予測手法に影響を与える物質である。粘土タイプ、特定の4級アンモニウム化合物および反応条件の選択は、有機粘土の特殊な用途設計を可能にする。

有機粘土レオロジカル添加剤の下流用途とおよそのパーセント：

塗料を含む被覆剤(43 %)

掘削泥を含む油田分野の用途(37 %)

印刷インク(13 %)

化粧品(3 %)

その他、改良剤とナノ複合材料を含む(4 %)

幾つかの工場では閉鎖系が用いられている。これらの工場では、材料はバッグで運ばれ、排気キャプチャー付きのホッパーに放出される。他の工場では、一部が開放系の場合（例えば、材料の荷積、最終製品の荷下ろし、または、袋詰め作業場が開放系である可能性がある）であっても、他方の部分で閉鎖系の場合（例えば乾燥や他の処理工程）もある。いくつかの工学的管理方法が全製造工場で行われている。例えば、工場によっては、材料荷積に吸引システムを有する；十分に閉鎖されない場所では局所排気装置が用いられる；集塵機、簡単な排気装置が使われ、排気キャプチャーが採用される。製品はシールされた何重かの紙袋に入れられ、パレットに載せられ、熱収縮包装され、貯蔵庫に貯蔵される。製品は、密閉された袋に入れてトラックで製造工場から出荷され、船まで輸送され、そこでは製品は種々のタイプの輸送用コンテナの中に置かれる。一般的に、約10-20メートルトンが船で送られる。まれな場合（たとえば緊急時）、1トン未満が飛行機で輸送される。

作業ばく露は、荷積、荷下ろし、袋詰め、とサンプリングの間に生じる可能性が最も高い。散逸粉塵のわずかな装置漏れの可能性もある。全経路(吸入、経皮、経口)のばく露の可能性が製造段階である。しかし、最も可能性のあるばく露経路は粉塵の吸入であり、次に皮膚接触が次ぐ。袋詰め作業場では、全プラントで局所排気装置が用いられ、作業者が8時間加重ばく露限界値(例えば、クリストバライトシリカと石英シリカに対してACGIH TLV、吸入性粉塵と全粉塵に対してACGIH TLVとOSHA PEL)を超えないようにしている。呼吸用保護具は必要に応じて付加的な保護具として有効である。皮膚接触は、保護着の使用により最小化される。大気汚染の産業衛生モニタリング評価が、二つの未公開(confidential)場所での製造操作の間実施された。これらの評価は、作業ばく露が代表的な職業ばく露限界値より低いことを示した。

産業上の顧客の段階では、使用状況は主に開放系であるが、いくつかの産業上の顧客の工程システムは閉鎖系である。例えば、50ポンドバッグは顧客のサイトで開けられ、ホッパーに投入される。ホッパーは一般的に、材料を工程に取り入れるための吸引装置を持つ。ほとんどの顧客は、閉鎖されていない区域では、局所排気装置を用いる(例えば、バッグを混合タンクに空ける間に生じる粉塵を最小化する)。ばく露は、バッグ

投入場所で生じる可能性が最も高い。製造企業におけるように、産業上の顧客もまた、工場の大部分で局所排気装置と呼吸用保護具の組み合わせを通常採用して作業者を保護しており、ACGIHあるいはOSHAにより設定された総粉塵および吸入性粉塵並びにクリストバライトシリカと石英シリカの8時間加重ばく露限界を超えないようにしている。

有機粘土物質は産業と個人消費財に用いられている；溶剤性の塗料と染料(solvent borne paints and stains)、特殊被覆材および接着剤、特殊シーラント剤、化粧品とパーソナルケア製品(制汗剤)、および掘削液。塗料や接着剤に用いられる際は、有機粘土材料は最終製品中に封入される。化粧品やパーソナルケア製品中に使われる有機粘土は、皮膚と吸入ばく露を生じる結果となるかもしれない。塗料では、有機粘土の最終製品における平均含有量は0.5から0.7 %である。ほとんどの他の消費者製品は調剤全体の1-3 %以下である。しかし、幾つかの製品(例えば、暖炉/ストーブの家庭用保守管理用)は、より高い割合を含んでいる(例えば、暖炉/ストーブ修復ペーストでは<45 %2M(2Alk)ベントナイト、および配管パティにおいては1-10 %の2M(2Alk)ベントナイト)。油田掘削では、ほとんどの製品は全調剤の1-3 %w/wを含んでいる。供給される有機粉末の1 %未満が10 μmより小さい粒子サイズであろう。塗料、被覆剤、インク、潤滑グリース、化粧品用途などのような高品質消費者用途については、これらの材料は平均粒子サイズ約75 μmまで通常は磨耗整形される。凝集有機粘土については、主に油ベースの掘削液中で用いられ、粒子サイズは直径約6 mmまでの範囲かもしれない。

有機粘土中の4級アンモニウム化合物は、強いイオン力と粘土への化学的吸収により粘土に強く結合する。4級化合物が粘土の置換能力以上に含まれる状況では、「過剰」分は粘土へ化学吸収され逃れられない可能性が高い。通常の使用の条件下では、4級のアンモニウム化合物自身へのばく露はほとんど起こりそうにない。

## 勧告と勧告の理由、推奨される追加作業の性質

### ヒト健康

現在、本化学物質の追加作業の優先順位は低い。本化学物質は、ヒトに対する有害性を示す特性を有する(最小から中程度の眼刺激性、高ばく露レベルの急性試験で観察された気道刺激性、幾つかの物質について、不純物として10 %まで含まれている結晶性シリカ由来の発がん性)。

担当国のデータに基づけば(全世界製造に占める割合は未知であるが、担当国での用途パターンに関連して)、リスク管理対策が職場環境(クリストバライトシリカと石英シリカおよび吸入性粉塵と総粉塵に対する職業ばく露限界値)で適用されている。諸国は、さらに措置が必要か否かを判断するために、彼ら自身のリスク管理対策を検討することを望むかもしれない。

### 環境

現在、低い有害性プロファイルのために化学物質の追加作業の優先順位は低い。

#### [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。