

[17] 1-オクタノール

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-オクタノール

(別の呼称： n-オクタノール、オクチルアルコール、オクタン-1-オール)

CAS 番号： 111-87-5

分子式： $C_8H_{18}O$

分子量： 130.2

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色の液体でバラのような芳香がある¹⁾。

| | |
|-----------------------------|------------------------------|
| 融点 | -16 ~ -17 ²⁾ |
| 沸点 | 194 ~ 195 ²⁾ |
| 比重 | 0.827(20/4) ²⁾ |
| 蒸気圧 | 0.0794mmHg(25) ³⁾ |
| n-オクタノール/水分配係数 (log Pow) | 3.00 ⁴⁾ |
| 水溶性 | 540mg/L ⁵⁾ |

(3) 環境運命に関する基本的事項

本物質の分解性及び濃縮性は次のとおりである。

| |
|---|
| 分解性 非生物的： (OH ラジカルとの反応性)：大気中での半減期は 0.853 日と計算される ⁶⁾ 。 生物濃縮係数 (BCF)：40.74(計算値) ⁷⁾ |
|---|

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の平成 12 年における国内生産量は 278,162t(合成オクタノール)、輸出量は 39,669.467t、輸入量は 2,504.777t(輸出入ともオクタノールおよびその異性体)であり¹⁾、推定される国内流通量は 240,997.310t である。また、OECD に報告している生産量は 1,000 ~ 10,000t、PRTR 法の製造・輸入量区分は 100,000 ~ 1,000,000t の範囲である。

用途

本物質の主な用途は、香料(ローズ系の調合香料、精油、オクチルアルデヒド、 α -ヘキシルシンナミックアルデヒド)、化粧品、有機合成品の溶剤、可塑剤 D O P の原料および安定剤原料、界面活性剤、合成ゴムの重合あるいは加硫剤(オクチルメルカプタン)、金属の抽出剤(トリオクチルアミン)である¹⁾。

2. 暴露評価

環境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特定の排出源の影響を受けていない一般環境等からの暴露を評価することとし、安全側に立った評価の観点からその大部分がカバーされる高濃度側のデータによって暴露量の評価を行った。原則として統計的検定の実施を含めデータの信頼性を確認した上で最大濃度を評価に用いている。なお、多数のデータが得られている場合は、95パーセンタイル値を参考として併記している。

(1) 環境中分布の予測

1-オクタノールの環境中の分布について、各環境媒体間への移行量の比率をEUSESモデルを用いて算出した結果を表2.1に示す。なお、モデル計算においては、面積2,400km²、人口約800万人のモデル地域を設定して予測を行った¹⁾。

表2.1 1-オクタノールの各媒体間の分布予測結果

| | | 分布量(%) |
|---|---|--------|
| 大 | 気 | 0.05 |
| 水 | 質 | 5.5 |
| 土 | 壤 | 48.5 |
| 底 | 質 | 45.9 |

(2) 各媒体中の存在量の概要

1-オクタノールの水質及び底質中の濃度について情報の整理を行ったが、データの信頼性が確認された調査例はなかった。

表2.2 1-オクタノールの水質、底質中の存在状況

| 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 | 文献 |
|-------------------|-------|-------|-----|-----|-------|-----|----------|------|----|
| 公共用水域・淡水 μg/L | <7 | <7 | | | 5 ~ 7 | 0/2 | 北海道 | 1979 | 2 |
| 公共用水域・海水 μg/L | <5 | <5 | | | 5 | 0/6 | 長野 全国 | 1979 | 2 |
| 底質(公共用水域・淡水) μg/g | <300 | <300 | | | 300 | 0/2 | 北海道 | 1979 | 2 |
| 底質(公共用水域・海水) μg/g | <300 | <300 | | | 300 | 0/6 | 長野 全国 | 1979 | 2 |

注 過去に地域的に7及び5μg/L未満の報告がある(1979)²⁾

(3) 水生生物に対する暴露の推定(水質に係る予測環境中濃度:PEC)

1-オクタノールの水生生物に対する暴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。評価に耐えるデータは得られなかった。

表 2.3 水質中の1-オクタノールの濃度

| 媒体 | 平均 | 最大値等 |
|----------|--------------------|--------------------|
| | 濃度 | 濃度 |
| 水質 | | |
| 公共用水域・淡水 | 評価に耐えるデータは得られなかった。 | 評価に耐えるデータは得られなかった。 |
| 公共用水域・海水 | 評価に耐えるデータは得られなかった。 | 評価に耐えるデータは得られなかった。 |

注)：公共用水域・淡水は、河川河口域を含む。

3. 生態リスクの初期評価

生態リスクの初期評価として、水生生物に対する化学物質の影響（内分泌攪乱作用に関するものを除く）についてのリスク評価を行った。

(1) 生態毒性の概要

本物質の水生生物に対する影響濃度に関する知見の収集を行い、その信頼性を確認したもののについて生物群、毒性分類別に整理すると表 3.1 のとおりとなる。

表 3.1 生態毒性の概要

| 生物種 | 急性 | 慢性 | 毒性値 [μg/L] | 生物名 | エンドポイント /影響内容 | 暴露期間 [日] | 信頼性 | | | Ref. No. |
|-----|----|----|---------------|--------------------------------|----------------------|-------------|-----|---|---|-------------|
| | | | | | | | a | b | c | |
| 藻類 | | | 6,300 | <i>Scenedesmus quadricauda</i> | TT POP | 7 | | | | 5303 |
| | | | 6,500 | <i>Scenedesmus subspicatus</i> | EC ₅₀ POP | 2 | | | | 2997 |
| 甲殻類 | | | 1,600 | <i>Daphnia magna</i> | NOEC REP | 21 | | | | 847 |
| | | | 4,200 | <i>Ceriodaphnia dubia</i> | EC ₅₀ IMM | 2 | | | | 18991 |
| | | | 26,000 | <i>Daphnia magna</i> | EC ₅₀ IMM | 1 | | | | 847 |
| | | | 58,000 | <i>Nitocra spinipes</i> | LC ₅₀ MOR | 4 | | | | 5185 |
| | | | 58,900 | <i>Artemia salina</i> | LC ₅₀ MOR | 1 | | | | 15129 |
| | | | 60,000 | <i>Nitocra spinipes</i> | LC ₅₀ MOR | 4 | | | | 10870 |
| | | | 12,200 | <i>Pimephales promelas</i> | LC ₅₀ MOR | 4 | | | | 14128 |
| 魚類 | | | 13,000 | <i>Pimephales promelas</i> | LC ₅₀ MOR | 4 | | | | 3217 |
| | | | 16,500 | <i>Oryzias latipes</i> | LC ₅₀ MOR | 2 | | | | 12497 |
| | | | 21,000 | <i>Oryzias latipes</i> | LC ₅₀ MOR | 2 | | | | 20097 |
| | | | 13,100 | <i>Tetrahymena pyriformis</i> | EC ₅₀ | 46 時間 | | | | 12482 |
| その他 | | | 22,400 | <i>Tetrahymena pyriformis</i> | EC ₅₀ | 46 時間 | | | | 12482 |
| | | | 37,900 | <i>Tetrahymena pyriformis</i> | EC ₅₀ POP | 2 | | | | 8080 |
| | | | 41,160 | <i>Tetrahymena pyriformis</i> | EC ₅₀ GRO | 2 | | | | 3262 |
| | | | >93,000 | <i>Brachionus calyciflorus</i> | LC ₅₀ MOR | 1 | | | | 15129 |

太字の毒性値は、PNEC 算出の際に参照した知見として本文で言及したものの、下線を付した毒性値は PNEC 算出の根拠として採用されたものを示す。

信頼性) a : 毒性値は信頼できる値である、b : ある程度信頼できる値である、c : 毒性値の信頼性は低いあるいは不明

エンドポイント) EC₅₀ (Median Effective Concentration) : 半数影響濃度、LC₅₀ (Median Lethal Concentration) : 半数致死濃度、

NOEC (No Observed Effect Concentration) : 無影響濃度、TT (Toxicity Threshold) : 増殖阻害初期濃度

影響内容) GRO (Growth) : 生長(植物)、成長(動物)、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

(2) 予測無影響濃度 (PNEC) の設定

急性毒性値及び慢性毒性値のそれぞれについて、信頼できる知見のうち生物群ごとに値の最も低いものを整理し、そのうち最も低い値に対して情報量に応じたアセスメント係数を適用することにより、予測無影響濃度 (PNEC) を求めた。

急性毒性値については、藻類では *Scenedesmus subspicatus* に対する生長阻害の 48 時間半数影響濃度 (EC_{50}) が 6,500 $\mu\text{g/L}$ 、甲殻類では *Ceriodaphnia dubia* に対する遊泳阻害の 48 時間半数影響濃度 (EC_{50}) が 4,200 $\mu\text{g/L}$ 、魚類では *Pimephales promelas* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC_{50}) が 12,200 $\mu\text{g/L}$ 、その他の生物ではテトラヒメナ類 *Tetrahymena pyriformis* に対する 46 時間半数影響濃度 (EC_{50}) が 13,100 $\mu\text{g/L}$ であった。急性毒性値について 3 生物群 (藻類、甲殻類及び魚類) 及びその他の生物の信頼できる知見が得られたため、アセスメント係数として 100 を用いることとし、上記の毒性値のうちその他の生物を除いた最も低い値 (甲殻類の 4,200 $\mu\text{g/L}$) にこれを適用することにより、急性毒性値による PNEC として 42 $\mu\text{g/L}$ が得られた。

慢性毒性値については、甲殻類では *Daphnia magna* に対する繁殖阻害の 21 日間無影響濃度 (NOEC) が 1,600 $\mu\text{g/L}$ であった。慢性毒性値について 1 生物群 (甲殻類) の信頼できる知見が得られたため、アセスメント係数として 100 を用いることとし、慢性毒性値による PNEC として 16 $\mu\text{g/L}$ が得られた。

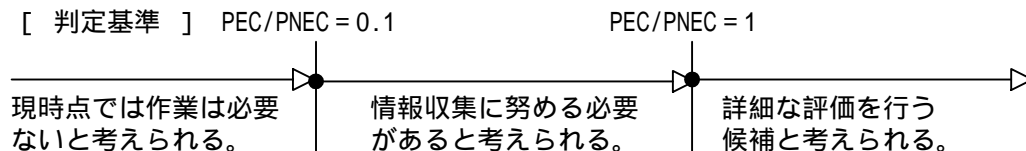
本物質の PNEC としては、甲殻類の慢性毒性値をアセスメント係数 100 で除した 16 $\mu\text{g/L}$ を採用する。

(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

| 媒体 | | 平均濃度 | 最大値[95パーセンタイル値]濃度 (PEC) | PNEC | PEC/PNEC 比 |
|----|-----------|-----------------------|-------------------------|--------------------|------------|
| 水質 | 公共用水域・淡水域 | 評価に耐える十分なデータは得られなかった。 | 評価に耐える十分なデータは得られなかった。 | 16 $\mu\text{g/L}$ | - |
| | 公共用水域・海水域 | 評価に耐える十分なデータは得られなかった。 | 評価に耐える十分なデータは得られなかった。 | | - |

注：公共用水域・淡水域は、河川河口域を含む。



現時点では暴露評価に耐える十分なデータが得られず、PEC を求めることができなかったため、生態リスクの判定はできない。本物質は、環境中では大部分が土壌と底質に分布し、水質への割合は 5.5%と予測されているものの、推定される国内流通量は 240,997.310t (平成 12 年度) と多い。したがって、今後は、環境中濃度の把握に努める必要がある。

4 . 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 化学工業日報社(2002) : 14102 の化学商品
- 2) Budavari, S. (ed.). The Merck Index - Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals. Rahway, NJ: Merck and Co., Inc., 1989. 1070. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]
- 3) Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989. [HSDB]
- 4) Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995. 49. [HSDB]
- 5) Barton AFM; Alcohols with Water. International Union of Pure and Applied Chemistry. Solubility Data Series. Vol. 15 pp. 438 (1984). [HSDB]
- 6) AOPWIN v1.90
- 7) BCFWIN 2.14

(2) 暴露評価

- 1: (財)日本環境衛生センター 平成13年度化学物質の暴露評価に関する調査報告書(環境庁請負業務)
- 2:環境庁保健調査室:昭和55年版化学物質と環境

(3) 生態リスクの初期評価

- 1) データベース: U.S.EPA 「AQUIRE」
 - 2) 引用文献 (Ref. No.: データベースでの引用文献番号)
- 847: Kuhn, R., M. Pattard, K. Pernak, and A. Winter (1989): Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to *Daphnia magna* in the 21 Day Reproduction Test. Water Res. 23(4):501-510.
- 2997: Kuhn, R., and M. Pattard (1990): Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to Green Algae (*Scenedesmus subspicatus*) in the Cell Multiplication Inhibition Test. Water Res. 24(1):31-38.
- 3217: Geiger, D.L., L.T. Brooke, and D.J. Call (1990): Acute Toxicities of Organic Chemicals to Fathead Minnows (*Pimephales promelas*), Vol. 5. Center for Lake Superior Environmental Studies, University of Wisconsin, Superior, WI:332.
- 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.
- 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. Chemosphere 8(11/12):843-851.
- 5303: Bringmann, G., and R. Kuhn (1980): Comparison of the Toxicity Thresholds of Water Pollutants to Bacteria, Algae, and Protozoa in the Cell Multiplication Inhibition Test. Water Res. 14(3):231-241.

- 8080 : Schultz, T.W., and M. Tichy (1993) : Structure-Toxicity Relationships for Unsaturated Alcohols to *Tetrahymena pyriformis*: C5 and C6 Analogs and Primary Propargylic Alcohols. Bull.Environ.Contam.Toxicol. 51(5):681-688.
- 10870 : Bengtsson, B.E., L. Renberg, and M. Tarkpea (1984) : Molecular Structure and Aquatic Toxicity - an Example with C1-C13 Aliphatic Alcohols. Chemosphere 13(5-6):613-622.
- 12482 : Larsen, J. (1996) : Pilot Ringtest on Five Test Substances Employing Optimized Test Protocols with the Protozoan *Tetrahymena pyriformis*. In: W.Pauli and S.Berger (Eds.), Rep.No.UBA-FB 96-039, Proc.International Workshop on a Protozoan Test Protocol with *Tetrahymena* in Aquatic Toxicity Testing, Umweltbundesamt:67-104.
- 12497 : Tsuji, S., Y. Tonogai, Y. Ito, and S. Kanoh (1986) : The Influence of Rearing Temperatures on the Toxicity of Various Environmental Pollutants for Killifish (*Oryzias latipes*). J.Hyg.Chem./Eisei Kagaku 32(1):46-53.
- 14128 : Broderius, S., and M. Kahl (1985) : Acute Toxicity of Organic Chemical Mixtures to the Fathead Minnow. Aquat.Toxicol.6:302-322.
- 15129 : Toussaint, M.W., T.R. Shedd, W.H. Van der Schalie, and G.R. Leather (1995) : A Comparison of Standard Acute Toxicity Tests with Rapid-Screening Toxicity Tests. Environ.Toxicol.Chem. 14(5):907-915.
- 18991 : Rose, R.M., M.S.J. Warne, and R.P. Lim (1998) : Quantitative Structure-Activity Relationships and Volume Fraction Analysis for Nonpolar Narcotic Chemicals to the Australian Cladoceran *Ceriodaphnia*. Arch.Environ.Contam.Toxicol. 34(3):248-252.
- 20097 : Carlson, R.W., S.P. Bradbury, R.A. Drummond, and D.E. Hammermeister (1998) : Neurological Effects on Startle Response and Escape from Predation by Medaka Exposed to Organic Chemicals. Aquat.Toxicol. 43(1):51-68.