

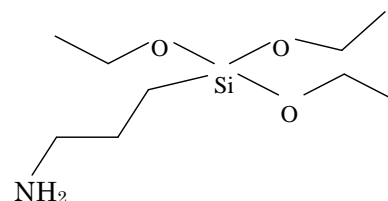
## 初期評価プロファイル (SIAP)

## 3-アミノプロピルトリエトキシシラン

物質名 : 3-Aminopropyltriethoxysilane (APTES)

化学式 :  $C_9H_{23}NO_3Si$ 

CAS No. : 919-30-2



## SIAR 結論の要旨

## ヒトの健康

3-アミノプロピルトリエトキシシラン (APTES) を経口、経皮、並びに吸入経路によりばく露して急性毒性試験を行った。ラットにおける急性経口LD<sub>50</sub>は 1570 から 3650mg/kg bwの範囲である。経皮LD<sub>50</sub>は 4.29g/kg bwで、加水分解物の 4 時間吸入LC<sub>50</sub>値は 7.35mg/Lより大きかった。飽和APTES蒸気に 6 時間ばく露したが 5 匹ずつの雄と雌のラットのいずれも死ななかった (LT<sub>50</sub>>6 時間)。腎臓は経口及び経皮ばく露毒性の標的臓器である。

APTES は皮膚及び眼に非常に強い(severe)刺激性がある。モルモットの Buehler 試験において、7 匹/30 匹の動物が皮膚感作性反応を示した。本物質の加水分解生成物はモルモットの maximization 試験で感作性反応を示さない。

4週間、APTES加水分解物の呼吸が可能なエアゾール147mg/m<sup>3</sup>をラットに反復吸入ばく露すると、極微小の肉芽腫性喉頭炎の病巣及び扁平異上皮化を生じた。ウサギにおいて、APTES 用量が 17 または 84mg/kg bw/日の 9 回反復経皮ばく露、並びに 126mg/kg bw/日の 3 回反復経皮ばく露後に全身の毒性は観察されなかった。よって接触個所 NOAEL は 17mg/kg bw/日より少ない。ラットにおける 90 日経口(強制胃内投与)試験において、APTES の最大無有害影響量 (NOAEL) は 200mg/kg bw/日であった。

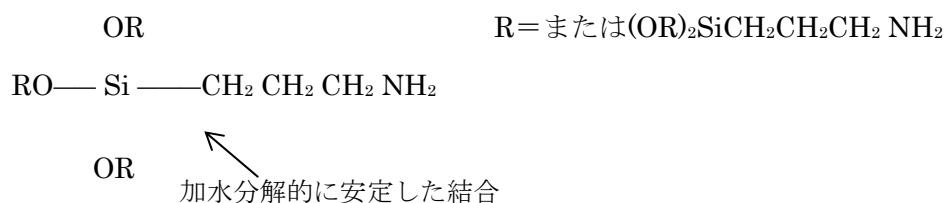
APTES はいくつかのバクテリア復帰突然変異/Ames 試験、*in vitro* V79 ハムスター肺細胞及びチャイニーズハムスター線維芽細胞染色体異常試験、2つのチャイニーズハムスター卵巣細胞HGPRT遺伝子突然変異試験、並びに*in vivo* マウス小核試験を実施した。*In vivo* 及び*in vitro* スクリーニング試験は遺伝毒性の証拠を示さなかった。

ラットにおける 90 日の強制経口投与試験において最高用量レベル(600mg/kg/日)で、発情周期及び精子形成又は生殖器官のパラメーターに影響は見られなかった。発生影響のNOAELはラットにおける強制経口ばく露後にAPTESについて 100mg/kg bw/日と確認された。死亡及び胃腸管の潰瘍化に基づいて、母性毒性のNOAEL は<0.5mL/kg である。

## 環境

予測分配係数 $\text{LogK}_{ow}$ は 0.31、予測水溶解度は  $7.6 \times 10^5 \text{mg/L}$  である。本物質が加水分解的に不安定なので、これらの値は適切でないかもしれない。蒸気圧は $0.02 \text{hPa}$ ( $20^\circ\text{C}$ )、融点は $-70^\circ\text{C}$ 、並びに沸点は $223^\circ\text{C}$ ( $1013 \text{hPa}$ )である。光分解モデルは光化学的に発生したOHラジカルと反応するために、大気中の半減期は約 2.4 時間であることを示している。しかしながら、消失モードとしての光分解はAPTESが加水分解的に不安定なために重要な分解過程であると思えないし、予想されない。

APTES は  $10^\circ\text{C}$  または  $24.7^\circ\text{C}$  で pH7 を除いて、通常環境の pH 及び温度条件の範囲に亘って加水分解的に不安定である ( $t_{1/2} < 1$  時間)。pH7 で半減期は  $10^\circ\text{C}$  または  $24.7^\circ\text{C}$  でそれぞれ、56 または 8.4 時間である。本物質の迅速な加水分解はエタノールとトリシラノールを生じるが、Si-C結合は加水分解的に安定であり、アミノプロピル基は切断されないため、更には加水分解されない。エトキシ基だけは加水分解されるだろう。過渡的に発生するシラノール基は他のシラノールと縮合反応し、下記の構造を有するアミノプロピル機能性樹脂を生成する。



EQC レベルⅢモデルが APTES の環境区画における運命、輸送、並びに分布を評価するために用いられた。大気、土壌、並びに水に対してそれぞれ  $1000 \text{kg/時間}$  の負荷率を同時に用いた場合、レベルⅢフガシティーモデルは次に示す APTES の分布比率を示す：大気=0.7%、土壌=91.6%、水=7.7%、底質=0.00%。しかしながら、APTES は加水分解的に不安定なので、環境中で検出されないだろう。APTES は易生分解性ではない。観察された生分解は加水分解生成物(エタノール及びトリシラノール)に関するものである。本物質は加水分解的に不安定なので生物蓄積は予想されない。

漏洩状態では、親物質のシラン濃度は非常に高い。シラノール濃度も高かった。しかしながら、シラノールは迅速に自己縮合して水に不溶性で樹脂状のオリゴマー及びポリマーを形成する。結果として生じたオリゴマー及びポリマーの分子量は 1000 以上であると推測される。事例証拠は、漏洩により生じるポリマーの分子量は5000 から10000 であることを示唆している。親物質のシラン及び生じたシラノールが希釈されると、縮合により生じるポリマーはより低い分子量であると予想される。十分に低いシラノール濃度になると、低分子量のオリゴマーが生成されやすくなる。類似のトリアルコキシシラン $1000 \text{ppm}$ で平衡濃度はシラノールモノマー86%で、シラノール二量体14%と予測される。更に低濃度では、シラノールは未縮合モノマーとして存在するだろう。これらのポリマーには生物学的利用能はないだろう。しかし、これらの物質は物理的影響(鰓の被包(encapsulation)、遮断(blockage))のためにおそらく水生生物に毒性を引き起こすであろう。淡水魚 (*Brachydanio rerio*) に対する APTES の 96 時間  $\text{LC}_{50}$  は  $\geq 934 \text{mg/L}$  である。ミジンコ (*Daphnia magna*) に対する APTES の 48 時間  $\text{EC}_{50}$  は  $331 \text{mg/L}$  である。淡水緑藻 (*Scenedesmus subspicatus*) の 72 時間  $\text{E}_b\text{C}_{50}^*$  は  $603 \text{mg/L}$  である。細胞の生長に基づいて、淡水緑藻 (*Scenedesmus subspicatus*) の細胞生長の 10% 抑制は 72 時間  $\text{E}_b\text{C}_{10} = 38 \text{mg/L}$  であった。生長率に基づいて、同種の細胞生長の 10% 抑制は (0-72 時間)  $\text{E}_r\text{C}_{10}^{**} = 321 \text{mg/L}$  であった。APTES は加水分解に弱いので (加水分解は投与溶液の処方中及び試験中に生じるかもし

れないが)、観察された毒性は加水分解生成物であるエタノール及びトリシラノールのためかもしれない。

JETOC 註： \*E<sub>b</sub>C：生長曲線下の面積比較 \*\*E<sub>r</sub>C：成長速度の比較

## ばく露

本物質の商業用途は多数あり、ガラス繊維、接着剤及びシーラント剤、鋳造樹脂、並びに被覆加工の前処理におけるカップリング剤及び接着促進剤としての用途が含まれる。シーラント剤及び被覆加工剤中に本物質が少量検出されるかもしれない。製造では、本物質はほとんど閉鎖系で取り扱われる。製造工程中に求められる工学的管理法は、適切な換気、封じ込め、安全装置、並びに飛散によるばく露または大気ばく露を最小限にするために設計された適切なハードウェアである。本物質の加水分解による損失を最小限にするために、輸送は開放系よりもむしろ閉鎖系パイプで行なわれるが、開放系で本物質を輸送する顧客もいる。APTESは親物質のシランとして製造現場から加工企業/調剤企業に輸送される。一般的に、APTESは<1%の使用レベルで接着促進剤として加工企業/調剤企業により用いられる。いくつかの用途では、APTESは架橋剤として用いられ、これらの使用レベルはより高く、3–5%に達する。APTESは消費者製品または工業製品中に添加されると、親物質シランは調剤の成分と反応し、一般的に硬化(使用)が終わるまでの間0.1–0.2%で親物質シランとして存在する。硬化後に親物質シランはポリマー基材に消費され、もはや存在しないので、消費者や作業員ばく露の可能性は大いに減少する。APTESは使用中に重合する。消費者製品は各メンバー国の規則に従って、感作性物質を含有するとしてラベルされるだろう。アルコキシシランまたはこのシランのアミノ基に起因する毒性影響はこのカップリング反応の結果、大いに減少する。担当国におけるAPTESの生産量は2002年で1992トンであった。

## 勧告

本化学物質は現在の所、追加の研究の優先度は低い。

### 勧告の理論的根拠並びに勧告された追加の研究の特徴

本化学物質はヒトの健康(皮膚及び眼の刺激、並びに皮膚感作性)に有害性を示す。担当国によって提出されたデータに基づくと、適切なリスク管理対策が適用されており、ヒト及び環境へのばく露は低いと予想される。そのため、本化学物質は現在の所、追加の研究の優先度が低い。

#### [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。