

## 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

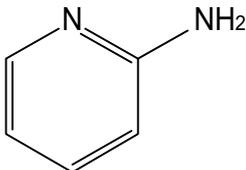
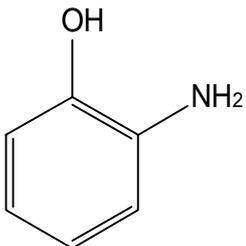
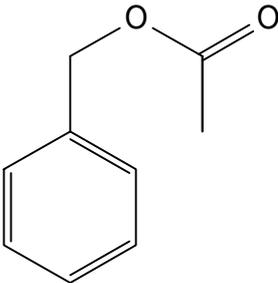
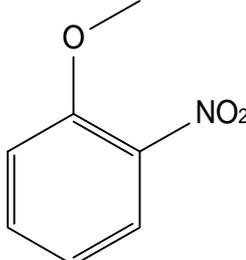
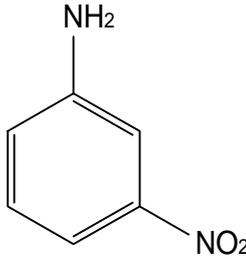
平成21年度の初期環境調査においては、10物質を調査対象物質とした。調査対象物質と調査媒体との組合せは次のとおりである。

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		
			改正前	改正後	水質	底質	大気
[1]	2-アミノピリジン	第二種監視	第二種 4				
[2]	<i>o</i> -アミノフェノール						
[3]	酢酸ベンジル			第二種 20			
[4]	<i>o</i> -ニトロアニソール	第二種監視		第一種 311			
[5]	<i>m</i> -ニトロアニリン	第二種監視 第三種監視	第二種 55	第二種 69			
[6]	ニトロメタン	第二種監視		第一種 317			
[7]	4-ヒドロキシ安息香酸メチル			第一種 334			
[8]	<i>tert</i> -ブチル=2-エチルペルオキシヘキサノアート						
[9]	2- <i>tert</i> -ブチル-5-メチルフェノール	第二種監視 第三種監視		第一種 373			
[10]	4,4'-メチレンビス(2-メチルシクロヘキサミン)	第二種監視 第三種監視	第二種 79	第二種 97			

（注1）「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。

（注2）「化管法指定区分」における「改正前」とは平成20年11月21日の政令改正前の指定を、「改正後」とは同改正後の指定をそれぞれ意味する。

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] 2-アミノピリジン 2-Aminopyridine</p>		<p>分子式 : C<sub>5</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub> CAS : 504-29-0 既存化 : 5-724、9-106 MW : 94.11 mp : 58.1 <sup>1)</sup> bp : 210.6 <sup>1)</sup> sw : 5,400mg/L (25 <sup>2)</sup>) 比重等 : 1.065 (20/4 <sup>3)</sup>) logPow : 0.48 <sup>4)</sup></p>
<p>[2] <i>o</i>-アミノフェノール <i>o</i>-Aminophenol</p>		<p>分子式 : C<sub>6</sub>H<sub>7</sub>NO CAS : 95-55-6 既存化 : 3-675 MW : 109.13 mp : 189.6 ~ 190.2 <sup>1)</sup> bp : 284 (分解) <sup>1)</sup> sw : 0.65% (24 <sup>1)</sup>) 比重等 : 1.3g/cm<sup>3</sup> <sup>5)</sup> logPow : 0.04 <sup>4)</sup></p>
<p>[3] 酢酸ベンジル Benzyl acetate</p>		<p>分子式 : C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub> CAS : 140-11-4 既存化 : 3-1020、3-1045 MW : 150.17 mp : -51 <sup>1)</sup> bp : 213 <sup>1)</sup> sw : 1.50g/kg (25 <sup>6)</sup>) 比重等 : 1.050 (25/4 <sup>1)</sup>) logPow : 1.96 <sup>4)</sup></p>
<p>[4] <i>o</i>-ニトロアニソール <i>o</i>-Nitroanisole</p>		<p>分子式 : C<sub>7</sub>H<sub>7</sub>NO<sub>3</sub> CAS : 91-23-6 既存化 : 3-787 MW : 153.14 mp : 9.4 <sup>1)</sup> bp : 277 <sup>1)</sup> sw : 1.69g/kg (30 <sup>6)</sup>) 比重等 : 1.254 (20/4 <sup>1)</sup>) logPow : 1.73 <sup>4)</sup></p>
<p>[5] <i>m</i>-ニトロアニリン <i>m</i>-Nitroaniline</p>		<p>分子式 : C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub> CAS : 99-09-2 既存化 : 3-392 MW : 138.12 mp : 114 <sup>1)</sup> bp : 不詳 sw : 1g/880mL <sup>1)</sup> 比重等 : 0.9011 (25/4 <sup>1)</sup>) logPow : 1.37 <sup>4)</sup></p>

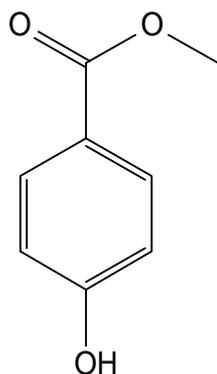
(注) 「CAS」とはCAS登録番号を、「既存化」とは既存化学物質名簿における番号を、「MW」とは分子量を、「mp」とは融点を、「bp」とは沸点を、「sw」とは水への溶解度を、「比重等」とは比重(単位なし)又は密度(単位あり)を、「logPow」とは*n*-オクタノール/水分配係数をそれぞれ意味する。

[6] ニトロメタン  
Nitromethane



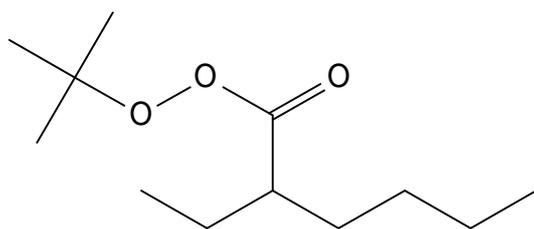
分子式 :  $\text{CH}_3\text{NO}_2$   
CAS : 75-52-5  
既存化 : 2-191  
MW : 61.04  
mp : -29 <sup>1)</sup>  
bp : 101.2 <sup>1)</sup>  
sw : 9.5% (25 <sup>1)</sup>)  
比重等 : 1.1322 (25/4 <sup>1)</sup>)  
logPow : -0.35 <sup>4)</sup>

[7] 4-ヒドロキシ安息香酸メチル  
Methyl 4-hydroxybenzoate



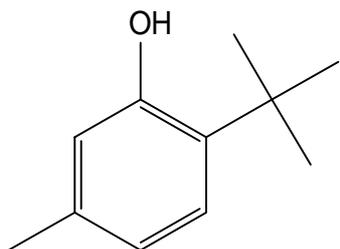
分子式 :  $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_3$   
CAS : 99-76-3  
既存化 : 3-1585  
MW : 152.15  
mp : 131 <sup>1)</sup>  
bp : 270 ~ 280 (分解) <sup>1)</sup>  
sw : 1g/400mL (20 <sup>1)</sup>)  
比重等 : 不詳  
logPow : 1.96 <sup>4)</sup>

[8] *tert*-ブチル=2-エチルペルオキシヘキサノアート  
*tert*-Butyl 2-ethylperoxyhexanoate



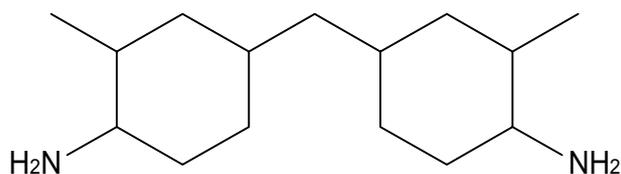
分子式 :  $\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_3$   
CAS : 3006-82-4  
既存化 : 2-687  
MW : 216.32  
mp : <-30 <sup>3)</sup>  
bp : 不詳  
sw : 不詳  
比重等 : 不詳  
logPow : 不詳

[9] 2-*tert*-ブチル-5-メチルフェノール  
2-*tert*-Butyl-5-methylphenol



分子式 :  $\text{C}_{11}\text{H}_{16}\text{O}$   
CAS : 88-60-8  
既存化 : 3-521  
MW : 164.24  
mp : 46.5 <sup>1)</sup>  
bp : 117 (11mmHg) <sup>1)</sup>  
sw : 0.42g/L (25 <sup>7)</sup>)  
比重等 : 0.922g/cm<sup>3</sup> (80 <sup>1)</sup>)  
logPow : 4.11 (25 <sup>7)</sup>)

[10] 4,4'-メチレンビス(2-メチルシクロヘキサンアミン)  
4,4'-Methylenebis(2-methylcyclohexanamine)



分子式 :  $\text{C}_{15}\text{H}_{30}\text{N}_2$   
CAS : 6864-37-5  
既存化 : 4-102  
MW : 238.41  
mp : -7 <sup>8)</sup>  
bp : 342 <sup>8)</sup>  
sw : 3.6g/L (20 <sup>8)</sup>)  
比重等 : 0.944g/cm<sup>3</sup> (20 <sup>8)</sup>)  
logPow : 2.51 (25 <sup>8)</sup>)

#### 参考文献

- 1) O'Neil, The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals 14th Edition, Merck Co. Inc. (2006)
- 2) Howard et al., Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, CRC Press Inc. (1996)
- 3) Kirk-Othmer, Encyclopedia of Chemical Technology 5th Edition, John Wiley & Sons (2004)
- 4) Hansch et al., Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic and Steric Constants, American Chemical Society (1995)
- 5) Ermer et al., Molecular recognition among alcohols and amines: super-tetrahedral crystal architectures of linear diphenol-diamine complexes and aminophenols, Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2, 5, 925-944(1994)
- 6) Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics, 90th Edition, CRC Press LLC (2009)
- 7) OECD, 6-*tert*-Butyl-*m*-cresol, SIDS Initial Assessment Report for 15th SIAM (2002)
- 8) OECD, 2,2'-Dimethyl-4,4'-methylene bis(cyclohexylamine), SIDS Initial Assessment Report for 13th SIAM (2001)