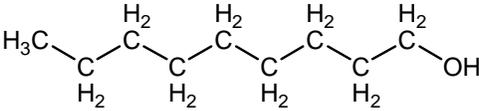


[7] 1-ノナノール

1. 物質に関する基本的事項

(1) 分子式・分子量・構造式

物質名： 1-ノナノール (別の呼称：1-ノニルアルコール) CAS 番号：143-08-8 化審法官報公示整理番号：2-217 (アルカノール(C=5~38)) 化管法政令番号：(改正後政令番号*：1-319) RTECS 番号：RB1575000 分子式：C ₉ H ₂₀ O 分子量：144.25 換算係数：1 ppm = 5.90 mg/m ³ (気体、25) 構造式： 
--

*注：平成 21 年 10 月 1 日施行の改正政令における番号

(2) 物理化学的性状

本物質は脂肪臭を伴うバラに似た花様香気を有する、無色透明な液体である¹⁾。

融点	-5 ^{2),3),4)}
沸点	213.37 (760 mmHg) ²⁾ 、215 (760 mmHg) ⁵⁾ 、 213.4 (760 mmHg) ³⁾ 、194 ⁴⁾ 、213 ⁴⁾
密度	0.8280 g/cm ³ (20) ²⁾
蒸気圧	3.8 × 10 ⁻³ mmHg (=0.50Pa) (25) ²⁾ 、0.0227 mmHg (=3.03Pa) (25) ³⁾ 、0.3 mmHg (=40Pa) (20) ⁴⁾
分配係数 (1-オクタノール/水) (log Kow)	4.02 ²⁾ 、3.77 ³⁾ 、4.26 ⁶⁾
解離定数 (pKa)	
水溶性 (水溶解度)	140 mg/1000g (25) ²⁾ 、140 mg/L (25) ³⁾ 、 1000 mg/L (20) ⁴⁾

(3) 環境運命に関する基礎的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性							
好氣的分解							
アルキル鎖長が本物質と近い物質の分解性を以下に示す。							
物質名	経済産業(通産省)公報 公表内容	分解率(%)			試験期間(週間)	被験物質濃度(mg/L)	活性汚泥濃度(mg/L)
		BOD	GC	TOC			
トリデシルアルコール ^{7),8)}	分解性が良好と判断される物質	88	100	-	2	100	30
1-オクタノール ^{7),9)}	難分解ではないと判断される物質	89	100	99	4	100	30

化学分解性

OH ラジカルとの反応性（大気中）

反応速度定数： $14 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$ （AOPWIN¹⁰）により計算）

半減期：4.6 時間～46 時間（OH ラジカル濃度を $3 \times 10^6 \sim 3 \times 10^5 \text{ 分子/cm}^3$ ¹¹）と仮定し計算）

加水分解性

加水分解性の基を持たない¹²。

生物濃縮性

生物濃縮係数(BCF)：25（BCFWIN¹³）により計算）

土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc)：52（PCKOCWIN¹⁴）により計算）

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

「化学物質の製造・輸入数量に関する実態調査」によると、アルカノール（C=5～38）としての平成 16 年度における製造（出荷）及び輸入量は 100,000～1,000,000t/年未満である¹⁵。

用途

本物質の主な用途は、ファインケミカル中間体と合成香料の原料とされている¹⁶。

炭素数 6 個以上のアルコール類の総称である高級アルコールは石油化学製品を原料とする合成高級アルコール、天然油脂を原料とする天然高級アルコールがある。合成高級アルコールの主な用途は工業用需要が中心で界面活性剤、合成洗剤、可塑剤のほか、潤滑添加剤、樹脂安定剤などとされている¹⁷。天然高級アルコールは配合原料や添加剤、誘導体として使われる場合があり、シャンプー、消火剤の飛沫安定剤、圧延油、合成樹脂の滑剤や柔軟仕上げ剤、化粧品などに配合されており、炭素数が高いものは軟膏基剤にも用いられている¹⁷。

このほか、本物質は、オレンジ、キウイフルーツ、ネクタリン等の植物から発生する揮発性物質である¹⁸。

(5) 環境施策上の位置付け

本物質は化学物質排出把握管理促進法（化管法）の対象物質見直し（平成 21 年 10 月 1 日施行）により、新たに第一種指定化学物質（政令番号：319）に指定されている。また、本物質は水環境保全に向けた取組のための要調査項目に選定されている。

2. ばく露評価

生態リスクの初期評価のため、水生生物の生存・生育を確保する観点から、実測データをもとに基本的には水生生物の生息が可能な環境を保持すべき公共用水域における化学物質のばく露を評価することとし、データの信頼性を確認した上で安全側に立った評価の観点から原則として最大濃度により評価を行っている。

(1) 環境中への排出量

本物質は化学物質排出把握管理促進法（化管法）の対象物質見直し前においては第一種指定化学物質ではないため、排出量及び移動量は得られなかった。

(2) 媒体別分配割合の予測

化管法に基づく排出量及び移動量が得られなかったため、Mackay-Type Level III Fugacity Model¹⁾により媒体別分配割合の予測を行った。予測結果を表 2.1 に示す。

表 2.1 Level III Fugacity Model による媒体別分配割合（％）

排出媒体	大気	水域	土壌	大気/水域/土壌
排出速度（kg/時間）	1,000	1,000	1,000	1,000（各々）
大気	61.5	0.1	0.1	1.4
水域	12.5	99.4	5.2	30.4
土壌	25.9	0.0	94.8	68.1
底質	0.1	0.4	0.0	0.1

注：数値は、環境中で各媒体別に最終的に分配される割合を質量比として示したものの

(3) 各媒体中の存在量の概要

本物質の環境中等の濃度について情報の整理を行った。媒体ごとにデータの信頼性が確認された調査例のうち、より広範囲の地域で調査が実施されたものを抽出した結果を表 2.2 に示す。

表 2.2 各媒体中の存在状況

媒体	幾何 平均値	算術 平均値	最小値	最大値	検出 下限値	検出率	調査 地域	測定年度	文献	
公共用水域・淡水	μg/L	0.014	0.029	<0.003	0.39	0.003	45/47	全国	2001	2)
		<4	<4	<4	<4	4	0/6	全国	1995	3)
公共用水域・海水	μg/L	<0.003	0.003	<0.003	0.006	0.003	1/3	三重県、 広島県、 愛媛県	2001	2)
		<4	<4	<4	<4	4	0/5	全国	1995	3)
底質(公共用水域・淡水)	μg/g	<0.1	0.11	<0.1	0.36	0.1	1/5	全国	1995	3)
底質(公共用水域・海水)	μg/g	<0.1	<0.1	<0.1	<0.1	0.1	0/6	全国	1995	3)

(4) 水生生物に対するばく露の推定 (水質に係る予測環境中濃度: PEC)

本物質の水生生物に対するばく露の推定の観点から、水質中濃度を表 2.3 のように整理した。水質について安全側の評価値として予測環境中濃度 (PEC) を設定すると、公共用水域の淡水域では 0.39 $\mu\text{g/L}$ 程度、海水域では概ね 0.006 $\mu\text{g/L}$ となった。

表 2.3 公共用水域濃度

水 域	平 均	最 大 値
淡 水	0.014 $\mu\text{g/L}$ 程度 (2001)	0.39 $\mu\text{g/L}$ 程度 (2001)
海 水	概ね 0.003 $\mu\text{g/L}$ 未満 (2001)	概ね 0.006 $\mu\text{g/L}$ (2001)

注：淡水は河川河口域を含む

3. 生態リスクの初期評価

水生生物の生態リスクに関する初期評価を行った。

(1) 水生生物に対する毒性値の概要

本物質の水生生物に対する毒性値に関する知見を収集し、その信頼性及び採用の可能性を確認したものを生物群(藻類、甲殻類、魚類及びその他)ごとに整理すると表3.1のとおりとなった。

表 3.1 水生生物に対する毒性値の概要

生物群	急性	慢性	毒性値 [μg/L]	生物名	生物分類	エンドポイント / 影響内容	ばく露期間 [日]	試験の 信頼性	採用の 可能性	文献 No.
藻類			307	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)	3	A	B ^{*3}	3) ^{*2}
			400	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(AUG)	3	A	B ^{*1,3}	2)
			1,530 ^{*1}	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(AUG)	3	A	B ^{*1,3}	2)
			2,170	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(RATE)	3	A	B ^{*3}	3) ^{*2}
甲殻類			361	<i>Ceriodaphnia cf. dubia</i>	ニセネコゼミジンコと同属	EC ₅₀ IMM	2	B	A	1)-18991
			580	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	C ^{*4}	C ^{*4}	2)
			3,910	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	C ^{*5}	C ^{*5}	2)
			25,000	<i>Nitocra spinipes</i>	ナミミズベソコミジンコ	LC ₅₀ MOR	4	C	C	1)-5185
魚類			3,200	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4	B ^{*6}	B ^{*6}	2)
			5,520	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッドミノ	LC ₅₀ MOR	4	A	A	1)-14128
			5,700	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッドミノ	LC ₅₀ MOR	4	A	A	1)-4154
その他			24,350	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	テトラヒメナ属	IGC ₅₀ POP	2	B	B	1)-3262

毒性値(太字): PNEC 導出の際に参照した知見として本文で言及したもの

毒性値(太字下線): PNEC 導出の根拠として採用されたもの

試験の信頼性: 本初期評価における信頼性ランク

A: 試験は信頼できる、B: 試験は条件付きで信頼できる、C: 試験の信頼性は低い、D: 信頼性の判定不可

E: 信頼性は低くないと考えられるが、原著にあたって確認したものではない

採用の可能性: PNEC 導出への採用の可能性ランク

A: 毒性値は採用できる、B: 毒性値は条件付きで採用できる、C: 毒性値は採用できない

エンドポイント

EC₅₀ (Median Effective Concentration): 半数影響濃度、IGC₅₀ (50% Growth Inhibitory Concentration): 半数生長阻害濃度、

LC₅₀ (Median Lethal Concentration): 半数致死濃度、NOEC (No Observed Effect Concentration): 無影響濃度

影響内容

GRO (Growth): 生長、IMM (Immobilization): 遊泳阻害、MOR (Mortality): 死亡、

POP (Population Changes): 個体群の変化、REP (Reproduction): 繁殖、再生産

()内: 毒性値の算出方法

AUG (Area Under Growth Curve): 生長曲線下の面積により求める方法(面積法)

RATE: 生長速度より求める方法(速度法)

*1 原則として速度法から求めた値を採用しているため採用の可能性は「B」とし、PNEC 導出の根拠としては用いない

- *2 文献2) をもとに、試験時の実測濃度(幾何平均)を用いて速度法により 0-72 時間の毒性値を再計算したものを掲載
- *3 試験終了時の被験物質の減少が著しいため、採用の可能性は「B」とした
- *4 分析方法に疑義があるため、試験の信頼性、採用の可能性とも「C」とした
- *5 試験濃度の設定に問題があるため、試験の信頼性、採用の可能性とも「C」とした
- *6 界面活性作用のある助剤を用いているため、試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした

評価の結果、採用可能とされた知見のうち、生物群ごとに急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて最も小さい毒性値を予測無影響濃度 (PNEC) 導出のために採用した。その知見の概要は以下のとおりである。

1) 藻類

環境庁²⁾は OECD テストガイドライン No.201 (1984) に準拠し、緑藻類 *Pseudokirchneriella subcapitata* (旧名 *Selenastrum capricornutum*) の生長阻害試験を GLP 試験として実施した。設定試験濃度は 0、0.5、0.9、1.7、3.1、5.6、10.0 mg/L (公比 1.8) であった。被験物質の実測濃度は試験開始時及び終了時においてそれぞれ設定濃度の 70.0~80.4%、12.9~19.6%であったため、毒性値の算出には実測濃度 (試験開始時と終了時の幾何平均) が用いられた。速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は 2,170 µg/L、72 時間無影響濃度 (NOEC) は 307 µg/L であった³⁾。なお、試験終了時の被験物質の減少が大きいため採用の可能性は「B」とした。また、面積法による毒性値の中にはさらに小さいものもあったが、本初期評価では原則として生長速度から求めた値を採用している。

2) 甲殻類

Rose ら¹⁾⁻¹⁸⁹⁹¹は米国 EPA の試験方法 (EPA/600/4-90/027F, 1993) に基づく標準法 (Warne, 1996) に準拠し、ニセネコゼミジンコと同属である *Ceriodaphnia cf. dubia* の急性遊泳阻害試験を実施した。試験は止水式 (密閉容器使用) で行われた。試験溶液の調製には硬度 65.2 mg/L (CaCO₃ 換算) の試験用水と、助剤としてアセトンが用いられた。被験物質の実測濃度は初期実測濃度から 20% 以上減少することはなかった。初期実測濃度に基づく 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) は 361 µg/L であった。

3) 魚類

環境省²⁾は OECD テストガイドライン No.203 (1992) に準拠し、メダカ *Oryzias latipes* の急性毒性試験を GLP 試験として実施した。試験は半止水式 (24 時間毎換水) で行われた。設定試験濃度は 0、1.1、1.9、3.4、6.2、11.1、20.0 mg/L (公比 1.8) であった。試験溶液の調製には、試験用水として脱塩素水道水 (硬度 41 mg/L、CaCO₃ 換算) が、助剤として界面活性作用のある硬化ひまし油 (HCO-50) 20 mg/L が用いられた。被験物質の実測濃度は、試験開始時及び 24 時間後の換水前においてそれぞれ設定濃度の 65.5% 以下及び 62.0% 以下であった。毒性値の算出には実測濃度 (試験開始時と 24 時間後の幾何平均) が用いられ、96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) は 3,200 µg/L であった。界面活性作用のある助剤が用いられていたため、試験の信頼性、採用の可能性とも「B」とした。

4) その他

Schultz ら¹⁾⁻³²⁶²は前報(1983)に基づき、テトラヒメナ属 *Tetrahymena pyriformis* の急性毒性試験を実施した。試験は止水式で行われ、設定試験濃度区は対照区 + 5 濃度区以上であった。48 時間半数生長阻害濃度 (IGC₅₀) は 24,350 µg/L であった。

(2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性及び慢性毒性のそれぞれについて、上記本文で示した毒性値に情報量に応じたアセスメント係数を適用し予測無影響濃度 (PNEC) を求めた。

急性毒性値

藻類	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	生長阻害 ; 72 時間 EC ₅₀	2,170µg/L
甲殻類	<i>Ceriodaphnia cf. dubia</i>	遊泳阻害 ; 48 時間 EC ₅₀	361µg/L
魚類	<i>Oryzias latipes</i>	96 時間 LC ₅₀	3,200µg/L
その他	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	生長阻害 ; 48 時間 IGC ₅₀	24,350µg/L

アセスメント係数 : 100 [3 生物群 (藻類、甲殻類、魚類) 及びその他の生物について信頼できる知見が得られたため]

これらの毒性値のうちその他の生物を除いた最も小さい値 (甲殻類の 361 µg/L) をアセスメント係数 100 で除することにより、急性毒性値に基づく PNEC 値 3.6 µg/L が得られた。

慢性毒性値

藻類	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	生長阻害 ; 72 時間 NOEC	307µg/L
----	--	-------------------	---------

アセスメント係数 : 100 [1 生物群 (藻類) の信頼できる知見が得られたため]

得られた毒性値 (藻類の 307 µg/L) をアセスメント係数 100 で除することにより、慢性毒性値に基づく PNEC 値 3.1 µg/L が得られた。

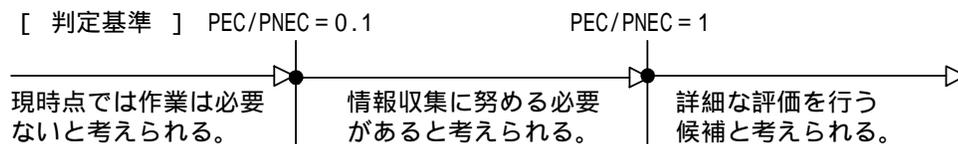
本物質の PNEC としては藻類の慢性毒性値から得られた 3.1 µg/L を採用する。

(3) 生態リスクの初期評価結果

表 3.2 生態リスクの初期評価結果

水質	平均濃度	最大濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
公共用水域・淡水	0.014 µg/L程度 (2001)	0.39 µg/L程度 (2001)	3.1 µg/L	0.1
公共用水域・海水	概ね0.003µg/L未満 (2001)	概ね0.006 µg/L (2001)		0.002

注 : 1) 水質中濃度の () 内の数値は測定年度を示す
2) 公共用水域・淡水は、河川河口域を含む



本物質の公共用水域における濃度は、平均濃度で見ると淡水域で $0.014 \mu\text{g/L}$ 程度、海水域では概ね $0.003 \mu\text{g/L}$ 未満であった。安全側の評価値として設定された予測環境中濃度 (PEC) は、淡水域で $0.39 \mu\text{g/L}$ 程度、海水域では概ね $0.006 \mu\text{g/L}$ であった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域で 0.1、海水域では 0.002 となるため、情報収集に努める必要があると考えられる。

PEC と PNEC の比が 0.1 以上となる地点数は 1 地点のため、本物質については、高濃度検出地点の検出原因に関する情報を中心に情報収集することが望ましいと考えられる。

4 . 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 有機合成化学協会(1985)：有機化合物辞典 講談社サイエンティフィク：687.
- 2) Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).
- 3) Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 275.
- 4) Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).
- 5) O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM).
- 6) Hansch, C. et al. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book: 65.
- 7) (独)製品評価技術基盤機構：既存化学物質安全性点検データ,
(http://www.safe.nite.go.jp/japan/kizon/KIZON_start_hazkizon.html, 2008.3.3 現在).
- 8) 通産省公報(1978.12.12).
- 9) 経済産業公報(2002.11.8).
- 10) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWINTM v.1.92.
- 11) Howard, P.H. et al. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xiv.
- 12) Lyman, W.J., Reehl, W.F., and Rosenblatt, D.H. (1990): Handbook of chemical property estimation methods: environmental behavior of organic compounds. American Chemical Society, Washington, D.C., USA. [Hazardous Substances Data Bank (<http://toxnet.nlm.nih.gov/>, 2007.4.10 現在)].
- 13) U.S. Environmental Protection Agency, BCFWINTM v.2.17.
- 14) U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWINTM v.1.66.
- 15) 経済産業省(2007)：化学物質の製造・輸入量に関する実態調査（平成 16 年度実績）の確報値(http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/jittaichousa/kakuhou18.html, 2007.4.6 現在)
- 16) 化学工業日報社(2008)：15308 の化学商品.
- 17) シーエムシー出版 (2007)：内外化学品資料 2006 年度版 D ファイル：D07 - 01-D07 - 10.
- 18) Hazardous Substances Data Bank (<http://toxnet.nlm.nih.gov/>, 2007.4.10 現在).

(2) ばく露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPI SuiteTM v.3.20.
- 2) 環境省水環境部水環境管理課(2003)：平成 13 年度要調査項目測定結果.
- 3) 環境庁環境保健部環境安全課(1996)：平成 7 年度化学物質環境汚染実態調査.

(3) 生態リスクの初期評価

1) U.S.EPA「AQUIRE」

3262 : Schultz, T.W., L.M. Arnold, T.S. Wilke, and M.P. Moulton (1990): Relationships of Quantitative Structure-Activity for Normal Aliphatic Alcohols. *Ecotoxicol.Environ.Saf.* 19(3):243-253.

4154 : Call, D.J., L.T. Brooke, and N. Ahmad (1981): Estimates of "No Effect" Concentrations of Selected Pesticides in Freshwater Organisms. Fourth Quarterly Prog. Rep. to EPA, EPA Coop. Agreement No.CR 806864030, Univ.of Wisconsin, Superior, WI :84 p.

5185 : Linden, E., B.E. Bengtsson, O. Svanberg, and G. Sundstrom (1979): The Acute Toxicity of 78 Chemicals and Pesticide Formulations Against Two Brackish Water Organisms, the Bleak (*Alburnus alburnus*) and the Harpacticoid *Nitocra spinipes*. *Chemosphere* 8(11/12):843-851.

14128 : Broderius, S., and M. Kahl (1985): Acute Toxicity of Organic Chemical Mixtures to the Fathead Minnow. *Aquat.Toxicol.* 6:302-322.

18991 : Rose, R.M., M.St.J. Warne, and R.P. Lim (1998): Quantitative Structure-Activity Relationships and Volume Fraction Analysis for Nonpolar Narcotic Chemicals to the Australian Cladoceran *Ceriodaphnia cf. dubia*. *Arch.Environ.Contam.Toxicol.* 34(3):248-252.

2) 環境庁(2000) : 平成 11 年度生態影響試験

3) (独)国立環境研究所(2007) : 平成 18 年度化学物質環境リスク評価検討調査(第 7 次とりまとめ等に係る調査) 報告書