

水質で変わるカチオン界面活性剤の有害性 その確認と予測モデル

加茂将史

産業技術総合研究所・ネイチャーポジティブ技術実装研究センター
安全科学研究部門

2025年8月29日

2025年度LRI研究報告会

NATIONAL INSTITUTE OF
ADVANCED
INDUSTRIAL
SCIENCE &
TECHNOLOGY

- 化学物質の生態リスク評価が進んでいます
- 化学物質の中には、複雑な混合物や、環境の質（硬度やpH）により有害性が変わるものがあります
- このような物質は評価困難物質とされ、リスク評価が遅れることがあります

- かつては、金属も評価困難物質でした。環境の質により有害性が変わるからです
- 2000年ごろから有害性予測モデルの開発が進み、今では、高い精度で有害性の予測が可能と考えられています

- カチオン界面活性剤も評価困難物質と考えられています。環境の質によって有害性が変わるからです
- このように変化する有害性が予測できないか、これが本研究の目的です

- ヘキサデシルトリメチルアンモニウム＝クロリド（以下、HTAC）を題材として、金属予測モデル同様のものが開発できないかを検討しました

1. 水質が違う。我が国ににおいて、どの程度バラついている？
 - 質が変わるといっても、何がどのようにバラつくかを知らなくてはなりません
2. 毒性が変わる
 - 環境質のうち、有害性に変化をもたらす質とは何かを知らなくてはなりません
3. HTACの濃度分析
 - 対象物質の濃度が正しく把握できるかを知ることが、第一歩です
4. 有害性値の導出
 - HTAC濃度と有害性を関連づけることが、有害性評価の第一歩です
5. 最後に、3と4を合わせて、予測できるモデルが構築できるかを検討します

水質が違う。我が国において、どの程度バラついている？

公益財団法人日本水道協会による水道水質データベース(<http://www.jwwa.or.jp/mizu/index.html>)のうち、平成30から令和2年までの47都道府県の各水道水原水を用いて解析を行いました

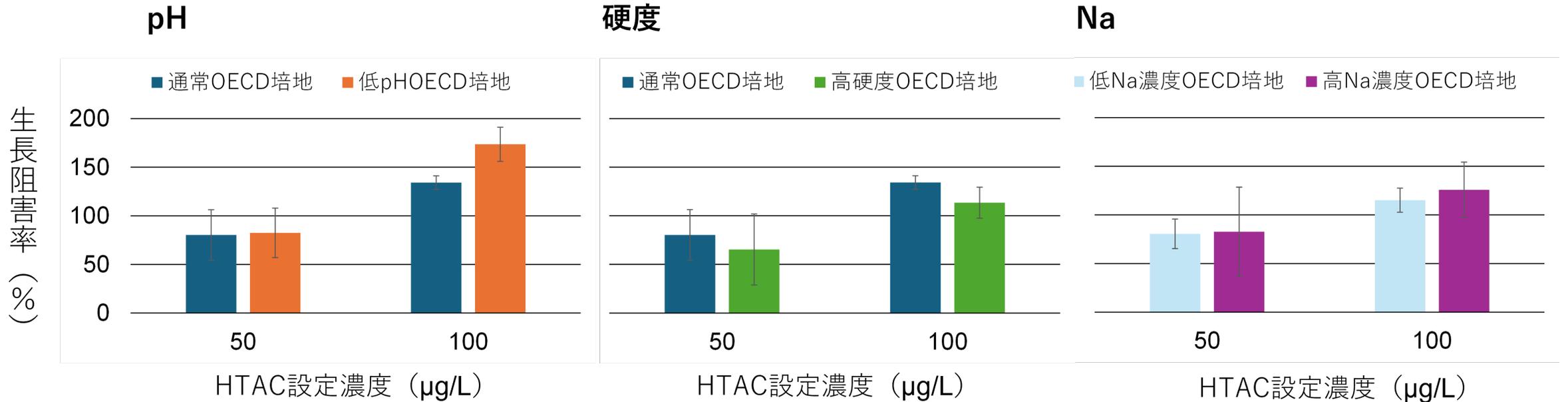
項目	下側5%	上側5%
硬度 (CaCO ₃ mg/L)	10	130
pH	6	8
ナトリウム (mg/L)	2	36
全有機炭素(TOC) (mg/L)	2	3.5

金属で顕著に影響を与えることが知られている水質項目のばらつきを例としてあげています

他の項目も調べていますので、興味ある方はご一報を

次に、これら項目がHTACの有害性に影響を与えるかを調べます

藻類を用いた生長阻害試験
OECD培地を標準として、各項目を調整しました



それぞれ隣り合った棒グラフをみましょう。これら二つにはたいした差がありません
これは、HTACの有害性はこれら水質項目は「顕著な影響を与えない」ことを示しています
では、有害性に影響を与える水質は何でしょうか。それは溶存有機物です
溶存有機物濃度が異なる二つの有害性試験結果を次の図に示します

黒線が、溶存有機物濃度 (DOC) が0mg/L、赤線が5mg/Lの結果です

藻類
生長
速度

HTAC濃度 (横軸) が高くなるにつれ、生長速度が低下することが見て取れます

黒線は赤線に比べて早く (より低い濃度で) 生長速度が低下しています

これは、DOCの濃度が高いと (低いと) 有害性は低くなる (高くなる) ことを表しています

HTAC濃度($\mu\text{g/L}$)

DOCは有害性に顕著な影響を与えるのです

次に、観測値 (点) と曲線からわかる影響指標を示します

無影響濃度(NOEC)、最低影響濃度(LOEC)と半数影響濃度(EC50)を示します

	HTAC濃度 (μg/L)					
	設定濃度		0h		72h	
DOC (mg/L)	0	5	0	5	0	5
NOEC	-	150	-	86.8	-	3.50
LOEC	5	390	2.02	269	0.27	39.9
EC50	20.1	395	9.21	259.7	1.78	26.3

- 例えば、「設定濃度」を見てみると、EC50は、DOC=0mg/Lでは約20μg/Lで、DOC=5mg/Lでは約400μg/Lです
- ここで一つ問題が生じます
- 設定濃度と試験開始前(0h)、試験終了時(72h)の分析濃度が違うことが見て取れます
- これはよく見られる現象で、（おそらく）HTACが容器等に吸着することで溶液中の濃度が減少しているのだと考えられています
- では有害性を予測したい、と考えた場合、どの濃度を用いるべきでしょうか

観測値と推定値の二乗和。値が小さいほど推定精度が高いことを示す

	設定濃度	0h濃度	72h濃度
DOC = 0 mg/L	0.540	0.396	1.58
DOC = 5 mg/L	0.273	0.211	0.283

- 赤字が最も推定精度が高い濃度を表しています
- つまり、DOC=0mg/Lでも5でも試験開始時(0h)濃度を用いて推定すると最も精度が高くなる、ということです
- これは「有害性予測」という観点においては、試験開始時濃度を用いることが最も信頼が高くなることを意味しています

ここまでの結果を用いれば、まだ試験を行っていないその他のDOC濃度の元での有害性が推定できます（ここまでの結果を用いればモデルが構築できるのですが詳細は省きます）

藻類
生長
速度

HTAC濃度($\mu\text{g}/\text{L}$)

- 青と緑の曲線が既に示した結果です
- モデルを用いて、DOCが2.5と10mg/Lの結果を推定しました（オレンジと赤線）
- この推定値がどれほど正しいかは今後確認する予定です
 - 必要によってはモデルの再構築も行います

1. 水道水データベースを用いて我が国における水質の範囲を調べました
2. 有害性は水質の影響を受けませんでした。ここでは示しませんでした。EDTAにも影響を受けないようです。ただし、溶存有機物(DOC)は有害性に顕著な影響を与えました。DOCを0mg/Lから5mg/Lにすると、有害性値(例EC50)は10倍以上高くなります
3. HTACの分析濃度は、時間などの影響を強く受けます
4. モデル予測の観点からは試験開始時濃度を用いた時、最も精度が高い予測が得られることがわかりました
5. 今回開発したモデルの精度を確認しつつ、リスク評価への援用を検討したいと考えています

- 本研究は、日化協さんからご支援賜っております
- 本研究は
 - 眞野浩行、石川百合子（産総研）
 - 岡村哲郎、山本潤、山口夏純、小川晶史、澤井淳（いであ株式会社・環境創造研究所）との共同研究です
- また、本研究は、日本石鹼洗剤工業協会様よりご助言をいただきながら推進しています
- 多くの方のご貢献に感謝申し上げます