

[20] 3,5,5-トリメチル-1-ヘキサノール

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： 3,5,5-トリメチル-1-ヘキサノール
(別の呼称： 3,5,5-トリメチルヘキサン-1-オール)

CAS 番号： 3452-97-9

化審法官報告示整理番号： 2-217

化管法政令番号： 1-223

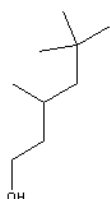
RTECS 番号：

分子式： $C_9H_{20}O$

分子量： 144.26

換算係数： $1\text{ppm}=5.90\text{mg}/\text{m}^3$ (気体、 25°C)

構造式：



(2) 物理化学的性状

本物質は無色透明な液体であり、多少甘味のある香気を有する¹⁾。

融点	$-70^\circ\text{C}^2)$
沸点	$194^\circ\text{C}^3)$
密度	$0.8236\text{g}/\text{cm}^3(25^\circ\text{C})^3)$
蒸気圧	$0.300\text{mmHg}(=4.00 \times 10^1\text{Pa})(20^\circ\text{C})^4)$
分配係数(1-オクタノール/水)(logKow)	$3.11^4)$
解離定数 (pKa)	
水溶性 (水溶解度)	$450.1\text{mg}/\text{L}(20^\circ\text{C})^5)$ 、 $572\text{mg}/\text{L}(25^\circ\text{C}$ 、推定値) ⁴⁾

(3) 環境運命に関する基本的事項

3,5,5-トリメチル-1-ヘキサノールの分解性及び濃縮性は次のとおりである。

生物分解性
<u>好氣的分解</u>
分解率：BOD 4%、TOC 4%、GC 55% (試験期間：4週間、被験物質濃度：100mg/L、活性汚泥濃度：30mg/L) ⁶⁾
<u>化学分解性</u>
<u>OH ラジカルとの反応性 (大気中)</u>
反応速度定数： $1.06 \times 10^{-11}\text{cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$ (25°C 、AOPWIN ⁷⁾ により計算)
半減期：6.1～61 時間 (OH ラジカル濃度を $3 \times 10^6 \sim 3 \times 10^5$ 分子/ cm^3 ⁸⁾ と仮定して計算)
<u>生物濃縮性 (高濃縮性ではないと判断される物質⁹⁾)</u>
濃縮倍率：3.9～8.1 (設定濃度：100 $\mu\text{g}/\text{L}$ 、試験期間：6週間) ⁶⁾

濃縮倍率：4.3～6.3（設定濃度：10μg/L、試験期間：6週間） ⁶⁾
--

(4) 製造輸入量及び用途

① 生産量・輸入量等

本物質の OECD に報告している生産量は 1,000～10,000t、化学物質排出把握管理促進法（化管法）の製造・輸入量区分は 1,000t である。なお、平成 13 年におけるノニルアルコールとしての国内生産量は 120,000t と推定とされている¹⁰⁾。

② 用途

本物質の主な用途は、可塑剤(DNP, DINP, DINA など)、香料、溶剤、界面活性剤の原料とされている¹⁰⁾。

(5) 環境施策上の位置付け

化学物質排出把握管理促進法第一種指定化学物質(政令番号:223)として指定されている。

2. 暴露評価

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高濃度側のデータによって暴露評価を行った。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。

(1) 環境中への排出量

3,5,5-トリメチル-1-ヘキサノールは化管法の第一種指定化学物質である。同法に基づき集計された平成13年度の届出排出量・移動量及び届出外排出量を表2.1に示す。

表 2.1 平成13年度 PRTR データによる排出量及び移動量

	届出						届出外 (国による推計)				総排出量 (kg/年)		
	排出量 (kg/年)				移動量 (kg/年)		排出量 (kg/年)				届出 排出量	届出外 排出量	合計
	大気	公共用水 域	土壌	埋立	下水道	事業所 外	対象業 種	非対象業 種	家庭	移動体			
全排出・移動量	362	0	0	0	0	1350					362	0	362

業種別届出量(割合)

倉庫業	190 (52.5%)	0	0	0	0	150 (11.1%)
化学工業	172 (47.5%)	0	0	0	0	1200 (88.9%)

総排出量の構成比 (%)	
届出	届出外
100	0

本物質の平成13年度における環境中への総排出量は0.4tと報告されており、すべて届出排出量である。これはすべて大気へ排出されるとしており、主な排出源は倉庫業(52.5%)及び化学工業(47.5%)である。

(2) 媒体別分配割合の予測

本物質の環境中の媒体別分配割合をPRTRデータ活用環境リスク評価支援システム(改良版)を用いて予測した¹⁾。予測の対象地域は、平成13年度環境中への推定排出量が最大であった愛知県(大気への排出量0.2t)とした。予測結果を表2.2に示す。

表 2.2 媒体別分配割合の予測結果

		分配割合 (%)
大	気	50.0
水	域	37.5
土	壌	12.1
底	質	0.4

(注) 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が、信頼性が確認された調査例はなかった。

(4) 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）

本物質について、実測データに基づき水生生物に対する暴露の推定を行うことはできなかった。

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	生物分類	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		○	4,500	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)*	3		○		2)
		○	4,700	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(AUG)	3		○		2)
	○		19,500	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(AUG)	3		○		2)
	○		57,000	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(RATE)*	3		○		2)
甲殻類		○	1,460	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21		○		2)
	○		9,240	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2		○		2)
魚類	○		16,000	<i>Carassius auratus</i>	フナ(キンギョ)	LC ₅₀ MOR	1		○		1)-623
	○		27,700	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4		○		2)
その他	○		13,500	<i>Xenopus laevis</i>	アフリカツメガエル	LC ₅₀ MOR	2		○		1)-121 52

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、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

影響内容) GRO (Growth) : 生長 (植物)、成長 (動物)、IMM (Immobilization) : 遊泳阻害、MOR (Mortality) : 死亡、REP (Reproduction) : 繁殖、再生産

() 内) 試験結果の算出法 : AUG (Area Under Growth Curve) 生長曲線下の面積により求めた結果、RATE 生長速度より求めた結果

*) : 文献2)をもとに、試験開始時の実測濃度を用いて0-72時間の毒性値を再計算したもの³⁾

文献 2)の試験では、界面活性作用のある分散剤が用いられているため、これらの毒性値の信頼性は b とした。また、同文献の藻類生長阻害試験では被験物質濃度が 20% 以上消失し、吸着による可能性が示唆されたことから、試験開始時の実測濃度を用いて毒性値を再計算した。

(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 *Pseudokirchneriella subcapitata* に対する生長阻害の速度法による 72 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 57,000 μg/L、甲殻類では *Daphnia magna* に対する遊泳阻害に対する 48 時間半数影響濃度 (EC₅₀) が 9,240 μg/L、魚類では *Oryzias latipes* に対する 96 時間半数致死濃度 (LC₅₀) が 27,700 μg/L、その他の生物ではアフリカツメガエル *Xenopus laevis*

に対する48時間半数致死濃度(LC₅₀)が13,500 µg/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9,240 µg/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92 µg/Lが得られた。

慢性毒性値については、慢性毒性値については、藻類では*Pseudokirchneriella subcapitata*に対する生長阻害の速度法による72時間無影響濃度(NOEC)が4,500 µg/L、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1,460 µg/Lであった。慢性毒性値について2生物群(藻類及び甲殻類)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、上記の毒性値のうち最も低い値(甲殻類の1,460 µg/L)にこれを適用することにより、慢性毒性値によるPNECとして15 µg/Lが得られた。

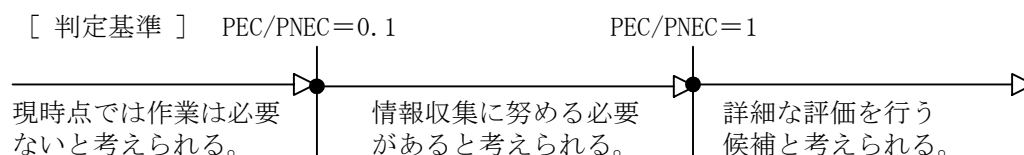
本物質のPNECとしては、甲殻類の慢性毒性値をアセスメント係数100で除した15 µg/Lを採用する。

(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

媒体		平均濃度	最大値濃度 (PEC)	PNEC	PEC/ PNEC 比
水質	公共用水域・淡水	我が国におけるデータは得られなかった	我が国におけるデータは得られなかった	15 µg/L	
	公共用水域・海水	我が国におけるデータは得られなかった	我が国におけ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。



現時点では評価に耐える十分なデータがないため、生態リスク評価の判定はできない。

本物質の生産量は1,000~10,000t程度とされているが、PRTRデータによれば排出先は全て大気であり、環境中への分配は大気中が多いと予測されている。また、本物質のPNEC値は、甲殻類の慢性毒性値から15µg/Lと求められている。したがって、本物質については環境中の存在状況を把握する必要性は低いと考えられる。

4. 引用文献等

(1) 物質に関する基本的事項

- 1) 講談社サイエンティフィック (1985) : 有機化合物辞典.
- 2) IPCS, International Chemical Safety Cards.
(<http://www.itcilo.it/actrav/actrav-english/telearn/osh/ic/3452979.htm>)
- 3) LIDE, D.R., ed. (2002-2003) *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 83rd ed., Boca Raton, London, New York, Washington DC, CRC Press, p. 3-191.
- 4) 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, p.724.
- 5) YALKOWSKY, S. H. and HE, Y., (2003) *Handbook of Aqueous Solubility Data*, Boca Raton, London, New York, Washington DC., CRC Press, p.620.
- 6) 製品評価技術基盤機構、既存化学物質安全性点検データ、1258A
- 7) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWINTM v1.91
- 8) HOWARD, P.H., BOETHLING, R.S., JARVIS, W.F., MEYLAN, W.M., and MICHALENKO, E.M. ed. (1991) *Handbook of Environmental Degradation Rates*, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers, p.xiv.
- 9) 通産省公報 (2000.3.17)
- 10) 化学工業日報社(2003) : 14303 の化学商品

(2) 暴露評価

- 1) (独) 国立環境研究所 (2004) : 平成 15 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書

(3) 生態リスクの初期評価

- 1)- : U.S.EPA 「AQUIRE」
623 : Bridie, A.L., C.J.M. Wolff, and M. Winter (1979) : The Acute Toxicity of Some Petrochemicals to Goldfish. *Water Res.* 13(7):623-626.
12152 : De Zwart, D., and W. Slooff (1987) : Toxicity of Mixtures of Heavy Metals and Petrochemicals to *Xenopus laevis*. *Bull Environ Contam Toxicol* 38 : 345-351.
- 2) 環境庁 (1997) : 平成 8 年度 生態影響試験実施事業報告
- 3) (独) 国立環境研究所 (2004) : 平成 15 年度化学物質環境リスク評価検討調査報告書