

1. 調査目的

初期環境調査は、「特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律」（平成 11 年法律第 86 号（以下「化管法」という。））における指定化学物質の指定について検討が必要とされる物質、社会的要因から調査が必要とされる物質等の環境残留状況の把握を目的としている。

2. 調査対象物質

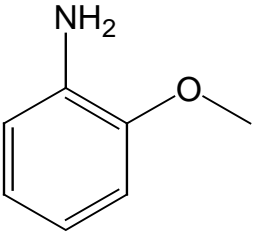
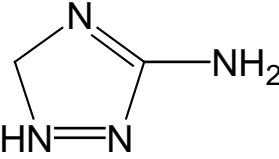
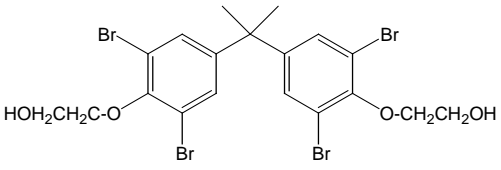
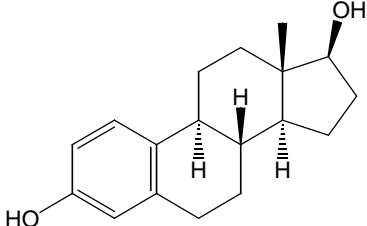
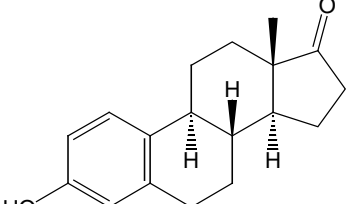
平成 17 年度の初期環境調査は、平成 17 年度化学物質環境実態調査推進検討会において選定された物質 34 物質（群）を調査対象物質とした。調査対象物質と調査媒体との組合せは次のとおりである。

物質調査番号	調査対象物質	化審法指定区分	化管法指定区分	調査媒体				
				水質	底質	生物貝類	生物魚類	大気
1	<i>o</i> -アニシジン		第一種	○	○			
2	3-アミノ-1 <i>H</i> -1,2,4-トリアゾール（アミトロール）	第二種監視	第一種	○	○			
3	2,2'-{イソプロピリデンビス[(2,6-ジブromo-4,1-フェニレン)オキシ]}ジエタノール		第一種	○	○			
4	17β-エストラジオール			○				
5	エストロン			○				
6	17α-エチニルエストラジオール			○				
7	2,3-エポキシ-1-プロパノール		第一種	○	○			
8	<i>m</i> -クロロアニリン	第二種監視 第三種監視	第一種	○	○			
9	<i>N</i> -シクロヘキシル-2-ベンゾチアゾールスルフェンアミド		第一種	○				
10	3,3'-ジクロロ-4,4'-ジアミノジフェニルメタン	第二種監視	第一種	○	○			
11	1,2-ジクロロ-3-ニトロベンゼン	第二種監視	第一種	○	○			
12	2-(2 <i>H</i> -1,2,3-ベンゾトリアゾール-2-イル)-4,6-ジ- <i>tert</i> -ブチルフェノール	第一種監視	第二種	○				
13	2,6-ジメチルアニリン	第二種監視	第一種	○				
14	3,4-ジメチルアニリン	第三種監視	第一種	○	○			
15	<i>N</i> -(1,3-ジメチルブチル)- <i>N'</i> -フェニル- <i>p</i> -フェニレンジアミン		第二種	○				○
16	3,3'-ジメチルベンジジン（ <i>o</i> -トリジン）	第二種監視	第一種	○				
17	中鎖塩素化パラフィン		第二種	○	○	○	○	
	[17-1]塩素化テトラデカン（塩素数が 5 から 8 までのもの）			○	○	○	○	
	[17-2]塩素化ペンタデカン（塩素数が 5 から 9 までのもの）					○	○	
18	直鎖アルキルベンゼンスルホン酸類（LAS）（アルキル基の炭素数が 10 から 14 までのもの）		第一種		○			
	[18-1]直鎖デシルベンゼンスルホン酸及びその塩（LAS-C ₁₀ ）				○			
	[18-2]直鎖ウンデシルベンゼンスルホン酸及びその塩（LAS-C ₁₁ ）				○			
	[18-3]直鎖ドデシルベンゼンスルホン酸及びその塩（LAS-C ₁₂ ）				○			
	[18-4]直鎖トリデシルベンゼンスルホン酸及びその塩（LAS-C ₁₃ ）				○			
	[18-5]直鎖テトラデシルベンゼンスルホン酸及びその塩（LAS-C ₁₄ ）				○			
19	オクタデシルアミン(<i>N</i> - <i>B</i>)トリフェニルボラン		第二種	○				
20	2,4,6-トリブromoフェノール		第一種	○				
21	2,4-トルエンジアミン（2,4-ジアミノトルエン）	第二種監視	第一種	○	○			
22	<i>p</i> -ニトロアニリン	第二種監視	第一種	○				
23	<i>N</i> -ニトロソジフェニルアミン	第三種監視	第一種	○				
24	<i>m</i> -フェニレンジアミン	第二種監視	第一種	○				
25	<i>p</i> -フェネチジン	第二種監視	第一種	○				
26	ペンタクロロフェノール	第二種監視 第三種監視	第一種	○				

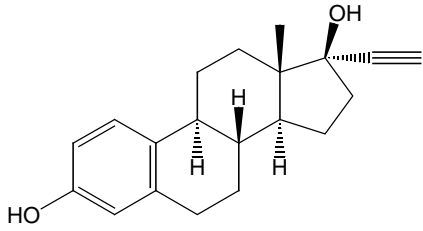
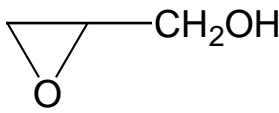
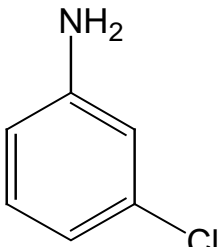
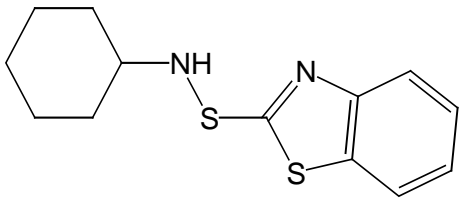
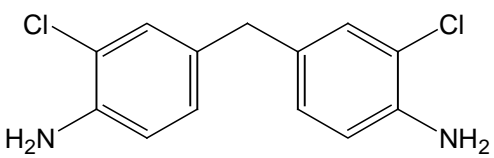
物質 調査 番号	調査対象物質	化審法 指定区分	化管法 指定区分	調査媒体				
				水 質	底 質	生物		大 気
						貝 類	魚 類	
27	ポリ(オキシエチレン)=アルキルエーテル類(アルキル基の炭素数が12から15までのもの)		第一種	○				
	[27-1]ポリ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル類(重合度が2から14までのもの)			○				
	[27-1-1] ジ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○				
	[27-1-2] トリ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○				
	[27-1-3] テトラ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○				
	[27-1-4] ペンタ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○				
	[27-1-5] ヘキサ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○				
	[27-1-6] ヘプタ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○				
	[27-1-7] オクタ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○				
	[27-1-8] ノナ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○				
	[27-1-9] デカ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○				
	[27-1-10] ウンデカ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○				
	[27-1-11] ドデカ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○				
	[27-1-12] トリデカ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○				
[27-1-13] テトラデカ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル			○					
28	ポリ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類(重合度が2から15までのもの)	第三種監視	第一種	○				
	[28-1] ジ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
	[28-2] トリ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
	[28-3] テトラ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
	[28-4] ペンタ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
	[28-5] ヘキサ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
	[28-6] ヘプタ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
	[28-7] オクタ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
	[28-8] ノナ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
	[28-9] デカ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
	[28-10] ウンデカ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
	[28-11] ドデカ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
	[28-12] トリデカ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
	[28-13] テトラデカ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○				
[28-14] ペンタデカ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類			○					
29	ポリプロモジフェニルエーテル類			○				
	[29-1] モノプロモジフェニルエーテル類			○				
	[29-2] ジプロモジフェニルエーテル類			○				
	[29-3] トリプロモジフェニルエーテル類			○				
	[29-4] テトラプロモジフェニルエーテル類			○				
	[29-5] ペンタプロモジフェニルエーテル類			○				
	[29-6] ヘキサプロモジフェニルエーテル類			○				
	[29-7] ヘプタプロモジフェニルエーテル類			○				
	[29-8] オクタプロモジフェニルエーテル類			○				
	[29-9] ノナプロモジフェニルエーテル類			○				
	[29-10] デカプロモジフェニルエーテル	第二種監視	第一種	○				
30	N-メチルアニリン	第二種監視	第一種	○	○	○	○	
31	N-メチルカルバミン酸 2,3-ジヒドロ-2,2-ジメチル-7-ベンゾ[b]フランニル(カルボフラン)	第二種監視 第三種監視	第一種	○				
32	N ^{tert} -ブチル-N-シクロプロピル-6-(メチルチオ)-1,3,5-トリアジン-2,4-ジアミン			○				
33	2-メトキシ-5-メチルアニリン	第二種監視	第一種	○	○			
34	3-ヨード-2-プロピニルブチルカーバメイト			○				

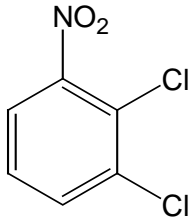
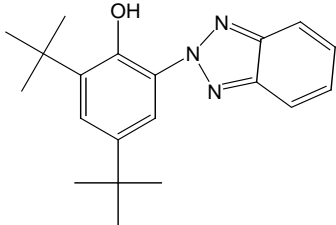
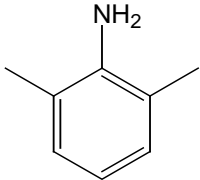
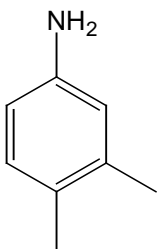
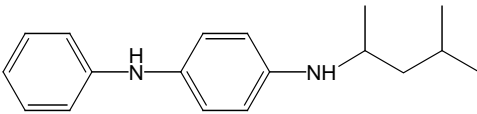
(注) 「化審法」とは「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律」(昭和48年法律第117号)をいう。以下同じ。

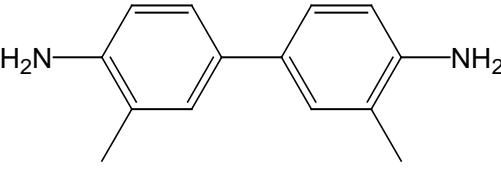
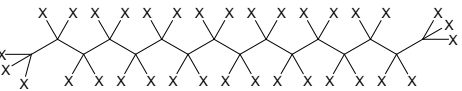
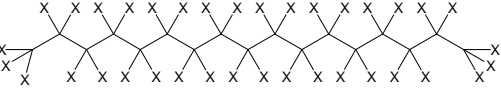
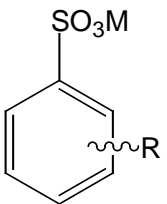
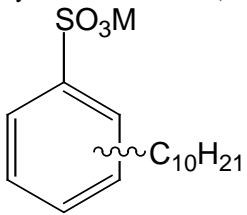
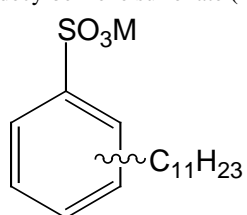
初期環境調査の調査対象物質の物理化学的性状は次のとおりである。

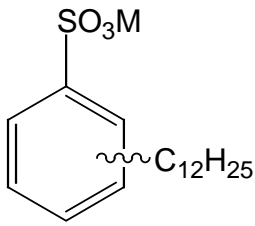
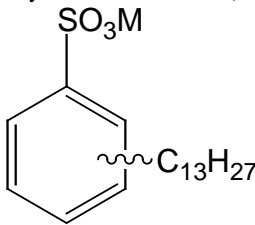
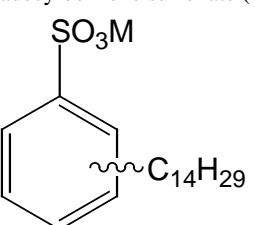
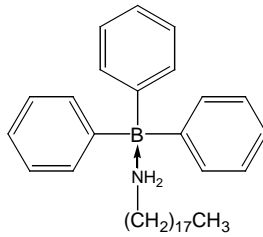
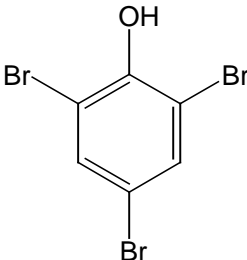
<p>[1] <i>o</i>-アニシジン 2-methoxyaniline</p> 	<p>分子式 : C₇H₉NO CAS : 90-04-0 既存化 : 3-682 MW : 123.15 mp : 5°C¹⁾ bp : 225°C¹⁾ sw : 14g/L (25°C)²⁾ 比重 : 1.098 (15/15°C)¹⁾ logPow : 1.18²⁾</p>
<p>[2] 3-アミノ-1<i>H</i>-1,2,4-トリアゾール (アミトロール) amitorole</p> 	<p>分子式 : C₂H₄N₄ CAS : 61-82-5 既存化 : 5-602 MW : 84.08 mp : 159°C⁴⁾ bp : 不詳 sw : 280g/L (25°C)⁴⁾ 比重 : 1.138 (20°C)⁵⁾ logPow : -0.97⁵⁾</p>
<p>[3] 2,2'-{イソプロピリデンビス[(2,6-ジブロモ-4,1-フェニレン) オキシ]}ジエタノール 4,4'-isopropylidenebis[2-(2,6-dibromophenoxy)ethanol]</p> 	<p>分子式 : C₁₉H₂₀Br₄O₄ CAS : 4162-45-2 既存化 : 4-218 MW : 631.98 mp : 不詳 bp : 不詳 sw : 不詳 比重 : 不詳 logPow : 不詳</p>
<p>[4] 17β-エストラジオール 17beta-estradiol</p> 	<p>分子式 : C₁₈H₂₄O₂ CAS : 50-28-2 既存化 : 不詳 MW : 272.39 mp : 173~179¹⁾ bp : 不詳 sw : 3.60mg/L (27°C)²⁾ 比重 : 1.24 (25°C)⁶⁾ logPow : 4.01³⁾</p>
<p>[5] エストロン estrone</p> 	<p>分子式 : C₁₈H₂₂O₂ CAS : 53-16-7 既存化 : 9-2145 MW : 270.37 mp : 260.2⁶⁾ bp : 不詳 sw : 30mg/L (25°C)¹⁾ 比重 : 1.24 (25°C)⁶⁾ logPow : 3.13³⁾</p>

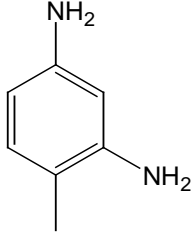
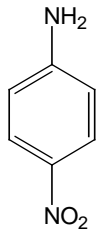
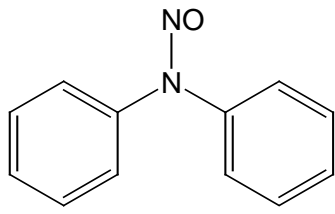
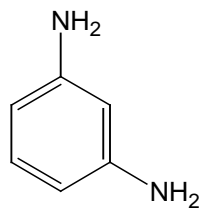
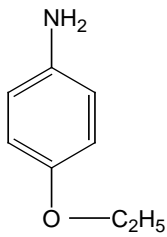
(注) 「CAS」とはCAS登録番号を、「既存化」とは既存化学物質名簿における番号を、「MW」とは分子量を、「mp」とは融点を、「bp」とは沸点を、「sw」とは水への溶解度を、「logPow」とは*n*-オクタノール/水分配係数を、「kPa」とはキロパスカル (1気圧≒101.3kPa) をそれぞれ指す。

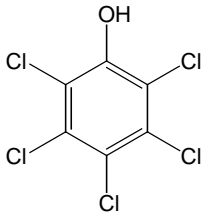
<p>[6] 17α-エチニルエストラジオール 17alpha-ethynylestradiol</p> 	<p>分子式 : C₂₀H₂₄O₂ CAS : 57-63-6 既存化 : 不詳 MW : 296.4 mp : 141~146¹⁾ bp : 不詳 sw : 11.3mg/L (27°C)²⁾ 比重 : 不詳 logPow : 3.67³⁾</p>
<p>[7] 2,3-エポキシ-1-プロパノール 2,3-epoxypropane-1-ol</p> 	<p>分子式 : C₃H₆O₂ CAS : 556-52-5 既存化 : 2-2389 MW : 74.08 mp : -45°C⁸⁾ bp : 160°C⁷⁾ sw : 易溶⁸⁾ 比重 : 1.115 (20°C)⁷⁾ logPow : 0.95³⁾</p>
<p>[8] <i>m</i>-クロロアニリン 3-chloroaniline</p> 	<p>分子式 : C₆H₆ClN CAS : 108-42-9 既存化 : 3-194 MW : 127.57 mp : -10.4°C¹⁾ bp : 230.5°C¹⁾ sw : 5,400mg/L (20°C)⁴⁾ 比重 : 1.215 (22°C)¹⁾ logPow : 1.88³⁾</p>
<p>[9] <i>N</i>-シクロヘキシル-2-ベンゾチアゾールスルフェンアミド N-cyclohexyl-2-benzothiazolesulfanamide</p> 	<p>分子式 : C₁₃H₁₆N₂S₂ CAS : 95-33-0 既存化 : 5-256 MW : 264.43 mp : 93~100°C¹⁰⁾ bp : 不詳 sw : 難溶¹⁰⁾ 比重 : 1.27¹⁰⁾ logPow : 5.0³⁾</p>
<p>[10] 3,3'-ジクロロ-4,4'-ジアミノジフェニルメタン 4,4'-methylenebis-2-chloroaniline</p> 	<p>分子式 : C₁₃H₁₂Cl₂N₂ CAS : 101-14-4 既存化 : 4-275、4-95、4-96 MW : 267.16 mp : 110°C¹⁾ bp : 378.9°C¹¹⁾ sw : 13/9mg/L (24°C)¹¹⁾ 比重 : 1.44¹⁰⁾ logPow : 3.91¹²⁾</p>

<p>[11] 1,2-ジクロロ-3-ニトロベンゼン 1,2-dichloro-3-nitrobenzene</p> 	<p>分子式 : C₆H₃Cl₂NO₂ CAS : 3209-22-1 既存化 : 3-455 MW : 192.00 mp : 61.5°C⁶⁾ bp : 257.5°C⁶⁾ sw : 62.4mg/L (20°C)²⁾ 比重 : 1.721 (14°C)⁶⁾ logPow : 3.05³⁾</p>
<p>[12] 2-(2H-1,2,3-ベンゾトリアゾール-2-イル)-4,6-ジ-tert-ブチルフェノール 2-(2H-1,2,3-benzotriazol-2-yl)-4,6-di-tert-butylphenol</p> 	<p>分子式 : C₂₀H₂₅N₃ CAS : 3846-71-7 既存化 : 5-3580、5-3604 MW : 323.44 mp : 不詳 bp : 不詳 sw : 不詳 比重 : 不詳 logPow : 6.27³⁾</p>
<p>[13] 2,6-ジメチルアニリン 2,6-dimethylaniline</p> 	<p>分子式 : C₈H₁₁N CAS : 87-62-7 既存化 : 3-129 MW : 121.20 mp : 11.2°C⁶⁾ bp : 216°C⁸⁾ sw : 8.24g/L (25°C)¹³⁾ 比重 : 0.9842 (20°C)⁶⁾ logPow : 1.84³⁾</p>
<p>[14] 3,4-ジメチルアニリン 3,4-xylidine</p> 	<p>分子式 : C₈H₁₁N CAS : 95-64-7 既存化 : 3-129 MW : 121.20 mp : 51°C⁶⁾ bp : 228°C⁶⁾ sw : 3.8g/L (22°C)¹³⁾ 比重 : 1.076 (18°C)⁶⁾ logPow : 1.84¹²⁾</p>
<p>[15] N-(1,3-ジメチルブチル)-N'-フェニル-p-フェニレンジアミン N-(1,3-dimethylbutyl)-N'-phenyl-p-phenylenediamine</p> 	<p>分子式 : C₁₈H₂₄N₂ CAS : 793-24-8 既存化 : 3-136、3-368 MW : 268 mp : 50°C¹⁰⁾ bp : 不詳 sw : 不詳 比重 : 1.07¹⁰⁾ logPow : 4.77³⁾</p>

<p>[16] 3,3'-ジメチルベンジジン (o-トリジン) 3,3'-dimethylbenzidine</p> 	<p>分子式 : $C_{14}H_{16}N_2$ CAS : 119-93-7 既存化 : 9-882 MW : 212.28 mp : $129\sim 131^{\circ}C^{1)}$ bp : $300^{\circ}C^{10)}$ sw : 1,300mg/L ($25^{\circ}C$)²⁾ 比重 : 不詳 logPow : $2.34^3)$</p>
<p>[17] 中鎖塩素化パラフィン medium-chain chlorinated paraffins (MCCPs)</p> <p>[17-1] 塩素化テトラデカン (塩素数が5から8までのもの)</p>  <p>X=H (25~22) 又は Cl (5~8)</p> <p>[17-2] 塩素化ペンタデカン (塩素数が5から9までのもの)</p>  <p>X=H (27~23) 又は Cl (5~9)</p>	<p>分子式 : $C_mH_{(2m-n+2)}Cl_n$ (m=14~17, n=1~17) CAS : 85535-85-9 既存化 : 2-68 MW : [17-1] 370.61 ($C_{14}H_{25}Cl_5$) ~ 473.95 ($C_{14}H_{22}Cl_8$) [17-2] 384.64 ($C_{15}H_{27}Cl_5$) ~ 522.42 ($C_{15}H_{23}Cl_9$) mp : 不詳 bp : 不詳 sw : 不溶¹⁾ 比重 : $1.00\sim 1.07^1)$ logPow : $5\sim 12^3)$</p>
<p>[18] 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸類 (LAS) (アルキル基の炭素数が10から14までのもの) linear alkylbenzene sulfonate (LAS) ($C_{10}\sim C_{14}$)</p>  <p>M=H 又は Na 等の金属</p>	<p>分子式 : [18-1] ~ [18-5] 参照 CAS : [18-1] ~ [18-5] 参照 既存化 : [18-1] ~ [18-5] 参照 MW : [18-1] ~ [18-5] 参照 mp : [18-1] ~ [18-5] 参照 bp : [18-1] ~ [18-5] 参照 sw : [18-1] ~ [18-5] 参照 比重 : [18-1] ~ [18-5] 参照 logPow : [18-1] ~ [18-5] 参照</p>
<p>[18-1] 直鎖デシルベンゼンスルホン酸及びその塩 (LAS-C₁₀) linear decylbenzene sulfonate (LAS -C₁₀)</p>  <p>M=H 又は Na 等の金属</p>	<p>分子式 : $C_{16}H_{26}O_3S$ (Na 塩の場合は $C_{16}H_{25}O_3SNa$) CAS : 1322-98-1 既存化 : 3-1949 MW : 298.46 (Na 塩の場合は 320.44) mp : 不詳 bp : 不詳 sw : 不詳 比重 : 不詳 logPow : 不詳</p>
<p>[18-2] 直鎖ウンデシルベンゼンスルホン酸及びその塩 (LAS-C₁₁) linear undecylbenzene sulfonate (LAS -C₁₁)</p>  <p>M=H 又は Na 等の金属</p>	<p>分子式 : $C_{17}H_{28}O_3S$ (Na 塩の場合は $C_{17}H_{27}O_3SNa$) CAS : 27636-75-5 既存化 : 3-1906 MW : 312.48 (Na 塩の場合は 334.46) mp : 不詳 bp : 不詳 sw : 不詳 比重 : 不詳 logPow : 不詳</p>

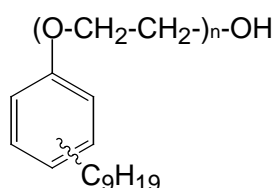
<p>[18-3] 直鎖ドデシルベンゼンスルホン酸及びその塩 (LAS-C₁₂) linear dodecylbenzene sulfonate (LAS -C₁₂)</p>  <p>M=H 又は Na 等の金属</p>	<p>分子式 : C₁₈H₃₀O₃S (Na 塩の場合は C₁₈H₂₉O₃SNa) CAS : 25155-30-0 既存化 : 3-1884 MW : 326.51 (Na 塩の場合は 348.49) mp : 不詳 bp : 不詳 sw : 0.8g/L²⁾ 比重 : 不詳 logPow : 0.45³⁾</p>
<p>[18-4] 直鎖トリデシルベンゼンスルホン酸及びその塩 (LAS-C₁₃) linear tridecylbenzene sulfonate (LAS -C₁₃)</p>  <p>M=H 又は Na 等の金属</p>	<p>分子式 : C₁₉H₃₂O₃S (Na 塩の場合は C₁₉H₃₁O₃SNa) CAS : 26248-24-8 既存化 : 不詳 MW : 340.47 (Na 塩の場合は 362.45) mp : 不詳 bp : 不詳 sw : 不詳 比重 : 不詳 logPow : 2.52³⁾</p>
<p>[18-5] 直鎖テトラデシルベンゼンスルホン酸及びその塩 (LAS-C₁₄) linear tetradecylbenzene sulfonate (LAS-C₁₄)</p>  <p>M=H 又は Na 等の金属</p>	<p>分子式 : C₂₀H₃₄O₃S (Na 塩の場合は C₂₀H₃₃O₃SNa) CAS : 28348-61-0 既存化 : 3-1906 MW : 354.50 (Na 塩の場合は 376.48) mp : 不詳 bp : 不詳 sw : 不詳 比重 : 不詳 logPow : 不詳</p>
<p>[19] オクタデシルアミン(N-B)トリフェニルボラン octadecylamine(N-B) triphenylborane</p> 	<p>分子式 : C₃₆H₅₄BN CAS : 107065-10-1 既存化 : 3-4280 MW : 511 mp : 不詳 bp : 不詳 sw : 不詳 比重 : 不詳 logPow : 不詳</p>
<p>[20] 2,4,6-トリブロモフェノール 2,4,6-tribromophenol</p> 	<p>分子式 : C₆H₃Br₃O CAS : 118-79-6 既存化 : 3-959 MW : 330.80 mp : 94~96°C¹⁾ bp : 286°C⁶⁾ sw : 70mg/L (15°C)²⁾ 比重 : 2.55 (20°C)⁶⁾ logPow : 4.13³⁾</p>

<p>[21] 2,4-トルエンジアミン (2,4-ジアミノトルエン) 2,4-toluenediamine</p> 	<p>分子式 : C₇H₁₀N₂ CAS : 95-80-7 既存化 : 3-126 MW : 122.17 mp : 99°C⁶⁾ bp : 292°C⁶⁾ sw : 7.74g/L²⁰⁾ 比重 : 1.042 (100°C)¹⁾ logPow : 0.337⁴⁾</p>
<p>[22] <i>p</i>-ニトロアニリン 4-nitroaniline</p> 	<p>分子式 : C₆H₆N₂O₂ CAS : 100-01-6 既存化 : 3-392 MW : 138.13 mp : 146°C¹⁾ bp : 332°C¹⁾ sw : 724mg/L (25°C)²¹⁾ 比重 : 1.424 (20°C)⁶⁾ logPow : 1.39³⁾</p>
<p>[23] <i>N</i>-ニトロソジフェニルアミン nitrosodiphenylamine</p> 	<p>分子式 : C₁₂H₁₀N₂O CAS : 86-30-6 既存化 : 3-431 MW : 198.22 mp : 66.5°C⁶⁾ bp : 不詳 sw : 35mg/L (25°C)²⁾ 比重 : 1.23²²⁾ logPow : 3.13²³⁾</p>
<p>[24] <i>m</i>-フェニレンジアミン <i>m</i>-phenylenediamine</p> 	<p>分子式 : C₆H₈N₂ CAS : 108-45-2 既存化 : 3-185 MW : 108.15 mp : 62~63°C¹⁾ bp : 284~287°C¹⁾ sw : 238g/L (20°C)²⁴⁾ 比重 : 1.0096 (58°C)⁶⁾ logPow : -0.33³⁾</p>
<p>[25] <i>p</i>-フェネチジン 4-ethoxy-aniline</p> 	<p>分子式 : C₈H₁₁NO CAS : 156-43-4 既存化 : 3-682 MW : 137.18 mp : 2.4°C¹⁾ bp : 253~255°C¹⁾ sw : 20g/L¹⁾ 比重 : 1.065 (16°C)¹⁾ logPow : 1.24³⁾</p>

<p>[26] ペンタクロロフェノール pentachlorophenol</p> 	<p>分子式 : C_6HCl_5O CAS : 87-86-5 既存化 : 3-2850 MW : 266.35 mp : $174^\circ C$ (一水和物)²⁵⁾、$191^\circ C$ (無水和物)²⁵⁾ bp : $309\sim 310^\circ C$ (分解)¹⁾ sw : $14mg/L$ ($26.7^\circ C$)²⁾ 比重 : 1.978 ($22^\circ C$)¹⁾ logPow : $5.12$³⁾</p>
<p>[27] ポリ(オキシエチレン)=アルキルエーテル類 (アルキル基の炭素数が 12 から 15 までのもの) alcohols, C_{12-15}, ethoxylated</p> <p>$H_{(2n+1)}C_m-(O-CH_2-CH_2-)_m-OH$ ($n=12\sim 15$, $m=1\sim$)</p>	<p>分子式 : $C_{(n+2m)}H_{(2n+4m+1)}O_{(m+1)}$ CAS : 68551-12-2 既存化 : 7-97 ほか MW : 種類によって異なる mp : 種類によって異なる bp : 種類によって異なる sw : 種類によって異なる 比重 : 種類によって異なる logPow : 種類によって異なる</p>
<p>[27-1] ポリ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル類 (重合度が 2 から 14 までのもの) alcohols, C_{12}, ethoxylated</p> <p>$H_{25}C_{12}-(O-CH_2-CH_2-)_n-OH$ ($n=2\sim 14$)</p> <p>[27-1-1] ジ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル [27-1-2] トリ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル [27-1-3] テトラ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル [27-1-4] ペンタ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル [27-1-5] ヘキサ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル [27-1-6] ヘプタ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル [27-1-7] オクタ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル [27-1-8] ノナ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル [27-1-9] デカ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル [27-1-10] ウンデカ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル [27-1-11] ドデカ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル [27-1-12] トリデカ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル [27-1-13] テトラデカ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル</p>	<p>分子式 : $C_{(2n+12)}H_{(4n+26)}O_{(n+1)}$ CAS : 9002-92-0 既存化 : 7-97 MW : 274.44 ([27-1-1]) ~ 803.07 ([27-1-13]) mp : $16^\circ C$¹⁶⁾ bp : 不詳 sw : 可溶¹⁾ 比重 : $1.02$¹⁶⁾ logPow : 不詳</p>

[28] ポリ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類 (重合度が2から15までのもの)

alpha-(nonylphenyl)-omega-hydroxy-poly(oxy-1,2-ethanediyl)ethers

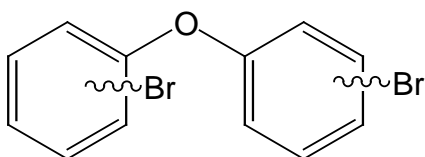


(n=2~15)

分子式： 種類によって異なる
 CAS： 9016-45-9
 既存化： 7-172
 MW： 308.46 ([28-1]) ~881.14 ([28-14])
 mp： 42~43°C³⁾
 bp： 不詳
 sw： 1,000 mg/L 以上 (25°C)³⁾
 比重： 1.06 (20°C)⁴⁾
 logPow： 不詳

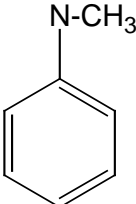
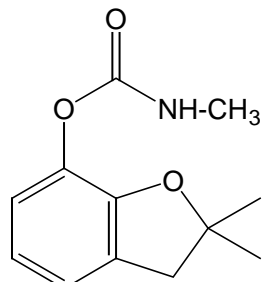
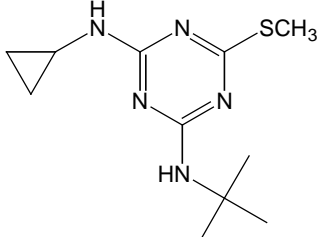
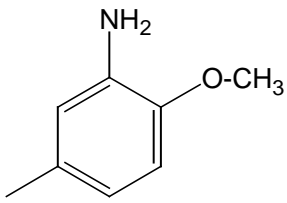
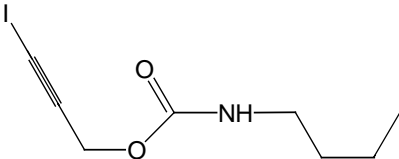
- [28-1] ジ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-2] トリ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-3] テトラ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-4] ペンタ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-5] ヘキサ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-6] ヘプタ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-7] オクタ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-8] ノナ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-9] デカ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-10] ウンデカ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-11] ドデカ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-12] トリデカ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-13] テトラデカ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類
- [28-14] ペンタデカ(オキシエチレン)=ノニルフェニルエーテル類

[29] ポリブロモジフェニルエーテル類
 polybrominated diphenylethers (PBDEs)



(Br=1~10)

分子式： C₁₂H_(10-n)OBr_n
 CAS： 101-55-3 ([29-1] のうち 4-モノブロモ体)
 2050-47-7 ([29-2] のうち 4,4'-ジブロモ体)
 49690-94-0 ([29-3] のうち 2,3,4'-トリブロモ体)
 40088-47-9 ([29-4])
 32534-81-9 ([29-5])
 36483-60-0 ([29-6])
 68928-80-3 ([29-7])
 32536-52-0 ([29-8])
 63936-56-1 ([29-9])
 1163-19-5 ([29-10])
 既存化： 3-2846 ([29-10])
 MW： 249.11 ([29-1]) ~959.17 ([29-10])
 mp： 18.72°C ([29-1] のうち 4-モノブロモ体)⁶⁾
 -7~-3°C ([29-5])²⁶⁾
 70~150°C ([29-7])²⁶⁾
 167~257°C ([29-8])²⁶⁾
 305°C ([29-10])²⁸⁾
 bp： 425°Cで分解 ([29-10])²⁶⁾
 sw： 0.0133mg/L ([29-5])²⁷⁾
 0.0001mg/L ([29-10])²⁾
 比重： 1.6088 ([29-1] のうち 4-モノブロモ体)⁶⁾
 2.25~2.28 ([29-5])²⁷⁾
 2.6 ([29-7])²⁶⁾
 2.76 ([29-8])²⁶⁾
 logPow： 5.87~6.16 ([29-4])²⁶⁾
 6.64~6.97 ([29-5])²⁷⁾
 6.86~7.92 ([29-6])²⁶⁾
 8.35~8.90 ([29-8])²⁶⁾
 10.1 ([29-10])²⁶⁾

<p>[30] <i>N</i>-メチルアニリン <i>N</i>-methylaniline</p> 	<p>分子式 : C₇H₉N CAS : 100-61-8 既存化 : 3-106 MW : 107.16 mp : -57°C¹⁾ bp : 196.2°C¹⁾ sw : 5,620mg/L (25°C)²⁾ 比重 : 0.989 (20°C)¹⁾ logPow : 1.66³⁾</p>
<p>[31] <i>N</i>-メチルカルバミン酸 2,3-ジヒドロ-2,2-ジメチル-7-ベンゾ[b]フラニル (カルボフラン) carbofuran</p> 	<p>分子式 : C₁₂H₁₅NO₃ CAS : 1563-66-2 既存化 : 5-5540 MW : 221.26 mp : 151°C⁶⁾ bp : 不詳 sw : 700mg/L (25°C)¹⁾、320mg/L (25°C)⁵⁾ 比重 : 1.18 (20°C)⁶⁾ logPow : 2.32³⁾</p>
<p>[32] <i>N'</i>-tert-ブチル-<i>N</i>-シクロプロピル-6-(メチルチオ)-1,3,5-トリアジン-2,4-ジアミン <i>N'</i>-tert-butyl-<i>N</i>-cyclopropyl-6-(methylthio)-1,3,5-triazine-2,4-diamine</p> 	<p>分子式 : C₁₁H₁₉N₅S CAS : 28159-98-0 既存化 : 不詳 MW : 253.37 mp : 不詳 bp : 不詳 sw : 不詳 比重 : 不詳 logPow : 不詳</p>
<p>[33] 2-メトキシ-5-メチルアニリン 6-methoxy-<i>m</i>-toluidine</p> 	<p>分子式 : C₈H₁₁NO CAS : 120-71-8 既存化 : 3-614 MW : 137.18 mp : 51.5°C⁶⁾ bp : 235°C⁶⁾ sw : 難溶⁶⁾ 比重 : 不詳 logPow : 1.74³⁾</p>
<p>[34] 3-ヨード-2-プロピニルブチルカーバメイト 3-iodo-2-propynylbutylcarbamate</p> 	<p>分子式 : C₈H₁₂INO₂ CAS : 55406-53-6 既存化 : 2-3456 MW : 281.09 mp : 66°C¹⁾ bp : 不詳 sw : 156mg/L (20°C)¹⁾ 比重 : 1.575¹⁾ logPow : 2.4³⁾</p>

参考文献

- 1) O'Neil, The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals 13th Edition, Merck Co. Inc.(2001)
- 2) Yalkowsky et al., Aquasol Database of Aqueous Solubility Version 5, College of Pharmacy, University of Arizona(1992)
- 3) Hansch et al., Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic and Steric Constants, American Chemical Society (1995)
- 4) U.S.EPA, Ambient Water Quality Criteria Document(1980)
- 5) Tomlin, The Pesticide Manual 10th Edition, The British Crop Protection Council(1994)
- 6) Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics, 81st Edition, CRC Press LLC(2005)
- 7) Clayton et al, Patty's Industrial Hygiene and Toxicology Volumes 2A, 2B and 2C: Toxicology, 3rd Edition, John Wiley Sons(1982)
- 8) Sax, Dangerous Properties of Industrial Materials Volumes 1-3 7th Edition, Van Nostrand Reinhold(1989)
- 9) Chiou et al., Partitioning of organic compounds in octanol-water systems, Environmental Science and Technology, 16, 4-10(1982)
- 10) Lewis, Hawley's Condensed Chemical Dictionary 13rd Edition, John Wiley & Sons(1997)
- 11) Ashford, Ashford's Dictionary of Industrial Chemicals, Wavelength Publications Ltd.(1994)
- 12) Chemicals Inspection and Testing Institute, Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan, Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center(1992)
- 13) Huyskens et al., Solubility of alcohols, phenols and amines in water, Bulletin des Societes Chimiques Belges, 84, 253-262(1975)
- 14) Jayasinghe et al., Determination of Henry's constants of organic compounds of low volatility: methylanilines in methanol-water, Environmental Science and Technology, 26, 2275-2281(1992)
- 15) Verschuere, Handbook of Environmental Data of Organic Chemicals 2nd Edition, Van Nostrand Reinhold Co.(1983)
- 16) U.S. Coast Guard, Department of Transportation, CHRIS - Hazardous Chemical Data Volume II, U.S. Printing Office(1985)
- 17) Geyer et al., Relationship between water solubility of organic chemicals and their bioaccumulation by the alga, Chemosphere, 10, 1307-1313(1981)
- 18) Hand et al., Structure-activity relationships for sorption of linear alkylbenzenesulfonates, Environmental Science and Technology, 21, 370-373(1987)
- 19) Daubert et al., Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals, Data Compilation, Hemisphere Publishing Co.(1989)
- 20) Lyman et al., SRC Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Environmental Behavior of Organic Compounds, McGraw-Hill(1997)
- 21) Suzuki, Development of an automatic estimation system for both the partition coefficient and aqueous solubility, Journal of Computer-Aided Molecular Design, 5, 149-166(1991)
- 22) Prager, Environmental Contaminant Reference Databook Volume 1, Van Nostrand Reinhold Co.(1995)
- 23) Veith et al., Aquatic Toxicology, American Society of Testing Materials, 116-129(1980)
- 24) Stephen et al., Solubilities of Inorganic and Organic Compounds, Pergamon Press(1963)
- 25) International Agency for Research on Cancer(IARC), IARC Monographs on the Evaluation of the Carcinogenic Risk of Chemicals to Man(1972)
- 26) International Programme on Chemical Safety(IPCS), Environmental Health Criteria 162(Brominated Diphenyl Ethers)(1994)
- 27) EU, Diphenyl Ether, Pentabromo Derivative, European Union Risk Assessment Report(2001)
- 28) Kirk-Othmer, Encyclopedia of Chemical Technology 5th Edition, John Wiley & Sons(2004)
- 29) Jurgensen et al., Fate, behavior, and aquatic toxicity of the fungicide IPBC in the Canadian environment, Environmental Toxicology, 15, 201-213(2000)