



Oktylfenoly a oktylfenol ethoxyláty

[Základní informace](#)[Ohlašovací prahy pro úniky a přenosy pro ohlašování do IRZ/E-PRTR](#)[H- a P-věty](#)[Základní charakteristika](#)[Použití](#)[Zdroje úniků](#)[Dopady na životní prostředí](#)[Dopady na zdraví člověka, rizika](#)[Celkové zhodnocení nebezpečnosti z hlediska životního prostředí](#)[Způsoby zjišťování a měření](#)[Další informace, zajímavosti](#)[Informační zdroje](#)[Vývoj ohlašovaného množství za posledních 5 let \(kg/rok\)](#)[Vývoj počtu ohlašovatelů za posledních 5 let](#)

Základní informace

Pořadové číslo látky v IRZ/E-PRTR	87
Další názvy	p-octylfenol; 4-oktylfenol; o-octylfenol; 2-oktylfenol, Triton X-100; Octoxynol-10; oktylfenylether; POE (10) oktylfenol; POE(10)oktylfenyl ether; poly(oxyethylene)-p-tert-octylphenyl ether; Koromex II; Antarox A 200; Photo-Flow 200; a mnoho dalších
Číslo CAS*	1806-26-4 (4-oktylfenol) 949-13-3 (2-oktylfenol) 27193-28-8 (2-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-fenol)

	140-66-9 ((4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-fenol) 9002-93-1 (POE (10) oktylfenol, Triton X-100)
Chemický vzorec*	C ₁₄ H ₂₂ O (4-oktylfenol)

Ohlašovací prahy pro úniky a přenosy pro ohlašování do IRZ/E-PRTR

Úniky do ovzduší (kg/rok)	-
Úniky do vody (kg/rok)	1
Úniky do půdy (kg/rok)	-
Přenosy v odpadních vodách (kg/rok)	1
Přenosy v odpadech (kg/rok)	-
Rizikové složky životního prostředí	voda

H- a P-věty*

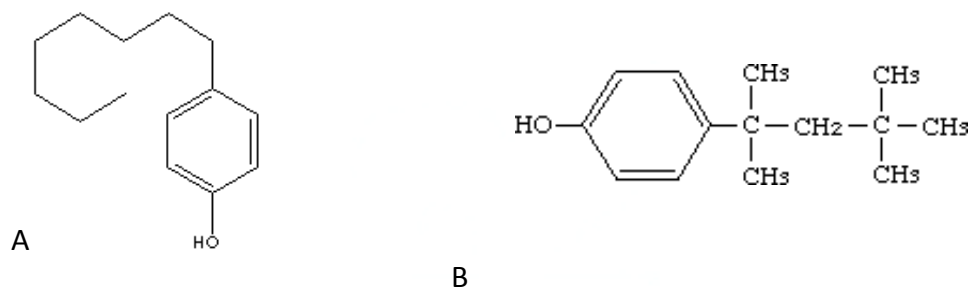
Číslo CAS 140-66-9; Indexové číslo 604-075-00-6*	
Standardní věty o nebezpečnosti	Pokyny pro bezpečné zacházení
H315 Dráždí kůži	P302+P352 PŘI STYKU S KŮŽÍ: Omyjte velkým množstvím vody/...
H318 Způsobuje vážné poškození očí	P332+P313 Při podráždění kůže: Vyhledejte lékařskou pomoc/ošetření.
H400 Vysoce toxický pro vodní organismy	P362+P364 Kontaminovaný oděv svlékněte a před opětovným použitím vyperte.
H410 Vysoce toxický pro vodní organismy, s dlouhodobými účinky	P280 Používejte ochranné rukavice/ochranný oděv/ochranné brýle/obličejový štít.
	P305+P351+P338 PŘI ZASAŽENÍ OČÍ: Několik minut opatrně vyplachujte vodou. Vyjměte kontaktní čočky, jsou-li nasazeny a pokud je lze vyjmout snadno. Pokračujte ve vyplachování.
	P310 Okamžitě volejte TOXIKOLOGICKÉ INFORMAČNÍ STŘEDISKO /lékaře/...
	P273 Zabraňte uvolnění do životního prostředí.
	P391 Uniklý produkt seberte.

* Indexové číslo, harmonizovaná klasifikace dle přílohy VI, nařízení (ES) č. 1272/2008, ve znění pozdějších předpisů.

Základní charakteristika

Oktylfenoly zahrnují teoreticky několik izomerů totožného složení vyjádřeného souhrnným vzorcem. Uhlovodíkový řetězec o délce 8 atomů uhlíku (lineární nebo i rozvětvený) může být navázán na fenol v poloze 2, 3 nebo 4. Pokud bychom do skupiny oktylfenolů zahrnuli i fenoly s dalšími substituenty na aromatickém jádře (což ovšem z názvu skupiny látek neplyne), náležela by do této skupiny i celá řada dalších látek. Největší význam má 4-oktylfenol, jehož číslo CAS je navíc také uvedeno v tabulce v nařízení evropského parlamentu a rady č. 166/2006. Následující text se proto týká především 4-oktylfenolu. Komerčně jsou obvykle dodávány směsi izomerů, kde nejvyšší zastoupení má právě 4-oktylfenol. Tato látka má konzistenci bílého prášku s teplotou tání 38°C a varu

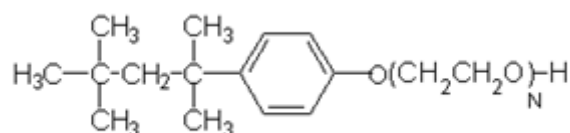
315 °C. Ve vodě je jen minimálně rozpustný, avšak v silně alkalických roztocích rozpustnost mírně vzrůstá díky disociaci hydroxylové skupiny. Rozpouští se v alkoholech, acetonu, olejích a dalších organických rozpouštědlech. Molekula 4-oktylfenolu je znázorněna na obrázku 1. Mezi oktylfenoly se obvykle řadí i 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-fenol, který je spolu s dalšími oktylfenoly základem řady neionogenních tenzidů. Jeho struktura je rovněž znázorněna na obrázku 1.



Obrázek 1: Struktura A: 4-oktylfenolu; B: 4-*tert.* oktylfenolu, neboli (4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-fenolu)

Oktylfenol ethoxyláty jsou látky odvozené od oktylfenolu, oproti kterému obsahují v molekule určitý počet ethoxyskupin, které jsou vázány na aromatickém jádře v poloze, kde je u oktylfenolu hydroxylová skupina. Počet ethoxyskupin je různý, obvykle mezi 9-15.

U přípravku s obchodním názvem Triton X-100 je například počet ethoxyskupin 9-10. Ethoxylované oktylfenoly mají krystalickou, pastovitou, nebo kapalnou konzistenci a jsou rozpustné ve vodě, ale i různých organických rozpouštědlech. Například Triton X-100 má teplotu tání -4°C a varu 120°C. Jeho struktura je znázorněna na obrázku 2. Stejným způsobem se odvozují fenol ethoxyláty od jiných oktylfenolů (např. od 4-oktylfenolu).



Obrázek 2: Struktura Tritonu X-100; POE(9-10)4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-fenol; oktylfenol ethoxylát; N=9-10

Použití

Oktylfenol a oktylfenol ethoxyláty jsou v současnosti široce využívanými chemickými látkami. Oktylfenol především slouží jako výchozí látka nebo přísada pro další výroby. Nejvýznamnější je jeho použití k výrobě oktylfenol ethoxylátů, což je jeden typ neionogenních tenzidů (tzv. povrchově aktivních látek). Dále se používá k výrobě změkčovadel plastů, stabilizátorů topných olejů, antioxidantů, polykarbonátů, vonných přísad, pryže, barviv a fenolových pryskyřic. Komerčně je obvykle dostupný jako kapalná směs izomerů.

Neionogenní tenzidy alkylfenol ethoxylátového typu jsou účinnou látkou v nejrůznějších mycích, odmašťovacích, čisticích a desinfekčních prostředcích. Jsou obsaženy i v některých fungicidech, herbicidech a baktericidních přípravcích, kde zlepšují účinnost hlavních složek. Z důvodu prokázaných estrogenních vlivů je jejich používání v řadě zemí zakázáno nebo omezeno.

Zdroje úniků

Zdrojem emisí oktylfenolu mohou být veškeré procesy, kde je používán, a také jeho výroba, která však podle dostupných údajů není v České republice realizována. Riziko emisí může existovat ve výrobních neionogenních tenzidů na bázi ethoxylovaných alkylfenolů, plastů, antioxidantů a pryskyřic. Je obsažen jako složka v některých herbicidních, baktericidních nebo fungicidních přípravcích, barvivech, vonných přísadách i fotografických materiálech, jejichž používání vede rovněž k emisím. V ethoxylované formě (neionogenní tenzidy) je obsažen v průmyslových (i některých domácích) mycích, desinfekčních a odmašťovacích prostředcích. Tyto prostředky mají velmi širokou oblast použití.

Zdroje emisí můžeme shrnout následovně:

- výroba oktylfenolu;
- navazující chemický průmysl (výroba neionogenních tenzidů, plastů, antioxidantů, pryskyřic a barviv);
- používání mycích, odmašťovacích a čisticích prostředků s obsahem neionogenních tenzidů (zejména průmyslové přípravky);
- používání biocidních přípravků obsahujících neionogenní tenzidy a dalších produktů, které mohou oktylfenol a oktylfenol ethoxyláty obsahovat (pryskyřice, barviva).

Dopady na životní prostředí

Oktylfenol je látka s jen minimální rozpustností ve vodě, z čehož plynou jeho základní vlastnosti. V zeminách se silně adsorbuje a do vod je uvolňován velmi pomalu. Ve vodním prostředí je obsažen hlavně ve formě adsorbované na nerozpuštěných látkách, sedimentech a na organické hmotě. Vykazuje rovněž tendence k bioakumulaci ve vodních organismech. Za aerobních podmínek dochází k biodegradaci na neškodné produkty během desítek dní (v závislosti na teplotě). V podmínkách anaerobních a zejména v sedimentech je biodegradace podstatně pomalejší, a proto můžeme sedimenty považovat za určité rezervoáry představující riziko pro životní prostředí do budoucna (například při změně podmínek). Uvádí se, že oktylfenol je schopen velmi pomalého uvolňování do ovzduší, avšak i v průmyslových

oblastech byly jeho koncentrace v ovzduší zjištěny jen zcela minimální, v okolí meze stanovitelnosti, která činila přibližně $50 \text{ ng}\cdot\text{m}^{-3}$. Pravděpodobnější je případný vstup do ovzduší v adsorbované formě na tuhých částicích.

Řada neionogenních tenzidů je tvořena ethoxylovaným oktylfenolem (či vyšším alkylfenolem), který obsahuje na straně hydroxylové skupiny určitý počet ethoxylových jednotek. Neionogenní tenzidy tohoto typu poměrně rychle biodegradují (například v čistírnách odpadních vod), uvádí se během několika dní. Tato rychlá degradace se týká ethoxylových skupin, přičemž výsledkem jsou právě výše popisované oktylfenoly (či obecně alkylfenoly), které hlavně v anaerobních podmínkách biodegradují podstatně pomaleji (viz výše). Alkylfenoly jsou proto celosvětově zaznamenávány ve zvýšených koncentracích (z důvodu široce používaných neionogenních tenzidů) zejména ve vodách, sedimentech a vodních organismech.

Oktylfenol vykazuje akutní i chronickou toxicitu pro ryby a další vodní organismy. Hodnoty LC_{50} pro ryby se pohybují v hodnotách do $1 \text{ mg}\cdot\text{l}^{-1}$. Ethoxylovaná forma vykazuje rovněž toxicitu pro ryby, avšak uváděné hodnoty LC_{50} jsou vyšší, přibližně v řádu do $10\text{-}20 \text{ mg}\cdot\text{l}^{-1}$. Velká pozornost je věnována schopnosti alkylfenolů vázat se na receptory estrogenu a ovlivňovat tak činnost některých genů (citlivých vůči estrogenu). Estrogeny hrají důležitou roli pro normální fyziologickou činnost a vývoj ryb, včetně pohlavní diferenciaci a pohlavního dospívání. Na dané téma byla publikována celá řada odborných prací, avšak jednotný názor na možné dopady na ekosystémy dosud vysloven nebyl. Je však zřejmé, že riziko vážných ohrožení hlavně vodních ekosystémů z tohoto důvodu existuje.

Dopady na zdraví člověka, rizika

Hlavní riziko expozice oktylfenolu představuje požití s potravinami, přičemž vstřebávání trávicím traktem je rychlé. Po expozici se distribuje do všech částí těla a nejvyšší koncentrace jsou přítomny v tucích. Oktylfenol je postupně metabolizován a degradační produkty vylučovány. Na bioakumulaci v lidském těle neexistuje jednotný názor. Další možností je vstup do organismu inhalací, což je však uváděno jen na základě obecných vlastností oktylfenolu. Naproti tomu méně významné (avšak ne nulové) vstřebávání kůží bylo prokázáno. Požití může bezprostředně způsobit podráždění trávicího traktu s nevolností, zvracením a průjmem. Dráždivě působí rovněž při nadýchání v podobě prachu či při potřísnění pokožky. Oktylfenol ethoxyláty jsou látky se silným odmašťovacím a dehydratačním účinkem, proto jsou nebezpečné a dráždivé zejména při potřísnění pokožky nebo vniknutí do oka.

Rovněž u člověka je oktylfenol schopen vázat se na receptory estrogenu a ovlivňovat tak činnost genů citlivých na estrogen. Tento efekt byl však dosavadními studiemi zjištěn jako slabý. Ačkoli je zřejmé, že oktylfenol vykazuje určitý potenciál k ovlivňování funkcí estrogenu v organismu, výzkumné studie spíše naznačují, že považovat tuto vlastnost za zásadní akritickou, by bylo nyní poněkud neadekvátní. Na dané téma probíhají další studie. Ovlivnění funkce estrogenu v organismu může obecně působit na fyziologickou činnost, například pohlavní diferenciaci a dospívání.

Celkové zhodnocení nebezpečnosti z hlediska životního prostředí

Oktylfenol a oktylfenol ethoxyláty jsou látky toxické pro vodní organismy. Vykazují navíc schopnost ovlivňovat funkci estrogenu, což může mít vážné dopady na zdraví člověka

i živočichů i na rovnováhu ekosystémů. Riziko spočívá v ovlivnění pohlavního dospívání a diferenciacie. Takové projevy nebyly dosud jednoznačně a přesně kvantifikovány, avšak potenciální riziko s nimi spojené, je vážné.

Způsoby zjišťování a měření

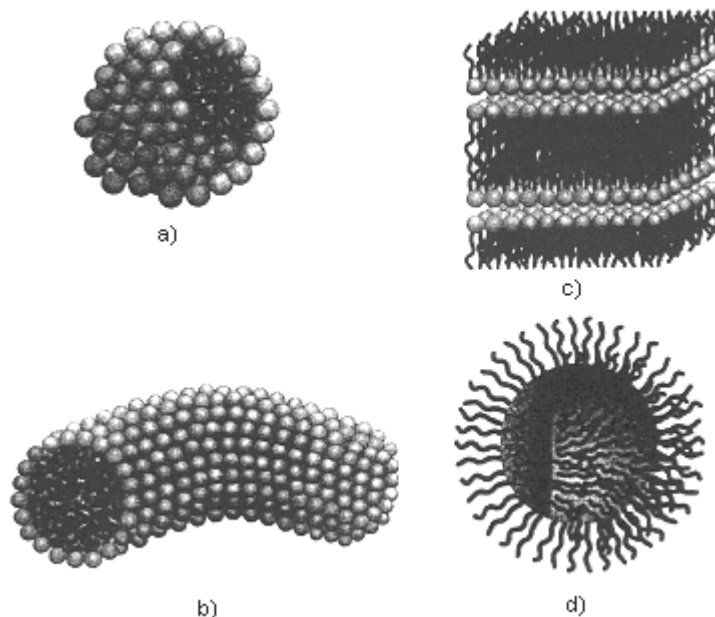
V případě chemické výroby lze odhad emisí oktylfenolu učinit z bilance daného procesu. Kvalitativně lze přítomnost oktylfenolu v používaných surovinách či přípravcích zjistit z deklarovaného složení, případně bezpečnostních listů přípravků. Pokud jsou oktylfenol ethoxyláty obsaženy například v čistících prostředcích, lze údaje o složení zjistit z bezpečnostního listu, či dalších údajů od výrobce nebo prodejce. Odhad emisí lze poté učinit ze spotřeby konkrétního přípravku.

Analyticky je možné stanovit oktylfenol ve vodách například metodami plynové nebo kapalinové chromatografie po extrakci vzorku vhodným rozpouštědlem. Alkylfenol ethoxyláty se ve vodách stanovují nejčastěji spektrofotometricky s tetrajodobismutitanem draselným, nebo dalšími vybarvovacími činidly. Nevýhodou je, že pozitivně mohou reagovat i jiné látky ve vodách přítomné. Stanovení je tudíž pouze orientační. Pozornost je nutné věnovat použitému standardu, protože odezva metody závisí na počtu ethoxylových jednotek v molekule tenzidu. Výsledky se proto uvádějí v mg.l^{-1} při standardu obsahujícím 10 ethoxylových jednotek jako tzv. BiAS (bismuth active substance).

Ohlašovací práh 1 kg si lze představit například jako vypouštěnou odpadní vodu z provozu, ve které je koncentrace oktylfenolu $0,1 \text{ mg.l}^{-1}$. Ohlašovací práh je překročen při vypuštění $10\,000 \text{ m}^3$ takové vody. Dalším příkladem může být čistící přípravek. Obsahuje-li používaný přípravek například 5 % hmotn. neionogenních tenzidů oktylfenol ethoxylátového typu, je ohlašovací práh dosažen při spotřebě 20 kg přípravku ročně.

Další informace, zajímavosti

V této kapitole je často řeč o tzv. tenzidech, které jsou složkou mnoha čistících, odmašťovacích a mycích prostředků. Tenzidy nejsou jen zmíněného neionogenního typu, ale i typů dalších, například anionaktivní, kationaktivní, amfoterní a další. Vyznačují se tím, jejich molekula je dlouhá a jeden její konec je polární a druhý nepolární. Například u oktylfenolu je část s ethoxylovými skupinami polární a oktylová skupiny nepolární. Takové struktury propůjčují tenzidům některé unikátní a velmi zajímavé vlastnosti. Kromě rozpustnosti v organických rozpouštědlech i vodě (což není vlastnost jen jejich) je nejzajímavější chování tenzidů v roztocích. Po překročení určité koncentrace se začínají samovolně shlukovat a tvořit útvary zvané micely, jejichž jádro má opačný charakter, než použité rozpouštědlo. Uvnitř micely tenzidu ve vodném prostředí je tudíž nepolární prostředí. Tímto způsobem mohou tenzidy ve vodném prostředí udržet jinak nerozpustné látky, například nečistoty. To je také podstatou mycích a odmašťovacích účinků tenzidů. Struktury některých typů micel, které samovolně vznikají v roztocích tenzidů, znázorňuje obrázku 3.

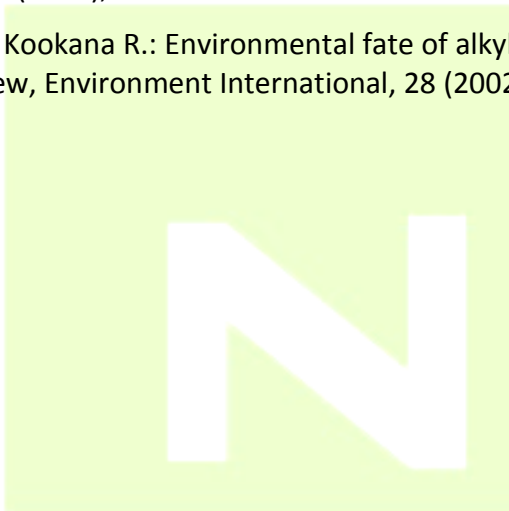


Obrázek 3: Tvary micel: a-sférická micela; b-válcovitá micela; c-laminární micela; d-reverzní micela

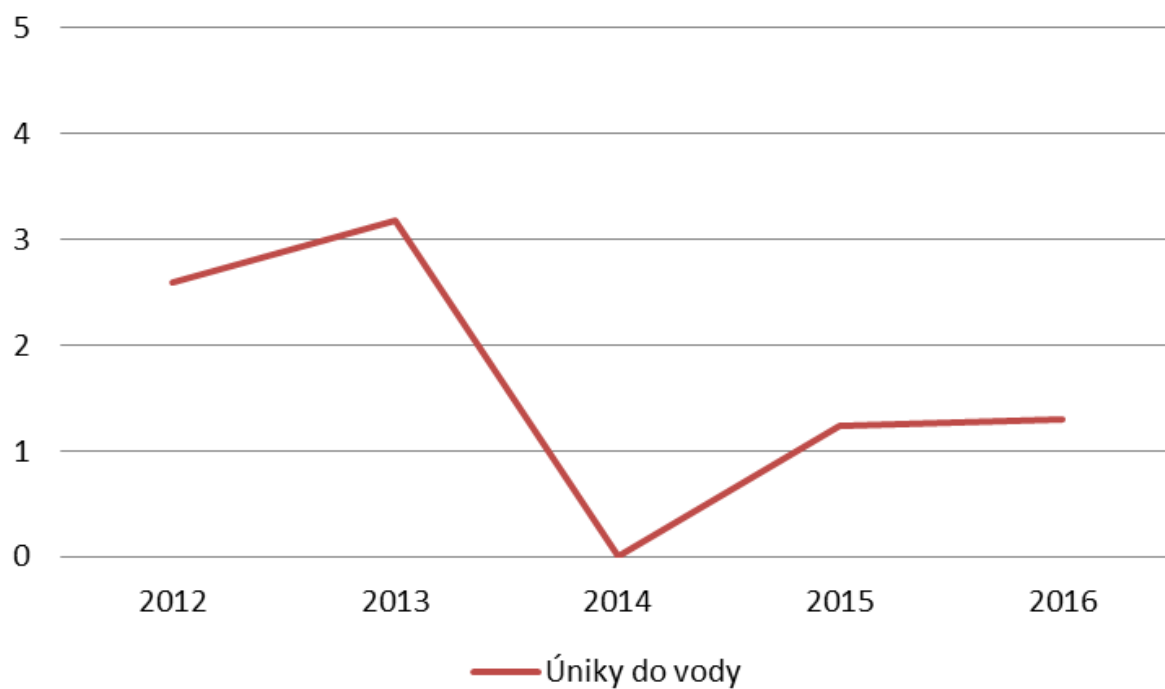
Informační zdroje

- Encyklopedie Wikipedia, <https://de.wikipedia.org/wiki/4-tert-Octylphenol>
- Agency for Toxic Substances and Disease Registry, <https://www.atsdr.cdc.gov>
- Hazardous Substance Fact Sheets, State of New Jersey Department of Health, <http://www.state.nj.us/>
- Ekotoxikologická databáze, www.piskac.cz/ETD
- Environment Agency, <https://www.gov.uk/government/organisations/environment-agency>
- IPCS Intox Databank, <http://www.intox.org/shutdown.html>
- National Safety Council, <http://www.nsc.org/Pages/home-old.aspx>
- Scorecard, The Pollution Information Site, http://scorecard.goodguide.com/chemical-profiles/summary.tcl?edf_substance_id=1806-26-4
- PubChem, Open Chemistry Database, <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/15730>
- Toxicological Data Network, <https://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search2/f?./temp/~lqt5HH:3>
- Světová zdravotnická organizace, www.who.int
- Pitter P.: Hydrochemie, Vydavatelství VŠCHT, 1999

- Servos M.R.: Review of the Aquatic Toxicity, Estrogenic Responses and bioaccumulation of Alkylphenols and Alkylphenol Polyethoxylates, Water Quality Research Canada, 34 (1999), 123-177
- Ying G., Williams B., Kookana R.: Environmental fate of alkylphenols and alkylphenol ethoxylates—a review, Environment International, 28 (2002), 215– 226



Vývoj ohlašovaného množství za posledních 5 let (kg/rok)



Vývoj počtu ohlašovatelů za posledních 5 let

