

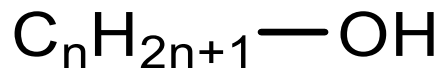
1
2
3
4 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

5 生態影響に係る評価Ⅱ

6 物理化学的性状等の詳細資料

7
8
9 アルカノール（C=10～16）（C=1
10 1～14のいずれかを含むものに限る。）

11
12 優先評価化学物質通し番号 171



16 n=10～16（11～14のいずれかを含むものに限る。）

17
18
19
20
21
22
23
24
25 令和3年2月

26
27 経済産業省

29	1 評価対象物質の性状	1
30	1-1 評価対象物質の設定	1
31	1-2 物理化学的性状及び濃縮性	2
32	1-3 分解性	5
33	2 【付属資料】	7
34	2-1 物理化学的性状等一覧	7
35	2-2 その他	7
36		
37		

38 1 評価対象物質の性状

39 本章では、モデル推計に用いる物理化学的性状データ、環境中における分解性に係るデー
40 タを示す。

41

42 1-1 評価対象物質の設定

43 評価対象の優先評価化学物質通し番号 171 のアルカノール (C = 10 ~ 16) (C = 11
44 ~ 14 のいずれかを含むものに限る。) (以下「アルカノール」という) については混合物で
45 あり、該当する物質は多数存在する。

46 OECD(1992)、OECD(2006)から得られた各 CAS 登録番号に対応するアルカノールのアルキ
47 ル鎖長分布 (表 1-1: 化審法における届出 (平成 26 年度実績) のあった CAS 登録番号のみ
48 を記載。) を参考にしつつ、化審法の届出における製造・輸入数量の割合の観点から、平成 26
49 年度実績の化審法届出情報の中で製造・輸入数量の最も多い物質であり、かつ、評価 I にお
50 いても代表物質としたドデカン-1-オール(CAS 登録番号: 112-53-8)を評価対象物質とす
51 る。

52

表 1-1 各 CAS 登録番号に対応するアルコールのアルキル鎖長の分布

No	CAS 登録番号	CHEMICAL NAME (名称)	構造※	鎖長範囲※	Even(偶数)/Odd(奇数)※	主成分が占める割合※						評価 I での代表物質	PRTR 対象物質	
						C ₁₀	C ₁₁	C ₁₂	C ₁₃	C ₁₄	C ₁₅			C ₁₆
1	112-53-8	1-Dodecanol (ドデカン-1-オール)	100% Linear	C12-C16	Even			40~99%					○	○
2	112-72-1	1-Tetradecanol (テトラデカン-1-オール)	100% Linear	C12-C16	Even					>95%				
3	27458-92-0	Isotridecanol (イソトリデカノール)												
4	740817-83-8	Alcohols, C12-13-branched and linear												
5	80206-82-2	Alcohols, C12-14	100% Linear	C6-C18	Even			C12+C14 >90-95%				<10%		
6	75782-86-4	Alcohols, C12-13	>80% Linear	C11-C15	Even & odd			>95%						
7	CAS不明													
8	75782-87-5	Alcohols, C14-15	>80% Linear	C12-17	Even & odd					>95%				
9	67762-41-8	Alcohols, C10-16	5-100% Linear	C8-18	Even or Even & odd									
10	63393-82-8	Alcohols, C12-15	>40% Linear	C10-C17	Even & odd			>95%						
11	128973-77-3	Undecanol, branched and linear												
12	112-42-5	1-Undecanol (ウンデカン-1-オール)	>80% Linear	C9-C14	Even & odd		>95%							
13	68526-86-3	Alcohols, C11-14-iso-, C13-rich												
14	68855-56-1	Alcohols, C12-16	40-100% Linear	C8-C18	Even or Even & odd			>95%						
15	68155-00-0	Alcohols, C14-18 and C16-18-unsatd.	Linearity unspecified	C14-C18	Even									
16	68526-85-2	Alcohols, C9-11-iso-, C10-rich												
17	3913-02-8	1-Octanol, 2-butyl-												
18	112-70-9	1-Tridecanol (トリデシルアルコール)	>80% Linear	C12-14	Even & odd			<10%	>90%					
19	19780-79-1	1-Octanol, 2-hexyl- (2-ヘキシルオクタ-1-オール)												
20	21078-81-9	1-Decanol, 2-butyl- (2-ブチルデカン-1-オール)												
		合計												

※ 出典: OECD(1992)、OECD(2006)。なお、5%未満の成分はここでは省略した。また、「偶数」および「奇数」は、存在する炭素鎖長を指す。空欄の箇所については、出典に記載がなかった。

54
55

56 1-2 物理化学的性状及び濃縮性

57 モデル推計に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を表 1-2 に示す。なお、表中の
58 下線部は、評価 II において精査した結果、評価 I から変更した値を示している。

59
60

表 1-2 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ※

項目	単位	採用値	詳細	評価 I で用いた値(参考)
分子量	—	186.33	—	186.33
融点	°C	24 ¹⁻⁶⁾	測定値	24 ¹⁻⁶⁾
沸点	°C	259 ¹⁻⁴⁾	標準圧力での測定値	259 ¹⁻⁴⁾
蒸気圧	Pa	0.08 ^{5,6)}	25°Cでの測定値を 20°Cに補正した値	0.08 ^{5,6)}

水に対する溶解度	mg/L	3.73 ^{2,5,-7)}	25℃での測定値を 20℃に補正した値	3.73 ^{2,5,-7)}
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	5.4 ⁸⁾	測定値	5.4 ⁸⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	2.25 ^{2,5,6)}	25℃での測定値	2.25 ^{2,5,6)}
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	<u>17,980</u> ⁸⁾	測定値	3,166 ⁹⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	71.72 ⁹⁾	logPow を使用し推計した値	71.72 ⁹⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	10	logPow と BCF から設定 ¹⁰⁾	10
解離定数(pKa)	—	—	標準的な環境中において、解離することが考えにくい ^{8,11)}	— ¹²⁾

61 ※ 平成 28 年度第 3 回化審法のリスク評価等に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議
62 (平成 29 年 3 月 2 日) で了承された値

- | | |
|---------------|---------------------------|
| 1) CCD | 7) CRC |
| 2) HSDB | 8) ECHA |
| 3) Merck | 9) EPI Suite |
| 4) OECD(1992) | 10) MHLW, METI, MOE(2014) |
| 5) PhysProp | 11) OECD(2006) |
| 6) USHPV | 12) 評価 I において解離定数は考慮しない |

63
64 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

65 ①融点

66 評価 I で採用した値は、CCD、HSDB、Merck、PhysProp、OECD(1992)、USHPV に記載され
67 た測定値である。評価 II においてもこの値 (24℃) を用いる。

68
69 ②沸点

70 評価 I で採用した値は、CCD、HSDB、Merck、OECD(1992)に記載された標準圧力(760 mmHg)
71 での測定値(259℃)である。評価 II においてもこの値 (259℃) を用いる。

72
73 ③蒸気圧

74 評価 I で採用した値は、HSDB、PhysProp、USHPV に記載された 25℃での測定値 (0.11 Pa)
75 を 20℃に補正したもの (0.08 Pa) である。評価 II においてもこの値(0.08 Pa) を用いる。

76
77 ④水に対する溶解度

78 評価 I で採用した値は、CRC、HSDB、PhysProp、USHPV に記載された 25℃での測定値 (4
79 mg/L) を 20℃に補正したもの (3.73 mg/L) である。評価 II においてもこの値 (3.73 mg/L) を用
80 いる。

81
82 ⑤logPow

83 評価 I で採用した値は、ECHA に記載された測定値(5.4)である。評価 II においてもこの値
84 (5.4) を用いる。

85
86 ⑥ヘンリー係数

87 評価 I で採用した値は、HSDB、PhysProp、USHPV に記載された 25℃における測定値である。
88 評価 II においてもこの値 (2.25 Pa・m³/mol) を用いる。

89
90 ⑦Koc

91 評価 I で採用した値は、logPow の値 (5.4) を用いて EPI Suite の KOCWIN で推計した値(3,166

92 L/kg)である。ECHA 及び OECD (2006) では実測値(17,980 L/kg) が得られた。測定法が ¹⁴C を
93 用いた高感度な方法を採用し、試験濃度を 4 パターン(25,50,100,200 μ g/L)で測定していること、
94 バッチ法を用いて吸着平衡時間を確認していること、汚泥への吸着以外の吸着 (ろ紙) の補正
95 を行っていること及び他に測定値がないことから、評価Ⅱにおいては(17,980 L/kg) を用いる。
96

97 ⑧BCF

98 評価Ⅰで採用した値は、logPow の値 (5.4) を用いて EPI Suite の BCFBAFWIN で推計した値
99 (71.72 L/kg) である。評価Ⅱにおいても同じ値 (71.72 L/kg) を用いる。
100

101 ⑨BMF

102 評価Ⅰで採用した値は、logPow (5.4) 及び BCF (71.72 L/kg) から化審法における優先評価化
103 学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。) に従って設
104 定したものである。BMF の測定値は得られなかったため、評価Ⅱでも同様に logPow (5.4) 及
105 び BCF (71.72 L/kg)から技術ガイダンスに従って設定した値 (10) を用いる。
106

107 ⑩解離定数(pKa)

108 評価Ⅰにおいて解離定数は考慮しない。ECHA では当該物質の pKa が 15.76 との記載があり、
109 環境中では非解離と考えられる。また、OECD(2006)では、「長鎖脂肪族アルコールは極めて弱
110 い酸であり、強塩基性条件下 (pH>約 16) でのみ解離する。環境に関連して通常考えられる pH
111 範囲 (pH4~9) では、これらの物質は非イオン化される」とあることから、本物質については解
112 離性を考慮しないこととする。
113

114 1-3 分解性

115 表 1-3 にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

116

117

表 1-3 分解に係るデータのまとめ¹⁾

項目		半減期 (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	OH ラジカルとの反応	0.89 ドデカン-1-オールの反応速度定数の推計値から OH ラジカル濃度 5×10^5 molecule/cm ³ として算出 ²⁾ 。
		オゾンとの反応	NA
		硝酸ラジカルとの反応	NA
水中	水中における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	5 類似化学物質の分解度試験結果から得られた判定結果(良分解性)を基に設定 ^{3,4)}
		加水分解	- 加水分解の基を持たない ²⁾
		光分解	NA
土壌	土壌における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	5 水中生分解の項参照 ^{3,4)}
		加水分解	- 水中加水分解の項参照 ⁴⁾
底質	底質における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	20 水中生分解半減期の4倍と仮定 ⁴⁾
		加水分解	- 水中加水分解の項参照 ⁴⁾

118 1) 平成 28 年度第 3 回化審法のリスク評価等に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議
119 (平成 29 年 3 月 2 日) で了承された値

120 2) HSDB

121 3) MHLW, METI, MOE(2012)

122 4) MHLW, METI, MOE(2014)

123 NA:情報が得られなかったことを示す

124

125 上記分解項目について、精査概要を以下に示す。なお、「総括分解半減期」とは、分解の機序
126 を区別しない環境媒体ごとのトータルの半減期のことを示す。

127

128 ①大気

129 大気中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期について
130 も、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応に関する情報は得られなかった。

131 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

132 半減期算出に採用した反応速度定数データは HSDB から得られた 25°Cにおける推計値で、
133 その結果は約 21 時間との記載がある。評価Ⅱにおいては、半減期として(21 時間=0.89 日)を用
134 いる。

135

136 ②水中

137 水中での総括分解半減期及び機序別の光分解に関する情報は得られなかったが、生分解と加
138 水分解の機序別の半減期に関する情報が得られた。

139 ②-1 生分解の半減期

140 水中での生分解半減期に関するデータは得られなかったが、類似物質として同じ官報公示番

141 号(2-217)である物質(2-エチルヘキサノール、トリデシルアルコール等)の分解度試験の
142 結果が得られ、それらはすべて良分解性と判定されており、その結果を踏まえて本物質も良分
143 解との判定がされている。技術ガイダンスに従うと生分解半減期は5日となる。評価Ⅱにおい
144 てはこの値(5日)を用いる。なお、REACH登録情報においては、OECD TG 301Dの結果として
145 分解度79%が得られており、OECD TG 301Bの結果として50%、66%、69%、71%の4つが得ら
146 れている。

147 ②-2 加水分解の半減期

148 HSDBでは、本物質は加水分解性の基を持たないとの記載があるため、評価Ⅱでは加水分解
149 しないとする。

150

151 ③土壌

152 土壌中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期に関する
153 情報も得られなかった。

154 ③-1 生分解の半減期

155 半減期に関するデータは得られなかったため、評価Ⅱにおいては技術ガイダンスに従って、
156 土壌中での生分解半減期を水中の生分解半減期と同じ値(5日)を用いる。

157 ③-2 加水分解の半減期

158 HSDBでは、本物質は加水分解性の基を持たないとの記載があるため、評価Ⅱでは加水分解
159 しないとする。

160

161 ④底質

162 底質中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期に関する
163 情報も得られなかった。

164 ④-1 生分解の半減期

165 半減期に関するデータは得られなかったため、評価Ⅱにおいては技術ガイダンスに従って、
166 底質中での生分解半減期を水中の生分解半減期の4倍である20日とする。

167 ④-2 加水分解の半減期

168 HSDBでは、本物質は加水分解性の基を持たないとの記載があるため、評価Ⅱでは加水分解
169 しないとする。

170

171 **2 【付属資料】**

172 **2-1 物理化学的性状等一覧**

173 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

174

175 出典)

176 CCD(2007): Richard J. Lewis Sr., Gessner Goodrich Hawley. Hawley's Condensed Chemical
177 Dictionary. 15th ed., 2007.

178 CRC Handbook of Chemistry and Physics, CRC-Press.

179 ECHA: ECHA. Information on Chemicals – Registered substances. [https://echa.europa.eu/information-](https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances)
180 [on-chemicals/registered-substances](https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances), (2017-01-23 閲覧).

181 EPI Suite(2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11, 2012.

182 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. [http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB)
183 [bin/sis/htmlgen?HSDB](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB), (2017-01-23 閲覧).

184 IUCLID(2000): EU ECB. IUCLID Dataset, 1-Dodecanol. 2000.

185 Merck(2006): The Merck Index. 14th ed.

186 MHLW, METI, MOE(2012): 平成 24 年度第 4 回薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全
187 対策部会化学物質調査会 化学物質審議会第 118 回審査部会 第 125 回中央環境審議会環境保
188 健部会化学物質審査小委員会、「ドデカン-1-オール」の良分解性の判断結果(公表日:2012-
189 07-27)

190 MHLW, METI, MOE(2014): 化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイド
191 ンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

192 OECD(1992): OECD. SIDS Initial Assessment Report, 1-DODECANOL. 1992.

193 OECD(2006): OECD. SIDS Initial Assessment Report For SIAM 22, Long Chain Alcohols (C6-22
194 primary aliphatic alcohols). 2006

195 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-01-23 閲覧).

196

197 **2-2 その他**

198 特になし。

情報源略称	詳細等
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
CCD	Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 16th, John Wiley & Sons
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics, 97th, CRC-Press
ECHA	Information on Chemicals - Registered substances.
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUCLID	EU ECB International Uniform Chemical Information Database
Merck	The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SIDS	OECD: SIDSレポート
USHPV	US/HPVチャレンジプログラム
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果

基本情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	融点	22~26 °C	24							2B	×			p.1171
2 CCD	融点	24 °C	24							2B	○			
3 CRC	融点	24.2 ° C[24.2(0.3)]	24.2					-		2B	×			Physical Constants of Organic Compounds
4	融点	23.9 °C	23.9					-		2B	×			Enthalpy of Fusion
5	融点	24.2 °C	24.2					-		2B	×			Laboratory Solvents and Other Liquid Reagents
6 EPI Suite	融点	29.19 °C	29.19	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
7	融点	29.19 °C	29.19	MPBPWIN				(Q)SAR	Mean Value	2C	×			
8 HSDB	融点	24 °C	24					-		2B	○		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 599	Chemical/Physical Properties: > Melting Point:
9 IUCLID	融点	19~23 °C	21							4A	×			p.10
10	融点	23 °C	23							4A	×			p.10
11	融点	23.7~23.9 °C	23.8							4A	×			p.10
12	融点	23.8 °C	23.8							4A	×			p.10
13	融点	24 °C	24							4A	×			p.10
14	融点	26 °C	26							4A	×			p.10
15 Merck	融点	24 °C	24					-		2B	○			
16 PhysProp	融点	24 °C	24					-		2B	○			Melting Pt
17 ECHA	流動点	24 °C	24	その他,other guideline: ASTM-D97 Standard Test Method for Pour Point of Petroleum Products	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		study report/2009	Exp Key Melting point/freezing point.001
18 SIDS	融点	24 °C	24	その他,Method not stated.	その他,YES [?]		-	-		2B	○		Windholz, M., (edit.), The Merck Index, (An Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals), Merck & Co., Inc., Rahway ,N.J., U.S.A., 1983, p. 496.	SIDS Dossier p.9
19 USHPV	融点	24 °C	24					experimental result		2B	○			p.11

基本情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPaにおける 沸点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	260~262 °C	261	261	760 mmHg					-		2B	×			p.1171
2 CCD	259 °C	259	259	760 mmHg					-		2B	○			
3 CRC	264.1 °C[264.1(0.3)]	264.1	264.1	101.325 kPa[760 mmHg]					-		2B	×			Physical Constants of Organic Compounds
4	537.2 K[537.2(0.3)]	264.05	537.2	101.325 kPa[1 atmospheric]					-		2B	×		Rosenthal, D. J., and Teja, A. S., Ind. Eng. Chem. Res. 28, 1693, 1989.	Critical Constants of Organic Compounds
5	260 °C	260	260	101.325 kPa[760 mmHg]					-		2B	×			Enthalpy of Vaporization
6	264.1 °C	264.1	264.1	760 mmHg					-		2B	×			Laboratory Solvents and Other Liquid Reagents
7	259 °C	259	259	101.325 kPa					-		2B	×			Flammability of Chemical Substances
8 EPI Suite	272.96 °C	272.96			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
9	272.96 °C	272.96			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method	2C	×			
10 HSDB	259 °C	259	259	760 mmHg					-		2B	○		Lide, D.R., G.W.A. Milne (eds.). Handbook of Data on Organic Compounds. Volume I. 3rd ed. CRC Press, Inc. Boca Raton, FL. 1994., p. V3: 2551	Chemical/Physical Properties: > Boiling Point:
11	235.7 °C	235.7	257.68051	400 mmHg					-		2B	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 599	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
12	213 °C	213	245.66659	200 mmHg					-		2B	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 599	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
13	192 °C	192	228.83685	100 mmHg					-		2B	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 599	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
14	177.8 °C	177.8	215.67668	60 mmHg					-		2B	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 599	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:

基本情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPaにおける 沸点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
15	167.2 °C	167.2	205.24311	40 mmHg					-		2B	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 599	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
16	150 °C	150	187.57263	20 mmHg					-		2B	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 599	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
17	134.7 °C	134.7	171.40348	10 mmHg					-		2B	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 599	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
18	120.2 °C	120.2	155.83458	5 mmHg					-		2B	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 599	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
19	91.0 °C	91	124.16405	1 mmHg					-		2B	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 599	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
20	IUCLID	255~265 °C	260	260.012	1013 hPa				-		4A	×			p.10
21		250~270 °C	260	260.012	1013 hPa				-		4A	×			p.10
22		259 °C	259	259.01197	1013 hPa				-		4A	×			p.10
23		260 °C	260	260.012	1013 hPa				-		4A	×			p.11
24		264.6 °C	264.6	264.6121	1013 hPa				-		4A	×			p.11
25	Merck	259 °C	259	259	760 mmHg				-		2B	○			
26		213 °C	213	245.66659	200 mmHg				-		2B	×			
27		192 °C	192	228.83685	100 mmHg				-		2B	×			
28		177.8 °C	177.8	215.67688	60 mmHg				-		2B	×			
29		167.2 °C	167.2	205.24311	40 mmHg				-		2B	×			
30		150 °C	150	187.57263	20 mmHg				-		2B	×			
31		134.7 °C	134.7	171.40348	10 mmHg				-		2B	×			
32		120.2 °C	120.2	155.83458	5 mmHg				-		2B	×			
33		91 °C	91	124.16405	1 mmHg				-		2B	×			
34	PhysProp	259 °C	259						-		4A	×			Boiling Pt

基本情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

沸点

収集データ

	情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPaにおける 沸点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
35	ECHA	229 °C	229	270.21421	1013 hPa	その他,other guideline: ASTM-D1120 Standard Test Method for Boiling Point of Engine Coolants	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		study report/2009	Exp Key Boiling point.001
36	SIDS	259 °C	259	259.01197	101.3 kPa[760 mm Hg = 101.3 kPa]	その 他,Method not stated.	その 他,YES [?]		-	-		2B	○		Windholz, M., (edit.), The Merck Index, p. 496.	SIDS Dossier p.9
37	USHPV	259 °C	259							experimental result		4A	×			p.11

基本情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20℃における蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ)	キースタディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	0.1 mmHg	13.332237	13.332237	20 °C					-		2B	×			p.1171
2 CRC	1 kPa	1000	3.3202597	133 °C					外挿(補外)	Indicates an extrapolation beyond the region where experimental measurements exist	4C	×		Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994.	Vapor Pressure
3	10 kPa	10000	6.184273	185.0 °C					-		4A	×		Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994.	Vapor Pressure
4	100 kPa	100000	8.9526392	264.1 °C					-		4A	×		Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994.	Vapor Pressure
5	1.6E-05 kPa[1.6・10 ⁻⁵]	0.016	1.13E-02	25 °C					-		2B	×			Laboratory Solvents and Other Liquid Reagents
6 HSDB	8.48E-4 mmHg	0.1130574	8.01E-02	25 °C					-		2B	○		Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989.	Chemical/Physical Properties: > Vapor Pressure:
7 IUCLID	0.00022 hPa	0.022	0.022	20 °C	その他,extrapoliert anhand Antoine-Gleichung				外挿(補外)		4C	×			p.11
8	0.0087 hPa	0.87	0.87	20 °C	その他,extrapoliert anhand Clausius-Clapeyronsche r Gleichung				外挿(補外)		4C	×			p.11
9	0.024 hPa	2.4	2.4	20 °C							4A	×			p.11
10	1.33 hPa	133	2.4362463	91 °C							4A	×			p.12
11 PhysProp	0.000848 mmHg	0.1130574	8.01E-02	25 °C					experimental result		2B	○		DAUBERT,TE & DANNER,RP (1989)	Vapor Pressure
12 ECHA	0.038 mbar	3.8	1.1597611	38 °C[temperature measured: 100 °F]	その他,other guideline: ASTM D 2879	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		study report/2009	Exp Key Vapour pressure.001

基本情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

蒸気圧

収集データ

	情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおけ る蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
13	SIDS	<0.0013 kPa[<0.00 13 kPa at 24C (= ca. 0.01 mmHg)]	1.3	0.986303	24 °C	その他,Method not stated.	その 他,YES [?]		-	-		2B	×		U.S. Environmental Protection Agency, OHMTADS, 1987 ed., Accession number ACC 7216699.	SIDS Dossier p.9-10
14	USHPV	8.48E-4 mmHg	0.1130574	8.01E-02	25 °C					experiment al result		2B	○			p.11

基本情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 CCD	[Insoluble in water]	単位換算不可								-		3	×			
2 CRC	[insoluble]	単位換算不可								-		3	×			Physical Constants of Organic Compounds
3 CRC	0.004 g/kg		4 3.73402575	25 °C						-		2B	○		Solubility Data Series, International Union of Pure and Applied Chemistry, Vol. 15, Pergamon Press, Oxford, 1982	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
4 HSDB	4 mg/L		4 3.73402575	25 °C						-		2B	○		Barton, AFM; Alcohols With Water. International Union of Pure and Applied Chemistry. Solubility Data Series, Vol.15, p. 413 (1984)	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
5 IUCLID	1.69 mg/L	1.69	1.78869769	16 °C		その他, ueber radioaktive Markierung				experimental result		4A	×			p.12
6	1.9 mg/L	1.9	1.77366223	25 °C		その他, GC				experimental result		4A	×			p.12
7	2.7 mg/L	2.7	2.52046738	25 °C						estimated by calculation		4C	×			p.13
8	2.9 mg/L	2.9	2.70716867	25 °C		その他, keine weiteren Angaben				experimental result		4A	×			p.13
9	3 mg/L	3	2.80051931	25 °C						estimated by calculation		4C	×			p.13
10	4.28 mg/L	4.28	3.99540755	25 °C		その他, ueber Oberflaechenspannung				experimental result		4A	×			p.13
11	20 mg/L	20	18.6701288	25 °C						estimated by calculation		4C	×			p.13
12	2.9 mg/L	2.9	2.40534956	34 °C		その他, ueber radioaktive Markierung				experimental result		4A	×			p.13
13 Merck	[Insol in water.]	単位換算不可								-		3	×			
14 PhysProp	4 mg/L		4 3.73402575	25 °C						experimental result		2B	○		BARTON,AFM (1984)	Water Solubility
15 ECHA	1 mg/L	1	0.95928865	23 °C		その他, other guideline: ASTM E 1148	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		study report./2009	Exp Key Water solubility.001

基本情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
16 SIDS	1.9 mg/L	1.9	1.77366223	25 °C		その他,Chemical added to water in a 25 ± 1 °C water bath and shaken until constant concentration. Samples of saturated water centrifuged for 30 min			その他,YES [?]	experimental result		2B	×		Veith, G., "Structure-Toxicity Relationships for the Fathead Minnow, Pimphales promelas: Narcotic Industrial Chemicals," Can. J. Fish Aquat. Sci., vol. 40, 1983, pp. 743-758.	SIDS Dossier p.10
17 USHPV	4 mg/L	4	3.73402575	25 °C						experimental result		2B	○			p.11

基本情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 CRC	5.13	5.13	25 °C						-		2B	×		Sangster, J., J. Phys. Chem. Ref. Data, 18, 1111, 1989.	Octanol-Water Partition Coefficients
2 EPI Suite	4.7698	4.7698			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
3 HSDB	5.13	5.13							-		2B	×		Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995., p. 107	Chemical/Physical Properties: > Octanol/Water Partition Coefficient:
4 IUCLID	5.06	5.06			その他, Methode von Nys & Rekker				estimated by calculation		4C	×			p.12
5	5.06	5.06			その他, Leo, Hansch: Version CLOG P 3.3				estimated by calculation		4C	×			p.12
6	5.13	5.13							experimental result		4A	×			p.12
7	5.36	5.36			その他, HPLC				experimental result		4A	×			p.12
8 PhysProp	5.13	5.13							experimental result		2B	×		HANSCH, C ET AL. (1995)	Log P (octanol-water)
9 ECHA	5.13	5.13	[Value from peer reviewed secondary source, no data available for temperature and pH.]	[Value from peer reviewed secondary source, no data available for temperature and pH.]	その他, not reported	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		Hansch, C., Leo, A. and Hoekman, D.. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. 1995, Washington, DC: American Chemical Society., 1995, cited in HSDB. HSDB updated on 2006-12-20.	Exp Key Partition coefficient.001
10 ECHA	5.4	5.4	23 °C	7.1	OECD TG 117	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1B	○		2009, 2009.5.3.	Exp Key Partition coefficient.001
11 SIDS	5.13	5.13	[Temperature not stated.]		その他, Not stated.	その他, YES [?]		-	experimental result		2B	×		Verschueren, K., Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, Second ed., Van Nostrand Reinhold Company, New York, 1983, p. 596.	SIDS Dossier p.10
12 USHPV	5.13	5.13							experimental result		2B	×			p.11

基本情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
2 EPI Suite	1.28 Pa・m ³ /mol	1.28					その他, Experimental Data from PhysProp Database		2C	×			
3	9.76E+000 Pa・m ³ /mol	9.76					(Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	×			
5 HSDB	2.22E-5 atm・m ³ /mol	2.249415					-		2B	○		Altschuh J et al. Chemosphere 39: 1871-1887 (1999)	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
7 PhysProp	0.0000222 atm・m ³ /mol	2.249415					experimental result		2B	○		ALTSCHUH, J ET AL. (1999)	Henry's Law Constant
8 SIDS	[Log10 (Henry's Constant) = -3.42 atm-m ³ /mole]	算出不可					(Q)SAR		3	×			Dossier p17
9 USHPV	2.22E-5 atm・m ³ /mol	2.249415					experimental result		2B	○			p.11

基本情報

優先し番号	171(104)
公称名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価I)	キースタ ディ該非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	3166 L/kg[2B以 上の値を用い て推定 (2C)]	3166				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×			
2 HSDB	Koc	1.50E+04	15000								estimated by calculation	using a log Kow of 5.13(1) and a regression- derived equation(2)	4C	×		SRC	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility:
3	Koc	2042-3388	2042-3388			in humic acid					estimated by calculation			×		SRC	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility:
4	Koc	2570-6574	2570-6574			in activated sludge					estimated by calculation			×		SRC	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility:
5	Koc	2337-11,184	2337-11,184			in sediment					estimated by calculation			×		SRC	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility:
6	Koc	7700	7700			in suspended solids					estimated by calculation			×		SRC	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility:
7	Koc	16,700-17,981	16,700-17,981			in suspended solids with activated sludge					estimated by calculation			×		SRC	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility:
8 ECHA	Koc	17980[log Koc=4.25]	17980				その他, batch equilibrium method	no	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	○		publication / van Compernelle R, McAvoy D, Sherren A, Wind T, Cano M L, Belanger S E, Dorn P B, Kerr K M / 2006 / Predicting the sorption of fatty alcohols and alcohol ethoxylates to effluent and receiving water. / Ecotox. and Environ. Safety, 64(1): 61-74	Exp Supporting Adsorption / desorption.001
9 USHPV	Koc	398[logKoc=2.6]	398								estimated			×	U.S. EPA. 2011. Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v4.00. U.S. Environmental Protection		

基本情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

◀ Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
10 PhysProp	Koc	3311	3311								experimental result			x	EPI Suite KOCWIN HELP APPENDIX F にCAS:112-53- 8のKOC 実測値としての記載 あり。	Meylan, W., P.H. Howard and R.S. Boethling. 1992. Molecular topology/fragment contribution method for predicting soil sorption coefficients. Environ. Sci. Technol. 26: 1560-1567. SRC. 1991. Group Contribution Method for Predicting Soil Sorption Coefficients. William Meylan & Philip H. Howard, Syracuse Research Corporation (June 3, 1991). EPA Contract No. 68- D8-0117 (Work Assignment 2- 19); SRC F0118-219	

基本情報

優先連し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の是非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1			BCF		71.72 L/kg (wet)2B以 上の値を用 いて推定 (2C) 1	71.72	BCFBFWIN				(Q)SAR		2C	○			

基本情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

▲ 解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
------	----	---	------	------------	----	-------	-----	-------------	--------------------------	------	---------	-------------------	----	----	--------

基本情報

優先番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの該 非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
HSDB	大気	OHラジカル による光化 学反応	1.8×10E-11 cm ³ /molecul exs		500000 molecule/c m ³ (24h- day)	21H			25℃		estimated by calculation									[Meylan WM, Howard PH; Chemosphere 26: 2293-99(1993) (2) Lyman WJら; 化学物質推定法ハンドブック。 Washington, DC: Amer Chem Soc pp.7- 4,7-5(1990)]	

参考情報

優先通し番号	171(104)
公示名称	アルカノール (C=10~16) (C=11~14のいずれかを含むものに限る。)
CAS登録番号	112-53-8
CAS名称	1-Dodecanol
その他番号	
その他名称	1-ドデカノール

分解性

収集データ

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるケーススタディの該非	値の種類	値の詳細	備考	文献	ページ番号等
1 ECHA		79%	DOC removal		OECD TG 301D	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result			1993,1993.1.11.	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
2		66%	CO ₂ evolution		OECD TG 301B	no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result			1991,1991.12.5.	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.004
3		50%			OECD TG 301B	yes	1: reliable without restriction	supporting study	experimental result			1997	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.005
4		69 % [St. dev. 0.2]	CO ₂ evolution		OECD TG 301B	no	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result			2009,2009.4.26.	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.008
5		71%			OECD TG 301B	no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result			1991	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.009
6 既存点検事業	良分解性					-	-	-			類似化学物質の分解度試験結果から得られた判定結果		