

化学物質安全性(ハザード)評価シート

整理番号	2001 - 43	官報公示 整理番号	2 - 217(化審法) 1 - 58(化学物質管理促進法)	CAS 番号	111 - 87 - 5
名 称	1-オクタノール 別名：1-オクチルアルコール n-オクチルアルコール		構 造 式	H ₃ C-(CH ₂) ₇ OH	
分 子 式	C ₈ H ₁₈ O		分 子 量	130.23	
<p>市場で流通している商品(代表例)¹⁾ 純 度 : 99.5%以上 不純物 : イソオクタノール 添加剤または安定剤 : 無添加</p>					
<p>1. 物理・化学的性状データ</p> <p>外 観 : 無色液体²⁾ 融 点 : -16 ~ -17 ²⁾ 沸 点 : 194 ~ 195 ³⁾ 引 火 点 : 文献なし 発 火 点 : 文献なし 爆発限界 : 文献なし 比 重 : d₄²⁰ 0.827²⁾ 蒸気密度 : 4.49(空気 = 1) 蒸気圧 : 10 Pa(0.1 mmHg)(25)²⁾ 分配係数 : log Pow ; 3.00(実測値)^{2, 4)}、2.81(計算値)⁴⁾ 加水分解性 : 加水分解を受けやすい化学結合なし 解離定数 : 文献なし スペクトル : 主要マススペクトルフラグメント m/z 41(基準ピーク, 1.0)、70(0.53)、84(0.43)⁵⁾ 吸脱着性 : 土壌吸着係数 K_{oc}; 137 ~ 983²⁾ 粒度分布 : 該当せず 溶解性 : 1-オクタノール / 水 ; 541 mg/L²⁾ アセトン、エーテルなどの有機溶媒に可溶²⁾ 換算係数 : 1 ppm = 5.42 mg/m³ (気体, 20) 1 mg/m³ = 0.185 ppm</p>					

2. 発生源・暴露レベル

製造量等：平成 10 年度 14,457 t (製造 9,307 t 輸入 5,150 t)⁶⁾

放出・暴露量：文献なし

用途：香料、化粧品、溶剤、可塑剤(DOP)原料、界面活性剤原料、加硫剤(オクチルメルカプタン)原料、金属抽出剤(トリオクチルアミン)原料¹⁾

3. 環境運命

1) 分解性

好氣的

都市下水により、100 mg/L の本物質が 28 日間で 82% (COD) 分解されたとの報告がある⁷⁾。
この他に、殆どの環境条件下で本物質は容易に分解されるとの報告がある²⁾。

参考 被験物質：2-オクタノール

良分解⁸⁾ (化審法)

試験期間	被験物質	活性汚泥
2 週間	100 mg/L	30 mg/L
BOD から算出した分解度		
76%		

嫌氣的

嫌氣性活性汚泥により、49～56 日間で 75% が分解されたとの報告がある(試料濃度等の記載なし)²⁾。

非生物的

OH ラジカルとの反応性

対流圏大気中では、速度定数 = $1.44 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{分子} \cdot \text{sec}$ (25)⁹⁾、OH ラジカル濃度を $5 \times 10^5 \sim 1 \times 10^6 \text{ 分子}/\text{cm}^3$ とした時の半減期は 0.6～1 日間と計算される。

2) 濃縮性

報告なし。

3) 環境分布・モニタリングデータ¹⁰⁾

実施年度(昭)	検出例と検出範囲			
	水質 ppb	底質 ppm	魚類 ppm	その他
	B/A 検出範囲 (検出限界)	B/A 検出範囲 (検出限界)	B/A 検出範囲 (検出限界)	B/A 検出範囲 (検出限界)
54	0/27 - (5～50)	0/27 - (0.3～1)	調査データなし	調査データなし

B/A は検出数 / 検体数を表す。

4. 生態毒性データ

分類	生物名	LC ₅₀ (mg/L) (暴露時間)	EC ₅₀ (mg/L) (暴露時間) : 影響指標	毒性区分* ¹¹⁾
藻類	<i>Scenedesmus subspicatus</i> ¹²⁾ (セネデスムス)		6.5(48-h) : 増殖阻害	急性カテゴリー2に相当(暴露時間が異なる)
甲殻類	<i>Daphnia magna</i> ¹³⁾ (オオミジンコ) <i>Daphnia magna</i> ¹²⁾ (オオミジンコ)		26(24-h) : 遊泳阻害 1.0(21-d) : 繁殖 NOEC	急性カテゴリー3に相当(暴露時間が異なる)
魚類	<i>Pimephales promelas</i> ¹²⁾ (ファットヘッドミノー) <i>Oryzias latipes</i> ¹²⁾ (メダカ) <i>Oncorhynchus mykiss</i> ^{12, 13)} (ニジマス)	12.2(96-h) 16.5(48-h) 17.7(96-h)		急性カテゴリー3に相当 急性カテゴリー3に相当 急性カテゴリー3に相当

* : OECD 分類基準に基づく区分

5. ほ乳動物毒性データ

1) 急性毒性¹⁴⁾

	マウス	ラット	モルモット
経口 LD ₅₀	1,790 mg/kg	3,200 mg/kg	-
吸入 LC ₅₀	-	-	-
経皮 LD ₅₀	-	-	> 1,000 mg/kg
静脈内 LD ₅₀	69 mg/kg	-	-

ラットに本物質 550 mg/kg を腹腔内投与した実験で、体温低下がみられている¹⁵⁾。

2) 刺激性・腐食性

ウサギの皮膚に本物質 500 mg を 24 時間適用した実験で、中等度の刺激性を示す^{14, 16, 17)}。

3) 感作性

報告なし。

4) 反復投与毒性

報告なし。

5) 変異原性・遺伝毒性

試験方法		試験条件	結果*
<i>in vitro</i>	染色体異常試験	チャイニーズハムスターV79 細胞 8 × 10 ⁻⁴ M S9(-) ¹⁸⁾ 、数的異常	+
<i>in vivo</i>	染色体異常試験	ラット/骨髄細胞 ¹⁶⁾	+
	小核試験	ラット/骨髄細胞 ¹⁶⁾	+

* + : 陽性

6) 発がん性

報告なし。

7) 生殖・発生毒性

(1) 経口投与

Wistar ラットに本物質 130、650、975、1,300 mg/kg/day を妊娠 6-15 日に強制経口投与した実験で、母動物において 130 mg/kg/day 以上で用量依存的に流涎、立毛、鼻漏等の一般状態の変化がみられ、650 mg/kg/day 以上で死亡がみられたが、胎児に影響はみられていない¹⁷⁾。

(2) 吸入暴露

SD ラットを本物質 73.8 ppm(400 mg/m³) に 7 時間/日で妊娠 1-19 日に吸入暴露した実験で、母動物、胎児に毒性影響はみられていない^{2, 19)}。

6. ヒトへの影響

1) 急性影響

報告なし。

2) 慢性影響

報告なし。

3) 発がん性^{20, 21, 22)}

機 関	分 類	基 準
EPA	-	1999 年現在発がん性について評価されていない。
EU	-	1999 年現在発がん性について評価されていない。
NTP	/	1999 年現在発がん性について評価されていない。
IARC	-	1999 年現在発がん性について評価されていない。
ACGIH	-	2000 年現在発がん性について評価されていない。
日本産業衛生学会	-	2001 年現在発がん性について評価されていない。

ヒトでの発がん性に関する報告はない。

4) 許容濃度^{21, 22)}

機関名	許容濃度	経皮吸収性
ACGIH(2000)	記載なし	-
日本産業衛生学会(2001)	記載なし	-

7. 生体内運命
報告なし。

8. 分類(OECD 分類基準)

区分	分類* ¹¹⁾
急性毒性	カテゴリ-4(経口のデータによる)
水圏生態毒性	急性カテゴリ-2(藻類のデータによる)

* 本調査範囲内のデータを適用した場合の分類であり、最終的なものではない。
 急性毒性分類：OECD の急性毒性分類カテゴリに基づき、より強い毒性を示す経路での値を用いて分類
 水圏生態毒性分類：OECD の急性毒性分類カテゴリに基づき、最も強い毒性を示す水圏環境生物種での値を用いて分類

9. 総合評価

1) 危険有害性の要約

ヒトに関する報告はない。実験動物では、急性毒性は弱く、皮膚への中等度の刺激性がみられている。感作性、反復投与毒性に関する報告はない。変異原性・遺伝毒性の報告も少なく、*in vitro* の染色体異常試験、*in vivo* の染色体異常試験及び小核試験のいずれにおいても陽性の結果が報告されているが、発がん性に関する報告はない。生殖・発生毒性試験において、母動物で死亡がみられる用量においても、胎児(及び催奇形性)毒性は認められていない。つまり、感作性、反復投与毒性、発がん性など有害性を評価する上で、十分なデータがあるとは言えない。

本物質は環境中に放出された場合、水圏では生分解されやすい。大気中ではOH ラジカルとの反応が関与しており、半減期は1日以内と計算される。環境省のモニタリングでは検出されたことがない。水圏環境生物に対する急性毒性は、藻類に対しては強い。

2) 指摘事項

- (1) 変異原性試験において陽性の報告がある他は、有害性を評価する上で、十分なデータがあるとは言えない。
- (2) 化学物質管理促進法の第一種指定化学物質に指定されており、排出量の管理が必要である。

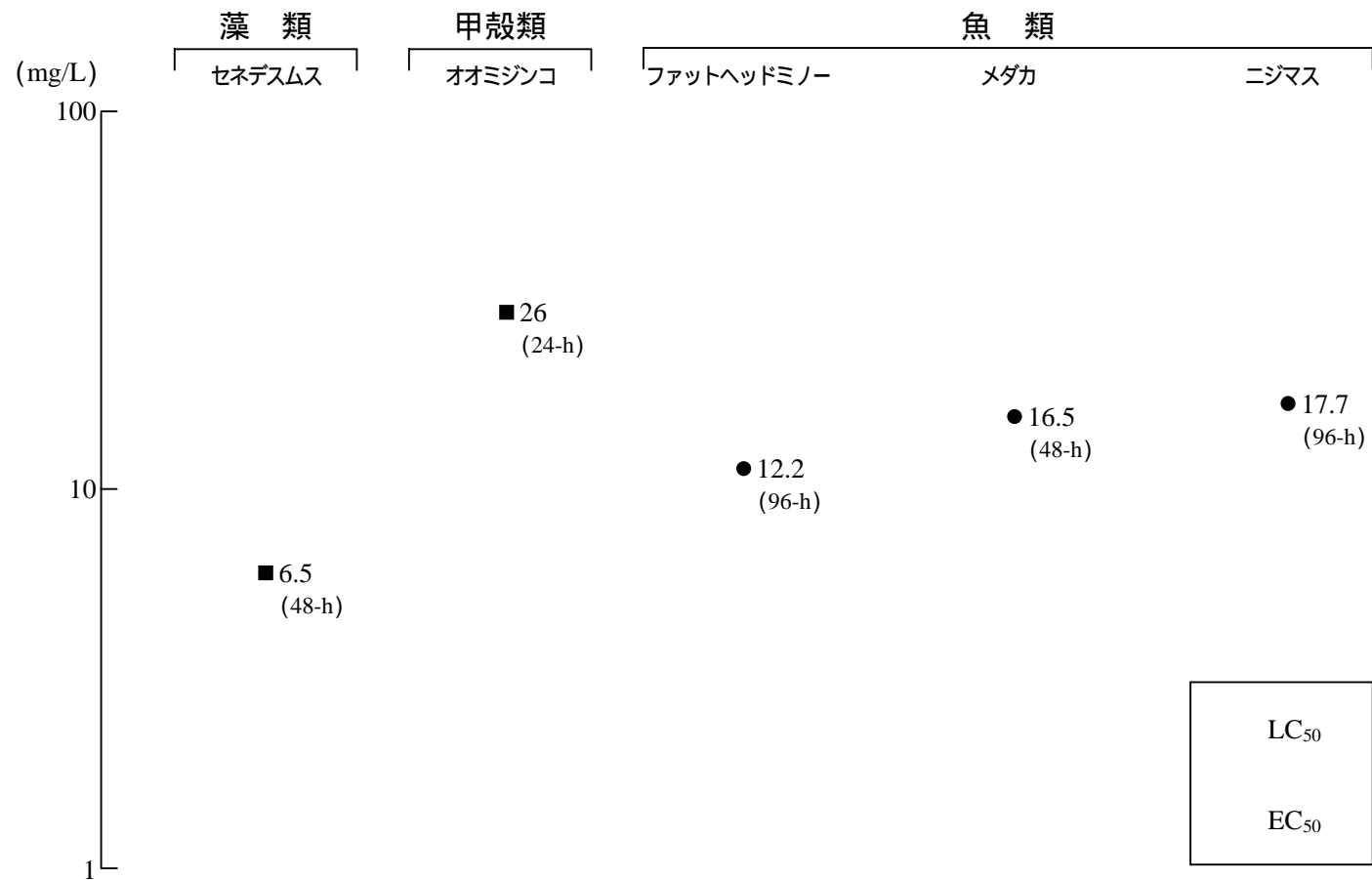
参考資料

- 1) (社)日本化学工業協会調査資料(2001).
- 2) Hazardous Substances Data Bank(HSDB), U.S. National Library of Medicine(2001).
- 3) ChemFinder, <http://chemfinder.cambridgesoft.com/>(2001).
- 4) KowWin ver 1.66, Syracuse Research Corporation(2001).
- 5) NIST Library of 54K Compounds.
- 6) 平成 10 年度 既存化学物質の製造・輸入量に関する実態調査, 通商産業省(1999).
- 7) Karel Verschueren, Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th.Ed., Van Nostrand Reinhold Co.(2001).
- 8) (財)化学品検査協会, 化審法の既存化学物質安全性点検データ(2000).
- 9) AOPWIN ver1.86, Syracuse Research Corporation(2001).
- 10) 環境省環境保健部環境安全課監修, 化学物質と環境(2001).
- 11) OECD, Harmonised integrated Classification System for Human Health and Environmental Hazards of Chemical Substances and Mixtures. OECD Series on Testing and Assessment No. 33(2001).
- 12) AQUIRE(US EPA, ECOTOX Database System).
- 13) IUCLID(International Uniform Chemical Information Data Base)Data Set, EU(2000).
- 14) US NIOSH, Registry of Toxic Effects of Chemical Substances(RTECS)(2001).
- 15) M.A. Bleyman, Peer reviewed Curr Alcohol, **7**, 115(1979).
- 16) S. Gangolli, The Dictionary of Substances and their Effects, 2nd. Ed., The Royal Society of Chemistry(1999).
- 17) J. Hellwig, Food and Chemical Toxicology, **35**, 489-500(1997).
- 18) O. Agneta, Mutation Research, **182**, 135-154(1987).
- 19) B. K. Nelson, Journal of American College of Toxicology, **9**, 93-97(1990).
- 20) JETOC, 発がん性物質の分類とその基準, 発がん性評価物質一覧表, 第 4 版(1999).
- 21) ACGIH, Booklet of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices(2000).
- 22) 許容濃度等の勧告, 産業衛生学雑誌, **43** 95-119(2001).

別添資料

- 1) 生態毒性図

生態毒性図



引用文献

- 1) AQUIRE (US EPA, ECOTOX Database System)
- 2) IUCLID (International Uniform Chemical Information Data Base) Data Set, EU (2000).