

[5] 1-デシルアルコール

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-デシルアルコール

(別の呼称： 1-デカノール)

CAS 番号： 112-30-1

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*： 1-257)

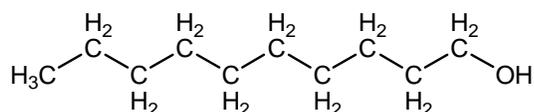
RTECS 番号： HE4375000

分子式： $C_{10}H_{22}O$

分子量： 158.28

換算係数： 1 ppm = 6.47 mg/m³ (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

本物質は無色透明の液体である¹⁾。

融点	6.9 ²⁾ 、6.4 ³⁾ 、7 ^{4),5)}
沸点	231.1 (760 mmHg) ²⁾ 、232.9 (760 mmHg) ³⁾ 、 230 (760 mmHg) ⁴⁾ 、231 ⁵⁾
密度	0.8297 g/cm ³ (20) ²⁾
蒸気圧	8.51 × 10 ⁻³ mmHg (=1.13 Pa) (25) ⁴⁾
分配係数 (1-オクタノール/水) (log Kow)	4.57 ^{2),4),6)}
解離定数 (pKa)	
水溶性 (水溶解度)	37 mg/1000g (25) ²⁾ 、37 mg/L (25) ^{4),5)}

(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							
種々の活性汚泥を用いた生分解試験において、試験期間 6、12、24 時間の BOD 分解率はそれぞれ 0.9%、9.2%、29.3%であった ⁷⁾ 。							
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 ^{8),9)}	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 ^{8),10)}	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： $15 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/(\text{分子} \cdot \text{sec})$ （AOPWIN¹¹⁾により計算）

半減期：4.2時間～42時間（OH ラジカル濃度を $3 \times 10^6 \sim 3 \times 10^5 \text{ 分子/cm}^3$ ¹²⁾と仮定し計算）

加水分解性

加水分解性の基を持たない¹³⁾。

生物濃縮性

生物濃縮係数(BCF)：66（BCFWIN¹⁴⁾により計算）

土壌吸着性

土壌吸着定数(Koc)：96（PCKOCWIN¹⁵⁾により計算）

(4) 製造輸入量及び用途

生産量・輸入量等

本物質の農薬用途による生産量の推移を表 1.1 に示す¹⁶⁾。

「化学物質の製造・輸入に関する実態調査」によると、アルコール（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¹⁷⁾。

表 1.1 生産量の推移（農薬用途）

平成(年) ^{a)}	15	16	17	18
生産量(t 又は kL)	326.9	252.8	264.7	267.1

注：a) 農薬年度

用途

本物質の主な用途はタバコの腋芽抑制剤、非農耕地用除草剤とされており¹⁸⁾、食品添加剤（香料）にも用いられている¹⁹⁾。

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²⁰⁾。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²⁰⁾。

このほか、本物質は柑橘油、アーモンドの花やアンブレットシードの精油中に含まれる²¹⁾。また、リンゴジュース、オレンジの精油から検出され、葉から放出されるとの報告がある²¹⁾。

(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:257)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	83.9	0.6	0.2	1.5
水域	10.8	98.7	2.8	26.9
土壌	5.2	0.0	97.0	71.4
底質	0.1	0.6	0.0	0.2

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	0.0054	0.039	<0.002	1.4	0.002	37/47	全国	2001	2)
公共用水域・海水 μg/L	<0.002	<0.002	<0.002	<0.002	0.002	0/3	三重県、 広島県、 愛媛県	2001	2)
底質(公共用水域・淡水) μg/g									
底質(公共用水域・海水) μg/g									

(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 1.4 $\mu\text{g/L}$ 程度、海水域では概ね 0.002 $\mu\text{g/L}$ 未満となった。

表 2.3 公共用水域濃度

水 域	平 均	最 大 値
淡 水	0.0054 $\mu\text{g/L}$ 程度(2002)	1.4 $\mu\text{g/L}$ 程度(2002)
海 水	概ね 0.002 $\mu\text{g/L}$ 未満(2002)	概ね 0.002 $\mu\text{g/L}$ 未満(2002)

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			28.5	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(RATE)	3	B ^{*3}	B ^{*3}	3) ^{*2}
			90	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	NOEC GRO(AUG)	3	B ^{*3}	B ^{*1,3}	2)
			565	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(RATE)	3	B ^{*3}	B ^{*3}	3) ^{*2}
			720	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	緑藻類	EC ₅₀ GRO(AUG)	3	B ^{*3}	B ^{*1,3}	2)
甲殻類			< 70	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	NOEC REP	21	B ^{*4}	C ^{*4}	2)
			1,350	<i>Daphnia magna</i>	オオミジンコ	EC ₅₀ IMM	2	B ^{*3}	B ^{*3}	2)
			3,100	<i>Nitocra spinipes</i>	ナミミズベソコ ミジンコ	LC ₅₀ MOR	4	C	C	1)-10870
			4,000	<i>Nitocra spinipes</i>	ナミミズベソコ ミジンコ	LC ₅₀ MOR	4	C	C	1)-5185
			5,600	<i>Americanysis bahia</i>	アミ科	LC ₅₀ MOR	2	C	C	1)-68919
魚類			2,400	<i>Pimephales promelas</i>	ファットヘッド ミノ	LC ₅₀ MOR	4	A	A	1)-15823
			2,790	<i>Oryzias latipes</i>	メダカ	LC ₅₀ MOR	4	B ^{*3}	B ^{*3}	2)
			7,200	<i>Alburnus alburnus</i>	コイ科	LC ₅₀ MOR	4	C	C	1)-5185
			7,200	<i>Alburnus alburnus</i>	コイ科	LC ₅₀ MOR	4	C	C	1)-10870
その他			8,830	<i>Tetrahymina pyriformis</i>	テトラヒメナ属	IGC ₅₀ POP	2	B	B	1)-3262
			12,600	<i>Tetrahymina pyriformis</i>	テトラヒメナ属	IGC ₅₀ POP	2	B	B	4)- 2006075

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(幾何平均値)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 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
- *4 繁殖阻害に関する NOEC において親個体が半数死亡しており、界面活性作用のある助剤も用いていたため、試験の信頼性を「B」とし、本初期評価では繁殖阻害に関する NOEC として採用しない

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。設定試験濃度は本試験において0、1.2、2.2、4.0 mg/L (公比 1.8) 追加試験において0、0.06、0.1、0.2、0.4、0.7 mg/L (公比 1.8) であった。試験溶液は、界面活性作用のある硬化ひまし油(HCO-50) 100 mg/L を助剤として調製された。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 73.6~104.8%、6.7~13.0% 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565 µg/L、72時間無影響濃度(NOEC)は28.5 µg/L であった³⁾。

2) 甲殻類

環境庁²⁾は OECD テストガイドライン No.202(1984) に準拠し、オオミジンコ *Daphnia magna* の急性遊泳阻害試験を GLP 試験として実施した。試験は半止水式(24時間換水)で行われ、設定試験濃度は0、0.53、0.95、1.71、3.09、5.56、10.0 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 Elendt M4 飼育水(硬度 253 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) 100 mg/L が用いられた。被験物質の実測濃度は、換水前において設定濃度の 62.3~90.3% 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、48時間半数影響濃度(EC₅₀)は1,350 µg/L であった。

3) 魚類

Veith ら¹⁾⁻¹⁵⁸²³ はファットヘッドミノール *Pimephales promelas* の急性毒性試験を実施した。試験は流水式で行われ、設定試験濃度区は対照区+5濃度区であった。試験用水にはスペリオール湖水(硬度 45.5 mg/L、CaCO₃換算)が用いられた。96時間半数致死濃度(LC₅₀)は2,400 µg/L であった。

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 8,830 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	565µg/L
甲殻類	<i>Daphnia magna</i>	遊泳阻害 ; 48 時間 EC ₅₀	1,350µg/L
魚類	<i>Pimephales promelas</i>	96 時間 LC ₅₀	2,400µg/L
その他	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	生長阻害 ; 48 時間 IGC ₅₀	8,830µg/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 (藻類の 565 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 5.7 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	28.5µg/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 0.29 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 0.29 µg/L を採用する。

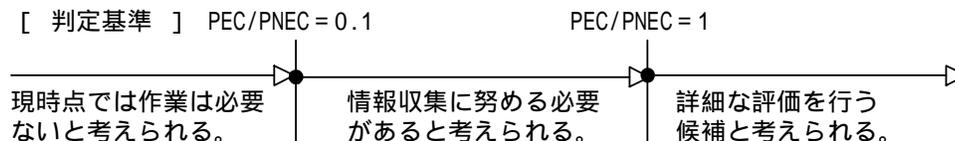
(3) 生態リスクの初期評価結果

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	0.0054 µg/L程度 (2002)	1.4 µg/L程度 (2002)	0.29 µg/L	5
公共用水域・海水	概ね0.002 µg/L未満 (2002)	概ね0.002 µg/L未満 (2002)		<0.007

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 0.0054 $\mu\text{g/L}$ 程度、海水域では概ね 0.002 $\mu\text{g/L}$ 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 1.4 $\mu\text{g/L}$ 程度、海水域では概ね 0.002 $\mu\text{g/L}$ 未満であった。

予測環境中濃度 (PEC) と予測無影響濃度 (PNEC) の比は、淡水域で 5、海水域では 0.007 未満となるため、詳細な評価を行う候補と考えられる。

本物質については、公共用水域・淡水の第 2 位地点の濃度を PEC に採用した場合、PEC / PNEC 比は一桁小さくなる。したがって、高濃度検出地点における検出原因の究明を中心に詳細な評価を行う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ック：563.
- 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) 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).
- 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: 212.
- 5) 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).
- 6) Hansch, C. et al. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book: 81.
- 7) Gerhold, R.M., Malaney, G.W.(1966): J Water Pollut Control Fed, 38:562-579. [Hazardous Substances Data Bank (<http://toxnet.nlm.nih.gov/>, 2007.3.14 現在)].
- 8) (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).
- 9) 通産省公報(1978.12.12).
- 10) 経済産業公報(2002.11.8).
- 11) U.S. Environmental Protection Agency, AOPWINTM v.1.92.
- 12) Howard, P.H. et al. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xiv.
- 13) 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/>, 2007.3.14 現在)].
- 14) U.S. Environmental Protection Agency, BCFWINTM v.2.17.
- 15) U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWINTM v.1.66.
- 16) 農林水産省消費・安全局農産安全管理課・植物防疫課監修、(社)日本植物防疫協会編集(2007)：農薬要覧-2007-；農林水産省消費・安全局農産安全管理課・植物防疫課監修、(社)日本植物防疫協会編集(2004)：農薬要覧-2004-；農林水産省生産局生産資材課・植物防疫課監修、(社)日本植物防疫協会編集(2001)：農薬要覧-2001-；農林水産省農産園芸局植物防疫課監修、(社)日本植物防疫協会編集(1999)：農薬要覧-1999-
- 17) 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)
- 18) 化学工業日報社 (2008)：15308 の化学商品.

- 19) (独) 国立医薬品食品衛生研究所 食品添加物 ADI 関連情報データベース, (http://www.nihs.go.jp/hse/food-info/food_add/index.html, 2007.12.13 現在).
- 20) 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.
- 21) Hazardous Substances Data Bank (<http://toxnet.nlm.nih.gov/>, 2007.3.14 現在).

(2) ばく露評価

- 1) U.S. Environmental Protection Agency, EPI Suite™ 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) 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.
 - 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.
 - 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.
 - 15823 : Veith, G.D., D.J. Call, and L.T. Brooke (1983): Structure-Toxicity Relationships for the Fathead Minnow, *Pimephales promelas*: Narcotic Industrial Chemicals. *Can.J.Fish.Aquat.Sci.* 40(6):743-748.
 - 68919 : Patoczka, J., and G.W. Pulliam (1990): Biodegradation and Secondary Effluent Toxicity of Ethoxylated Surfactants. *Water Res.* 24(8):965-972.
- 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
- 4) その他
 - 2006075 : Schultz, T.W., D.T. Lin, T.S. Wilke and L.M. Arnold (1990): Quantitative Structure-Activity Relationships for the *Tetrahymena pyriformis* Population Growth Endpoint: A Mechanisms of Action Approach. Practical Applications of Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) in Environmental Chemistry and Toxicology.241-262.