

1. 調査目的

初期環境調査は、環境リスクが懸念される化学物質について、一般環境中で高濃度が予想される地域においてデータを取得することにより、「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。）の指定化学物質の指定、その他化学物質による環境リスクに係る施策について検討する際のばく露の可能性について判断するための基礎資料等とすることを目的としている。

2. 調査対象物質

平成 25 年度の初期環境調査においては、14 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	
		改正前	改正後	改正前	改正後	水質	大気
[1]	クロルマジノン及びその酢酸エステル						
	[1-1] クロルマジノン					○	
	[1-2] 酢酸クロルマジノン					○	
[2]	ジクロロアニリン類						
	[2-1] 2,3-ジクロロアニリン					○	
	[2-2] 2,4-ジクロロアニリン	第三種監視				○	
	[2-3] 2,5-ジクロロアニリン	第三種監視			第一種 156	○	
	[2-4] 2,6-ジクロロアニリン					○	
	[2-5] 3,4-ジクロロアニリン	第三種監視				○	
	[2-6] 3,5-ジクロロアニリン					○	
[3]	1,1-ジクロロエチレン（別名：塩化ビニリデン）	第二種監視		第一種 171	第一種 158		○
[4]	ジナトリウム=4-アミノ-3-[4'-(2,4-ジアミノフェニルアゾ)-1,1'-ビフェニル-4-イルアゾ]-5-ヒドロキシ-6-フェニルアゾ-2,7-ナフタレンジスルホナート（別名：CI ダイレクトブラック 38）	第二種監視		第二種 30	第二種 39	○	
[5]	<i>N,N</i> -ジメチル- <i>n</i> -オクタデシルアミン	第三種監視				○	
[6]	<i>N,N</i> -ジメチルドデシルアミン		優先評価		第一種 223	○	
[7]	2-(チオシアナートメチルチオ)-1,3-ベンゾチアゾール（別名：TCMTB）	第二種監視 第三種監視			第二種 57	○	
[8]	<i>o</i> -テルフェニル				第二種 63	○	
[9]	トリエチルアミン	第二種監視			第一種 277		○
[10]	2,4,6-トリクロロフェノール				第一種 287		○
[11]	ナトリウム=1,1'-ビフェニル-2-オラート			第二種 53	第二種 68	○	
[12]	3-ヒドロキシエストラ-1,3,5(10),7-テトラエン-17-オン（別名：エクイリン）					○	
[13]	4,4'-ビピリジル				第二種 75	○	
[14]	3-(4-メチルベンジリデン)-1,7,7-トリメチルビシクロ[2.2.1]ヘプタン-2-オン					○	

（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）「化審法指定区分」における「改正前」とは平成 21 年 5 月 20 日の法律改正（平成 23 年 4 月 1 日施行）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。

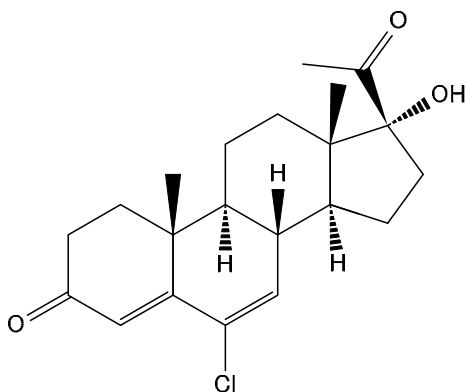
（注 3）「化管法指定区分」における「改正前」とは平成 20 年 11 月 21 日の政令改正前の指定を、「改正後」とは同改正後の指定をそれぞれ意味する。

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。

[1] クロルマジノン及びその酢酸エステル

[1-1] クロルマジノン

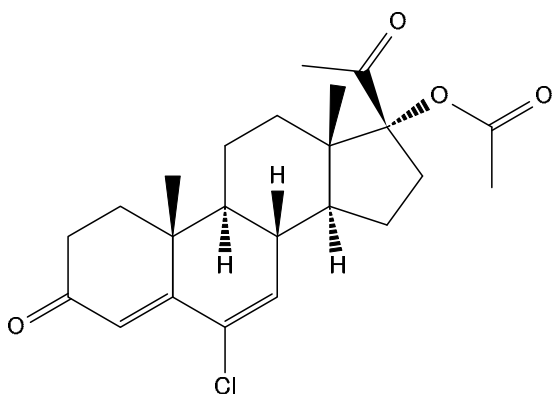
Chlormadinone



分子式 : $C_{21}H_{27}ClO_3$
CAS : 1961-77-9
既存化 : 不詳
MW : 362.89
mp : 不詳
bp : 不詳
sw : 不詳
比重等 : 不詳
logPow : 不詳

[1-2] 酢酸クロルマジノン

Chlormadinone acetate

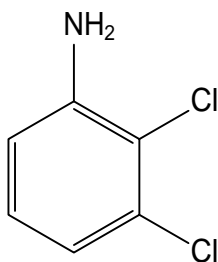


分子式 : $C_{23}H_{29}ClO_4$
CAS : 302-22-7
既存化 : 9-2348
MW : 404.93
mp : 不詳
bp : 不詳
sw : 不詳
比重等 : 不詳
logPow : 不詳

[2] ジクロロアニリン類

[2-1] 2,3-ジクロロアニリン

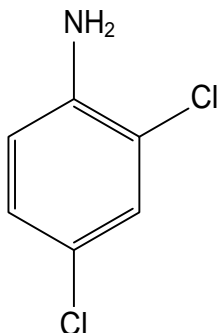
2,3-Dichloroaniline



分子式 : $C_6H_5Cl_2N$
CAS : 608-27-5
既存化 : 3-261
MW : 162.02
mp : $24^{\circ}C$ ¹⁾
bp : $252^{\circ}C$ ¹⁾
sw : 不詳
比重等 : 不詳
logPow : 不詳

[2-2] 2,4-ジクロロアニリン

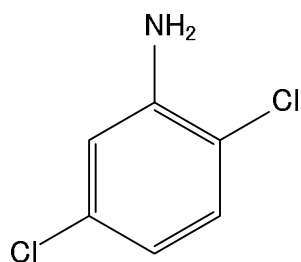
2,4-Dichloroaniline



分子式 : $C_6H_5Cl_2N$
CAS : 554-00-7
既存化 : 3-261
MW : 162.02
mp : $63-64^{\circ}C$ ¹⁾
bp : $245^{\circ}C$ ¹⁾
sw : $620mg/L(60^{\circ}C)$ ²⁾
比重等 : $1.567g/cm^3(20^{\circ}C)$ ¹⁾
logPow : 2.78 ³⁾

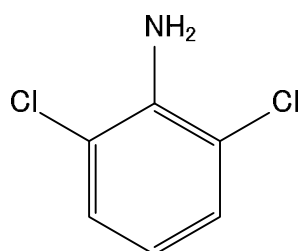
(注) 「CAS」とはCAS登録番号を、「既存化」とは既存化学物質名簿における番号を、「MW」とは分子量を、「mp」とは融点を、「bp」とは沸点を、「sw」とは水への溶解度を、「比重等」とは比重(単位なし)又は密度(単位あり)を、「logPow」とは*n*-オクタノール/水分配係数をそれぞれ意味する。

[2-3] 2,5-ジクロロアニリン
2,5-Dichloroaniline



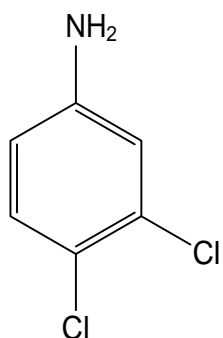
分子式 : $C_6H_5Cl_2N$
CAS : 95-82-9
既存化 : 3-261
MW : 162.02
mp : 44.9-45.1°C ¹⁾
bp : 251°C ¹⁾
sw : 300mg/L (25°C、推定値) ²⁾
比重等 : 1.54g/cm³ ⁴⁾
logPow : 2.75 ⁴⁾

[2-4] 2,6-ジクロロアニリン
2,6-Dichloroaniline



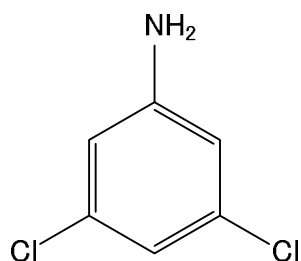
分子式 : $C_6H_5Cl_2N$
CAS : 608-31-1
既存化 : 3-261
MW : 162.02
mp : 39°C ¹⁾
bp : 97°C ⁵⁾
sw : 不詳
比重等 : 不詳
logPow : 不詳

[2-5] 3,4-ジクロロアニリン
3,4-Dichloroaniline



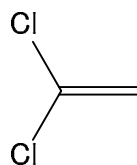
分子式 : $C_6H_5Cl_2N$
CAS : 95-76-1
既存化 : 3-261
MW : 162.02
mp : 71-72°C ⁶⁾
bp : 272°C ⁶⁾
sw : 92mg/L (20°C) ²⁾
比重等 : 1.57g/cm³ ⁷⁾
logPow : 2.69 ⁷⁾

[2-6] 3,5-ジクロロアニリン
3,5-Dichloroaniline



分子式 : $C_6H_5Cl_2N$
CAS : 626-43-7
既存化 : 3-261
MW : 162.02
mp : 52°C ¹⁾
bp : 261°C ¹⁾
sw : 784mg/L (25°C) ⁸⁾
比重等 : 1.58 (20/4°C) ⁹⁾
logPow : 2.90 ¹⁰⁾

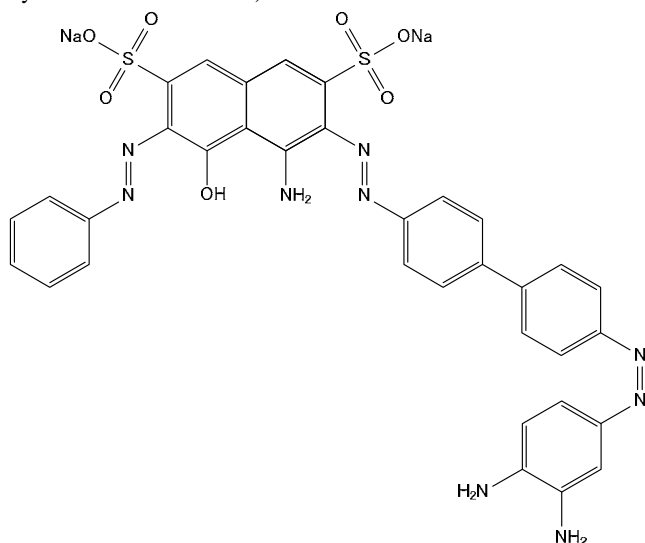
[3] 1,1-ジクロロエチレン (別名: 塩化ビニリデン)
1,1-Dichloroethene (synonym: Vinylidene chloride)



分子式 : $C_2H_2Cl_2$
CAS : 75-35-4
既存化 : 2-103
MW : 96.94
mp : -122.5°C ¹¹⁾
bp : 31.7°C (760mmHg) ¹¹⁾
sw : 3,100mg/L (5°C) ¹⁾
比重等 : 1.2129 (20/4°C) ¹¹⁾
logPow : 2.13 ¹⁾

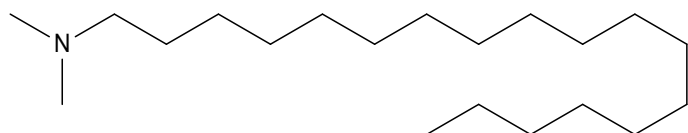
[4] ジナトリウム=4-アミノ-3-[4'-(2,4-ジアミノフェニルアゾ)-1,1'-ビフェニル-4-イルアゾ]-5-ヒドロキシ-6-フェニルアゾ-2,7-ナフタレンジスルホナート (別名 : CI ダイレクトブラック 38)

Disodium 4-amino-3-[4'-(2,4-diaminophenylazo)-1,1'-biphenyl-4-ylazo]-5-hydroxy-6-phenylazo-2,7-naphthalenedisulfonate (synonym: C.I. Direct black 38)



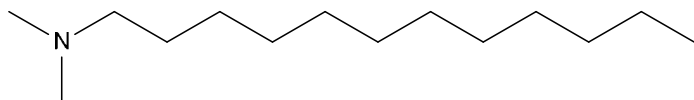
分子式 : $C_{34}H_{25}N_9Na_2O_7S_2$
 CAS : 1937-37-7
 既存化 : 5-1370
 MW : 781.73
 mp : 不詳
 bp : 不詳
 sw : 3,000mg/L (5°C) ¹⁾
 比重等 : 不詳
 logPow : 2.04 (推定値) ²⁾

[5] *N,N*-ジメチル-*n*-オクタデシルアミン
N,N-Dimethyl-*n*-octadecylamine



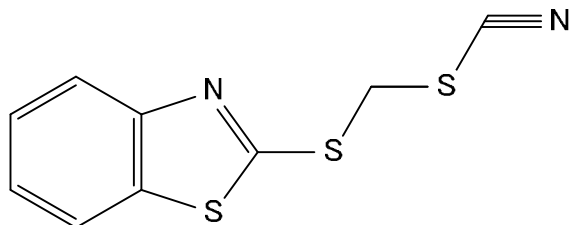
分子式 : $C_{20}H_{43}N$
 CAS : 124-28-7
 既存化 : 2-176
 MW : 297.56
 mp : 22.89°C ⁶⁾
 bp : 194°C (6mmHg) ¹²⁾
 sw : 不詳
 比重等 : 0.80502 (25/4°C、液体) ¹³⁾
 logPow : 不詳

[6] *N,N*-ジメチルドデシルアミン
N,N-Dimethyldodecylamine



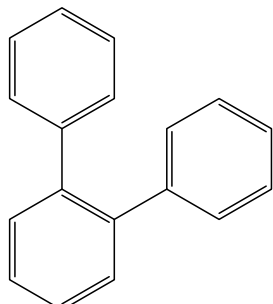
分子式 : $C_{14}H_{31}N$
 CAS : 112-18-5
 既存化 : 2-176
 MW : 213.4
 mp : -17°C ¹²⁾
 bp : 271°C ¹⁴⁾
 sw : 8.6mg/L (25°C) ¹⁵⁾
 比重等 : 0.787g/cm³ ¹⁶⁾
 logPow : 5.5 (計算値) ¹⁶⁾

[7] 2-(チオシアナートメチルチオ)-1,3-ベンゾチアゾール (別名 : TCMTB)
 2-(Thiocyanatomethylthio)-1,3-benzothiazole (synonym: TCMTB)



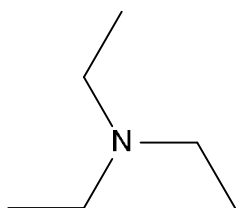
分子式 : $C_9H_6N_2S_3$
 CAS : 21564-17-0
 既存化 : 5-3424
 MW : 238.35
 mp : -10°C ¹⁷⁾
 bp : 120°C ¹⁷⁾
 sw : 0.0033g/100mL ¹⁷⁾
 比重等 : 1.4 ¹⁷⁾
 logPow : 3.3 ¹⁷⁾

[8] *o*-テルフェニル
o-Terphenyl



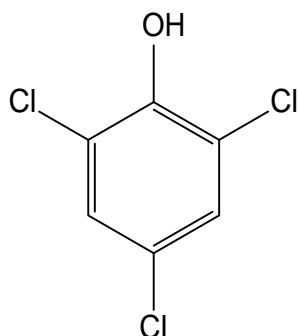
分子式 : $C_{18}H_{14}$
 CAS : 84-15-1
 既存化 : 4-17
 MW : 230.3
 mp : 56.19-56.24°C ¹⁾
 bp : 332°C (760mmHg) ¹⁾
 sw : 1.24mg/L (25°C) ²⁾
 比重等 : 1.1 ¹⁸⁾
 logPow : 5.5 ¹⁸⁾

[9] トリエチルアミン
 Triethylamine



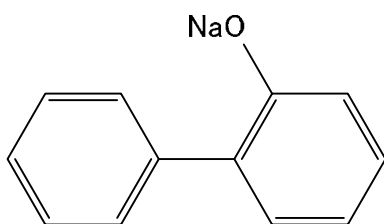
分子式 : $C_6H_{15}N$
 CAS : 121-44-8
 既存化 : 2-141
 MW : 101.19
 mp : -115°C ⁶⁾
 bp : 89-90°C ⁶⁾
 sw : 5.5% (20°C) ¹⁾
 比重等 : 0.7255(25/4°C) ⁶⁾
 logPow : 1.45 ¹⁾

[10] 2,4,6-トリクロロフェノール
 2,4,6-Trichlorophenol



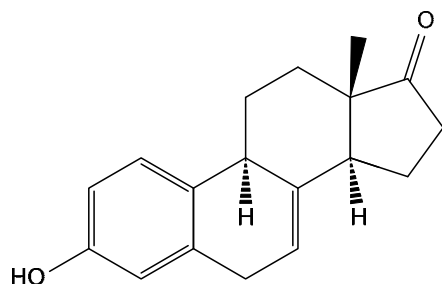
分子式 : $C_6H_3Cl_3O$
 CAS : 88-06-2
 既存化 : 3-931
 MW : 197.45
 mp : 69°C ⁶⁾
 bp : 246°C ⁶⁾
 sw : < 0.1g/100g ³⁾
 比重等 : 1.4901 ⁶⁾
 logPow : 3.87 ¹⁹⁾

[11] ナトリウム=1,1'-ビフェニル-2-オレート
 Sodium (1,1'-biphenyl)-2-olate



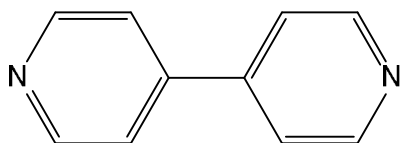
分子式 : $C_{12}H_9NaO$
 CAS : 132-27-4
 既存化 : 4-20
 MW : 192.19
 mp : 不詳
 bp : 不詳
 sw : 1.1kg/L (25°C) ²⁾
 比重等 : 不詳
 logPow : 0.59 (推定値) ²⁾

[12] 3-ヒドロキシエストラ-1,3,5(10),7-テトラエン-17-オン (別名 : エクイリン)
 3-Hydroxyestra-1,3,5(10),7-tetraen-17-one (synonym: Equilin)



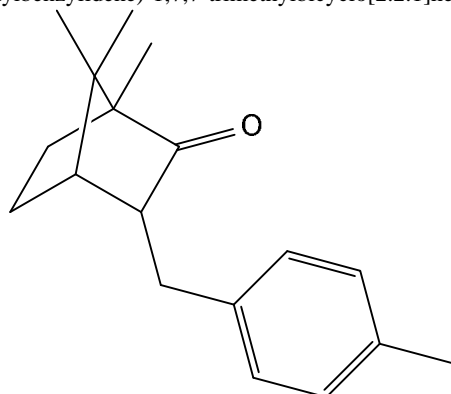
分子式 : $C_{18}H_{20}O_2$
 CAS : 474-86-2
 既存化 : 不詳
 MW : 268.35
 mp : 238-240°C ⁶⁾
 bp : 昇華 (170mmHg) ¹⁾
 sw : やや溶けにくい ⁶⁾
 比重等 : 不詳
 logPow : 不詳

[13] 4,4'-ビピリジル
4,4'-Bipyridyl



分子式 : $C_{10}H_8N_2$
CAS : 553-26-4
既存化 : 5-3723
MW : 156.18
mp : 73°C ¹¹⁾
bp : 304.8°C ¹¹⁾
sw : 4,529mg/L (25°C) ¹⁴⁾
比重等 : 1g/cm³ ¹⁴⁾
logPow : 1.06 ¹⁴⁾

[14] 3-(4-メチルベンジリデン)-1,7,7-トリメチルビスクロ[2.2.1]ヘプタン-2-オン
3-(4-Methylbenzylidene)-1,7,7-trimethylbicyclo[2.2.1]heptan-2-one



分子式 : $C_{18}H_{22}O$
CAS : 36861-47-9
既存化 : 不詳
MW : 254.37
mp : 不詳
bp : 不詳
sw : 不詳
比重等 : 不詳
logPow : 不詳

参考文献

- 1) Lide, D.R.(ed), CRC Handbook of Chemistry and Physics 95th Edition, CRC Press LLC (2014-2015)
- 2) Philip H. Howard, William M. Meylan, Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals (1997)
- 3) IPCS, International Chemical Safety Cards, 2,4-Dichlorobenzeneamine, ICSC0141 (2000)
- 4) IPCS, International Chemical Safety Cards, 2,5-Dichlorobenzeneamine, ICSC0142 (2000)
- 5) 国立医薬品食品衛生研究所 国際化学物質安全性カード (2001)
- 6) Budavari, S.,(Ed), The Merck Index Ver.12:2 (1995)
- 7) IPCS, International Chemical Safety Cards, 3,4-Dichlorobenzeneamine, ICSC0144 (2000)
- 8) web sites ; Data from SRC PhysProp Database
- 9) アクロス試薬カタログ 2004 (2004)
- 10) Albert Leo et.al, Exploring QSAR:Hydrophobic, Electrpnic, and Steroc Constants, Amer Chemical Society(1995)
- 11) O'Neil, The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals 14th Edition, Merck Co. Inc. (2006)
- 12) R.Luckenbach, Beilstein Handbook of Organic Chemistry, J. Chem. Inf. Comput. Sci(1981)
- 13) Journal; Negro; Saïda; NKAKB8; Nippon Kagaku Kaishi; 1973; 397,398.
- 14) International Uniform Chemical Information Database IUCLID Data Set
- 15) PRTR 排出量等算出マニュアル 第 4.1 版 平成 23 年 3 月
- 16) Sigma-Aldrich MSDS
- 17) IPCS, International Chemical Safety Cards, 2-(Thiocyanomethylthio)benzothiazoleipcs, ICSC1161 (1997)
- 18) 国立医薬品食品衛生研究所 国際化学物質安全性カード (2004)
- 19) IPCS, International Chemical Safety Cards, 2,4,6-Trichlorophenol, ICSC1122 (1998)