

1. 調査目的

詳細環境調査は、「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）（以下「化審法」という。）における特定化学物質及び監視化学物質、環境リスク初期評価を実施すべき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18年度の詳細環境調査においては、38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。

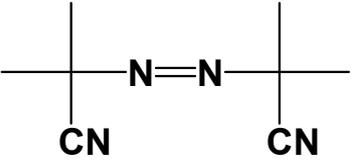
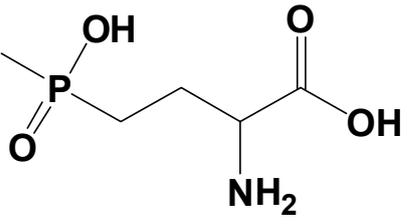
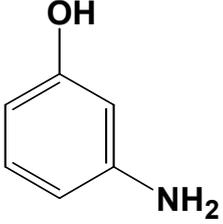
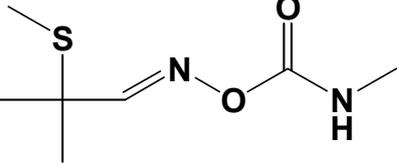
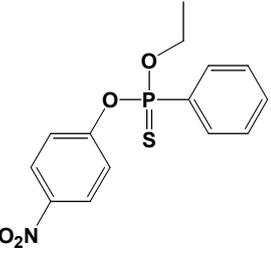
物質調査番号	調査対象物質	化審法指定区分	化管法指定区分	調査媒体				
				水質	底質	生物	大気	食事
[1]	2,2'-アゾビスイソブチロニトリル	第二種監視	第一種	○				
[2]	2-アミノ-4-[ヒドロキシ(メチル)ホスフィノイル]酪酸 (別名：グルホシネート)		第一種	○				
[3]	<i>m</i> -アミノフェノール	第二種監視 第三種監視	第一種	○				
[4]	アルディカーブ			○	○	○		
[5]	<i>O</i> -エチル= <i>O</i> -4-ニトロフェニル=フェニルホスホノチオアート (別名：EPN)	第二種監視 第三種監視	第一種	○				
[6]	<i>N,N'</i> -エチレンビス(ジチオカルバミン酸)及びその塩類 ([6-1]～[6-3]について調査を要望されたことから、これらの構成成分として調査した。)			○		○		
	[6-1] <i>N,N'</i> -エチレンビス(ジチオカルバミン酸)マンガン (別名：マンネブ)		第一種					
	[6-2] <i>N,N'</i> -エチレンビス(ジチオカルバミン酸)マンガンと <i>N,N'</i> -エチレンビス(ジチオカルバミン酸)亜鉛の錯化合物 (別名：マンコゼブ又はマンゼブ)		第一種					
[6-3] ビス(<i>N,N</i> -ジメチルジチオカルバミン酸) <i>N,N'</i> -エチレンビス (チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名：ポリカーバメート)		第一種						
[7]	2,6-キシレノール	第三種監視	第一種	○				
[8]	クロロベンゼン	第三種監視	第一種		○			
[9]	酢酸イソブチル						○	
[10]	ジイソプロピルナフタレン	第一種監視		○				
[11]	<i>N,N</i> -ジエチルチオカルバミン酸 <i>S</i> -4-クロロベンジル (別名：チオベンカルブ又はベンチオカーブ)		第一種	○				
[12]	3-(3,4-ジクロロフェニル)-1,1-ジメチル尿素 (別名：ジウロン又はDCMU)	第二種監視	第一種	○		○		
[13]	2,6-ジクロロベンズニトリル (別名：ジクロベニル又はDBN)	第二種監視	第一種				○	
[14]	2,4-ジ- <i>tert</i> -ブチル-6-(5-クロロ-2 <i>H</i> -1,2,3-ベンゾトリアゾール-2-イル)フェノール	第一種監視		○	○	○		
[15]	<i>N,N</i> -ジメチルジチオカルバミン酸及びその塩類 ([15-1]～[15-2]について調査を要望されたことから、これらの構成成分として調査した。)			○		○		
	[15-1] ビス(<i>N,N</i> -ジメチルジチオカルバミン酸)亜鉛 (別名：ジラム)	第二種監視	第一種					
[15-2] ビス(<i>N,N</i> -ジメチルジチオカルバミン酸) <i>N,N'</i> -エチレンビス (チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名：ポリカーバメート)		第一種						
[16]	<i>N,N</i> -ジメチルドデシルアミン= <i>N</i> -オキシド		第一種		○			
[17]	<i>N,N</i> -ジメチルホルムアミド	第二種監視	第一種		○			
[18]	水素化テルフェニル	第一種監視				○		

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	食事
[19]	チオりん酸 <i>O,O</i> -ジエチル- <i>O</i> -(2-イソプロピル-6-メチル-4-ピリミジニル) (別名：ダイアジノン)	第二種監視 第三種監視	第一種	○				
[20]	チオりん酸 <i>O,O</i> -ジメチル- <i>O</i> -(3-メチル-4-ニトロフェニル) (別名：フェニトロチオン又は MEP)	第二種監視	第一種	○				
[21]	テトラクロロイソフタロニトリル (別名：クロロタロニル又は TPN)	第二種監視	第一種	○				
[22]	テトラヒドロフラン						○	
[23]	トリクロロアセトアルデヒド	第二種監視	第一種	○				
[24]	トリクロロニトロメタン (別名：クロロピクリン)	第二種監視	第一種			○		
[25]	ニトロフェン (別名：NIP)						○	
[26]	1,1-ビス(<i>tert</i> -ブチルジオキシ)-3,3,5-トリメチルシクロヘキサン	第一種監視				○		
[27]	ヒドラジン	第二種監視 第三種監視	第一種			○		○
[28]	1-ブタノール						○	
[29]	フルフラール						○	
[30]	2-(2-ベンゾチアゾリルオキシ)- <i>N</i> -メチルアセトアニリド (別名：メフェナセット)		第一種	○		○		
[31]	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	第一種特定		○	○	○		
[32]	メタクリル酸メチル		第一種	○				
[33]	2-(1-メチルエトキシ)エタノール						○	
[34]	<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 (別名：カルボフラン)	第二種監視 第三種監視	第一種					○
[35]	<i>N</i> -メチルカルバミン酸 2- <i>sec</i> -ブチルフェニル (別名：フェノブカルブ又は BPMC)	第二種監視 第三種監視	第一種	○				
[36]	α -メチルスチレン	第三種監視	第一種		○			
[37]	りん酸ジメチル=2,2-ジクロロビニル (別名：ジクロロボス又は DDVP)	第二種監視 第三種監視	第一種	○				
[38]	りん酸トリブチル	第二種監視	第一種 (注2)	○				

(注1) 「化管法」とは「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)をいう。以下同じ。

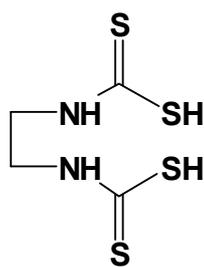
(注2) りん酸トリ-*n*-ブチルに限る。

詳細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] 2,2'-アゾビスイソブチロニトリル 2,2'-Azobisisobutyronitrile</p> 	<p>分子式 : C₈H₁₂N₄ CAS : 78-67-1 既存化 : 2-1531 MW : 164.21 mp : 101~103°C¹⁾ bp : 不詳 sw : 350mg/L (25°C)¹⁾ 比重 : 不詳 logPow : 1.10¹⁾</p>
<p>[2] 2-アミノ-4-[ヒドロキシ(メチル)ホスフィノイル]酪酸 (別名: グルホシネート) 2-Amino-4-[hydroxy(methyl)phosphinoyl]butyric acid (別名: Glufosinate)</p> 	<p>分子式 : C₅H₁₂NO₄P CAS : 51276-47-2 既存化 : 不詳 MW : 181.13 mp : 215°C (アンモニウム塩として)²⁾ bp : 不詳 sw : 易溶 (25°C)³⁾ 比重 : 1.4 (20°C) (アンモニウム塩として)²⁾ logPow : -3.96⁴⁾</p>
<p>[3] <i>m</i>-アミノフェノール <i>m</i>-Aminophenol</p> 	<p>分子式 : C₆H₇NO CAS : 591-27-5 既存化 : 3-675 MW : 109.13 mp : 122~123°C⁵⁾ bp : 164°C (11mmHg)⁶⁾ sw : 27g/L (25°C)⁷⁾ 比重 : 1.20⁸⁾ logPow : 0.21⁹⁾</p>
<p>[4] アルディカーブ Aldicarb</p> 	<p>分子式 : C₇H₁₄N₂O₂S CAS : 116-06-3 既存化 : 不詳 MW : 190.26 mp : 99~100°C⁵⁾ bp : 不詳 sw : 4,930mg/L (20°C)¹⁰⁾ 比重 : 1.20 (25/20°C)⁶⁾ logPow : 1.13⁹⁾</p>
<p>[5] <i>O</i>-エチル-<i>O</i>-4-ニトロフェニルフェニルホスホノチオアート (別名: EPN) <i>O</i>-Ethyl <i>O</i>-4-nitrophenyl phenylphosphonothioate (別名: EPN)</p> 	<p>分子式 : C₁₄H₁₄NO₄PS CAS : 2104-64-5 既存化 : 3-2617 MW : 323.30 mp : 36°C⁶⁾ bp : 215°C (5mmHg)¹⁰⁾ sw : 3.11mg/L (20~25°C)¹¹⁾ 比重 : 1.27 (25°C)⁶⁾ logPow : 4.78¹²⁾</p>

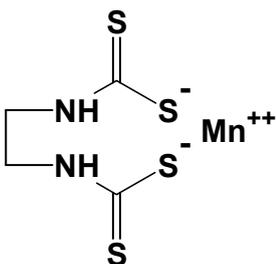
(注) 「CAS」とはCAS登録番号を、「既存化」とは既存化学物質名簿における番号を、「MW」とは分子量を、「mp」とは融点を、「bp」とは沸点を、「sw」とは水への溶解度を、「logPow」とは*n*-オクタノール/水分係数をそれぞれ指す。

[6] *N,N'*-エチレンビス(ジチオカルバミン酸)及びその塩類
N,N'-Ethylenebis(dithiocarbamic acid) and its salt



分子式 : $C_4H_8N_2S_4$
 CAS : 115-54-6 等
 既存化 : 2-1808
 MW : 212.38
 mp : 不詳
 bp : 不詳
 sw : 114g/L (25°C)³⁾
 比重 : 不詳
 logPow : 0.62⁴⁾

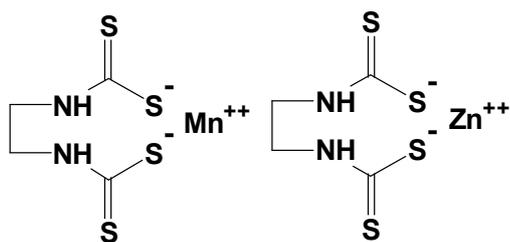
[6-1] *N,N'*-エチレンビス(ジチオカルバミン酸)マンガン (別名 : マネブ)
 Manganese *N,N'*-ethylenebis(dithiocarbamate) (別名 : Maneb)



分子式 : $C_4H_6MnN_2S_4$
 CAS : 12427-38-2
 既存化 : 2-1841
 MW : 289.32
 mp : 192~204°C (分解)¹⁰⁾
 bp : 不詳
 sw : 6mg/L (25°C)¹³⁾
 比重 : 1.92 (25/4°C)¹⁰⁾
 logPow : 0.62⁴⁾

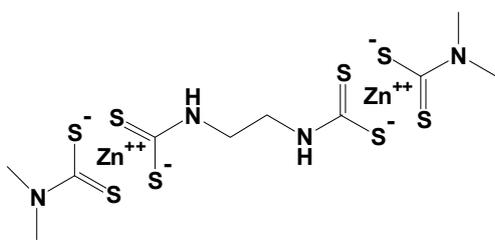
[6-2] *N,N'*-エチレンビス(ジチオカルバミン酸)マンガンと *N,N'*-エチレンビス(ジチオカルバミン酸)亜鉛の錯化合物 (別名 : マンコゼブ又はマンゼブ)

Complex compounds of manganese *N,N'*-ethylenebis(dithiocarbamate) and zinc *N,N'*-ethylenebis(dithiocarbamate) (別名 : Mancozeb)



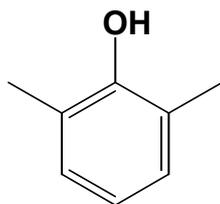
分子式 : $C_4H_6MnN_2S_4/C_4H_6N_2S_4Zn$
 CAS : 8018-01-7
 既存化 : 2-2127
 MW : 289.32/299.79
 mp : 192~204°C (分解)¹⁰⁾
 bp : 不詳
 sw : 6.2mg/L (25°C)¹⁰⁾
 比重 : 不詳
 logPow : 1.33¹⁰⁾

[6-3] ビス(*N,N*-ジメチルジチオカルバミン酸)*N,N'*-エチレンビス(チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名 : ポリカーバメート)
N,N'-Ethylenebis(thiocarbamoylthiozinc) bis(*N,N*-dimethyldithiocarbamate) (別名 : Polycarbamate)

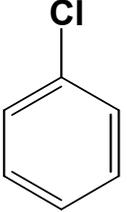
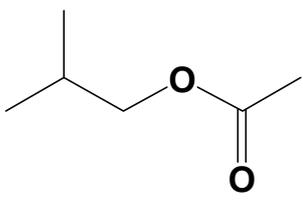
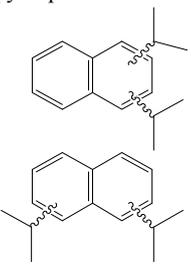
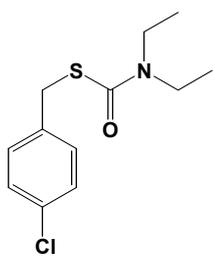
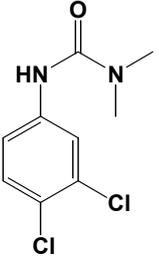


分子式 : $C_{10}H_{18}N_4S_8Zn_2$
 CAS : 64440-88-6
 既存化 : 2-1848
 MW : 581.61
 mp : 不詳
 bp : 不詳
 sw : 不詳
 比重 : 不詳
 logPow : 不詳

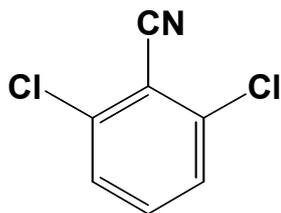
[7] 2,6-キシレノール
 2,6-Xylenol



分子式 : $C_8H_{10}O$
 CAS : 576-26-1
 既存化 : 3-521、4-57
 MW : 122.16
 mp : 49°C⁵⁾
 bp : 203°C⁵⁾
 sw : 6,050mg/L (25°C)⁷⁾
 比重 : 1.13⁵⁾
 logPow : 2.36⁹⁾

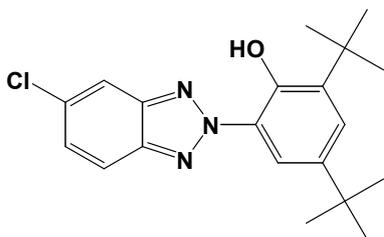
<p>[8] クロロベンゼン Chlorobenzene</p> 	<p>分子式 : C₆H₅Cl CAS : 108-90-7 既存化 : 3-31 MW : 112.56 mp : -45.2°C⁶⁾ bp : 131.7°C⁶⁾ sw : 498mg/L (25°C)¹⁴⁾ 比重 : 1.11 (20°C)⁶⁾ logPow : 2.89⁹⁾</p>
<p>[9] 酢酸イソブチル Isobutyl acetate</p> 	<p>分子式 : C₆H₁₂O₂ CAS : 110-19-0 既存化 : 2-731 MW : 116.16 mp : -98.8°C⁶⁾ bp : 116.5°C⁶⁾ sw : 6,300mg/L (25°C)⁷⁾ 比重 : 0.871 (20/4°C)⁶⁾ logPow : 1.78⁹⁾</p>
<p>[10] ジイソプロピルナフタレン Diisopropylnaphthalene</p> 	<p>分子式 : C₁₆H₂₀ CAS : 38640-62-9 既存化 : 4-961 MW : 212.33 mp : 不詳 bp : 290~299°C¹⁾ sw : 0.11mg/L (25°C)¹⁵⁾ 比重 : 0.96 (25°C)⁶⁾ logPow : 6.08⁴⁾</p>
<p>[11] <i>N,N</i>-ジエチルチオカルバミン酸 <i>S</i>-4-クロロベンジル (別名 : チオベンカルブ又はベンチオカーブ) <i>S</i>-4-Chlorobenzyl <i>N,N</i>-diethylthiocarbamate (別名 : Thiobencarb)</p> 	<p>分子式 : C₁₂H₁₆ClNOS CAS : 28249-77-6 既存化 : 不詳 MW : 257.78 mp : 3.3°C¹⁰⁾ bp : 126~129°C (0.0008mmHg)⁶⁾ sw : 28mg/L (25°C)¹³⁾ 比重 : 1.15~1.18 (20°C)¹⁰⁾ logPow : 3.40⁹⁾</p>
<p>[12] 3-(3,4-ジクロロフェニル)-1,1-ジメチル尿素 (別名 : ジウロン又は DCMU) 3-(3,4-Dichlorophenyl)-1,1-dimethylurea (別名 : Diuron or DCMU)</p> 	<p>分子式 : C₉H₁₀Cl₂N₂O CAS : 330-54-1 既存化 : 3-2194 MW : 233.09 mp : 158~159°C⁵⁾ bp : 180~190°C (分解)²⁾ sw : 36.4mg/L (25°C)¹⁰⁾ 比重 : 不詳 logPow : 2.68⁹⁾</p>

[13] 2,6-ジクロロベンズニトリル (別名:ジクロベニル又はDBN)
2,6-Dichlorobenzonitrile (別名: Dichlobenil)



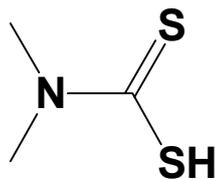
分子式: $C_7H_3Cl_2N$
CAS: 1194-65-6
既存化: 3-4103
MW: 172.01
mp: 144~145°C
bp: 270°C¹⁰⁾
sw: 14.6mg/L (20°C)¹⁰⁾
比重: 不詳
logPow: 2.74⁹⁾

[14] 2,4-ジ-*tert*-ブチル-6-(5-クロロ-2*H*-1,2,3-ベンゾトリアゾール-2-イル)フェノール
2,4-Di-*tert*-butyl-6-(5-chloro-2*H*-1,2,3-benzotriazol-2-yl)phenol



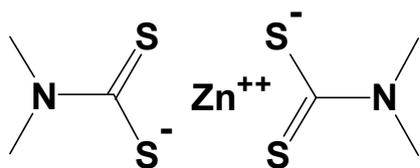
分子式: $C_{20}H_{24}ClN_3O$
CAS: 3864-99-1
既存化: 5-3581、5-3605
MW: 357.88
mp: 不詳
bp: 不詳
sw: 不詳
比重: 不詳
logPow: 不詳

[15] *N,N*-ジメチルジチオカルバミン酸及びその塩類
N,N-Dimethyldithiocarbamic acid and its salt



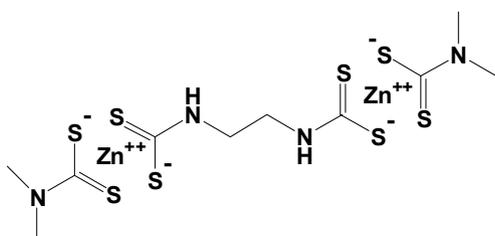
分子式: $C_3H_7NS_2$
CAS: 79-45-8 等
既存化: 2-1798
MW: 121.22
mp: 不詳
bp: 不詳
sw: 不詳
比重: 不詳
logPow: 不詳

[15-1] ビス(*N,N*-ジメチルジチオカルバミン酸)亜鉛 (別名:ジラム)
Zinc bis(*N,N*-dimethyldithiocarbamate) (別名: Ziram)

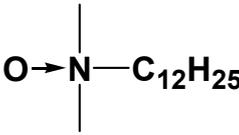
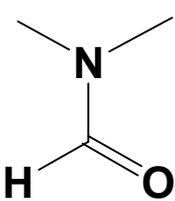
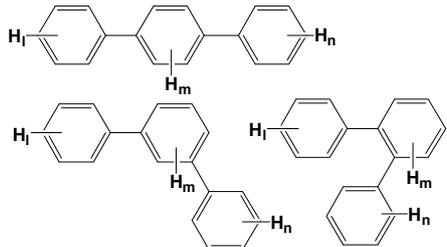
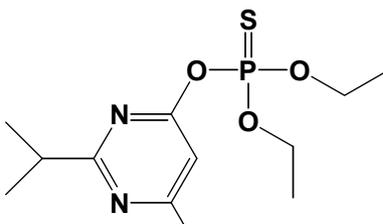
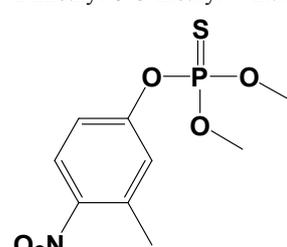


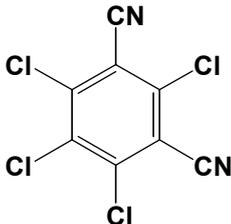
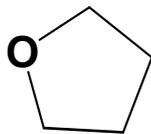
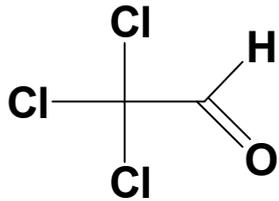
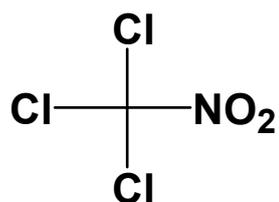
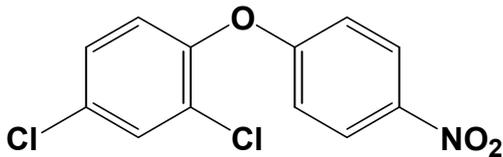
分子式: $C_6H_{12}N_2S_4Zn$
CAS: 137-30-4
既存化: 2-1833、9-607
MW: 305.84
mp: 249²⁶⁾
bp: 不詳
sw: 65mg/L (25°C)²⁾
比重: 1.66 (25/4°C)²⁷⁾
logPow: 1.23¹⁰⁾

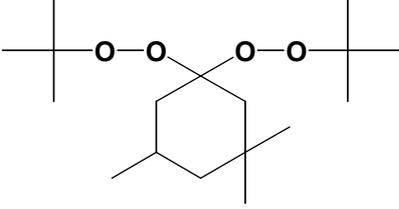
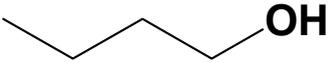
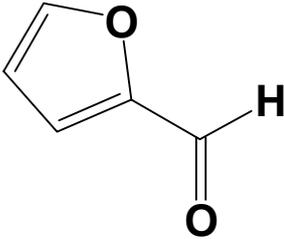
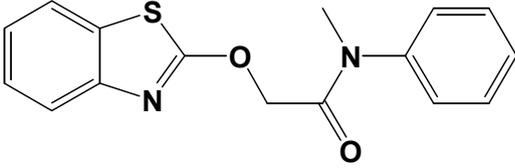
[15-2] ビス(*N,N*-ジメチルジチオカルバミン酸)*N,N'*-エチレンビス(チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名:ポリカーバメート)
N,N'-Ethylenebis(thiocarbamoylthiozinc) bis(*N,N*-dimethyldithiocarbamate) (別名: Polycarbamate)

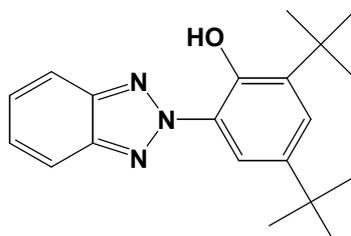
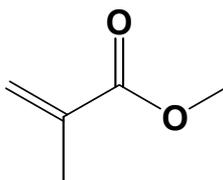
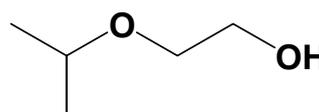
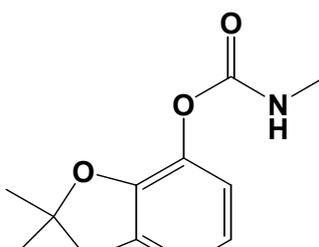
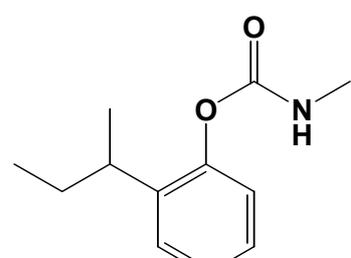


分子式: $C_{10}H_{18}N_4S_8Zn_2$
CAS: 64440-88-6
既存化: 2-1848
MW: 581.61
mp: 不詳
bp: 不詳
sw: 不詳
比重: 不詳
logPow: 不詳

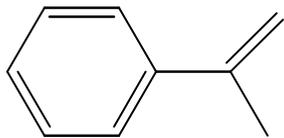
<p>[16] <i>N,N</i>-ジメチルドデシルアミン=<i>N</i>-オキシド <i>N,N</i>-Dimethyldodecylamine <i>N</i>-oxide</p> 	<p>分子式 : C₁₄H₃₁NO CAS : 1643-20-5 既存化 : 2-198 MW : 229.40 mp : 132~133°C¹⁶⁾ bp : 不詳 sw : 190g/L (25°C)¹⁷⁾ 比重 : 不詳 logPow : 4.67⁴⁾</p>
<p>[17] <i>N,N</i>-ジメチルホルムアミド <i>N,N</i>-Dimethylformamide</p> 	<p>分子式 : C₃H₇NO CAS : 68-12-2 既存化 : 2-680 MW : 73.09 mp : -61°C⁵⁾ bp : 153°C⁵⁾ sw : 易溶⁵⁾ 比重 : 0.945 (20/4°C)⁵⁾ logPow : -1.01⁹⁾</p>
<p>[18] 水素化テルフェニル Hydrogenated terphenyl</p>  <p>$l+m+n=1\sim 14$</p>	<p>分子式 : C₁₈H_(14+i) (i = l+m+n = 1~14) CAS : 61788-32-7 既存化 : 4-41 MW : 232.32~248.45 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>[19] チオりん酸 <i>O,O</i>-ジエチル-<i>O</i>-(2-イソプロピル-6-メチル-4-ピリミジニル) (別名 : ダイアジノン) <i>O,O</i>-Diethyl <i>O</i>-2-isopropyl-6-methyl-4-pyrimidinyl phosphorothioate (別名 : Diazinon)</p> 	<p>分子式 : C₁₂H₂₁N₂O₃PS CAS : 333-41-5 既存化 : 5-923 MW : 304.35 mp : <25°C⁵⁾ bp : 83~84°C (0.002mmHg)⁵⁾ sw : 40mg/L (25°C)¹⁸⁾ 比重 : 1.12 (20/4°C)⁵⁾ logPow : 3.81⁹⁾</p>
<p>[20] チオりん酸 <i>O,O</i>-ジメチル-<i>O</i>-(3-メチル-4-ニトロフェニル) (別名 : フェニトロチオン又は MEP) <i>O,O</i>-Dimethyl <i>O</i>-3-methyl-4-nitrophenyl phosphorothioate (別名 : Fenitrothion or MEP)</p> 	<p>分子式 : C₉H₁₂NO₃PS CAS : 122-14-5 既存化 : 3-2616 MW : 277.23 mp : 3.4°C¹⁹⁾ bp : 118°C (0.05mmHg)⁵⁾ sw : 38mg/L (25°C)²⁰⁾ 比重 : 1.32 (20/4°C)⁵⁾ logPow : 3.30⁹⁾</p>

<p>[21] テトラクロロイソフタルニトリル (別名: クロロタロニル又はTPN) Tetrachloroisophthalonitrile (別名: Chlorothalonil or TPN)</p> 	<p>分子式: $C_8Cl_4N_2$ CAS: 1897-45-6 既存化: 3-1805 MW: 265.91 mp: $250\sim 251^{\circ}C^{10)}$ bp: $350^{\circ}C^{10)}$ sw: $0.81mg/L (25^{\circ}C)^{10)}$ 比重: $1.8 (25/4^{\circ}C)^{10)}$ logPow: $3.05^{21)}$</p>
<p>[22] テトラヒドロフラン Tetrahydrofuran</p> 	<p>分子式: C_4H_8O CAS: 109-99-9 既存化: 5-53 MW: 72.11 mp: $-108.3^{\circ}C^6)$ bp: $65^{\circ}C^6)$ sw: 易溶 ($20^{\circ}C$)²²⁾ 比重: $0.889 (20/4^{\circ}C)^6)$ logPow: $0.46^9)$</p>
<p>[23] トリクロロアセトアルデヒド Trichloroacetaldehyde</p> 	<p>分子式: C_2HCl_3O CAS: 75-87-6 既存化: 2-528 MW: 147.39 mp: $-57.5^{\circ}C^5)$ bp: $97.8^{\circ}C^5)$ sw: 易溶 ($25^{\circ}C$)¹²⁾ 比重: $1.51 (20/4^{\circ}C)^6)$ logPow: $0.99^9)$</p>
<p>[24] トリクロロニトロメタン (別名: クロロピクリン) Trichloronitromethane (別名: Chloropicrin)</p> 	<p>分子式: CCl_3NO_2 CAS: 76-06-2 既存化: 2-199 MW: 164.38 mp: $-64^{\circ}C^5)$ bp: $112^{\circ}C^5)$ sw: $1,620mg/L (25^{\circ}C)^7)$ 比重: $1.66 (20/4^{\circ}C)^5)$ logPow: $2.09^9)$</p>
<p>[25] ニトロフェン (別名: NIP) Nitrofen (別名: NIP)</p> 	<p>分子式: $C_{12}H_7Cl_2NO_3$ CAS: 1836-75-5 既存化: 3-658 MW: 284.09 mp: $70\sim 71^{\circ}C^{23)}$ bp: 不詳 sw: $1mg/L (22^{\circ}C)^7)$ 比重: $1.3^{24)}$ logPow: $4.64^{25)}$</p>

<p>[26] 1,1-ビス(<i>tert</i>-ブチルジオキシ)-3,3,5-トリメチルシクロヘキサン 1,1-Bis(<i>tert</i>-butyldioxy)-3,3,5-trimethylcyclohexane</p> 	<p>分子式 : C₁₇H₃₄O₄ CAS : 6731-36-8 既存化 : 3-2341 MW : 302.45 mp : -30°C⁶⁾ bp : 63°C⁶⁾ sw : 0.6mg/L¹²⁾ 比重 : 不詳 logPow : 6.53¹²⁾</p>
<p>[27] ヒドラジン Hydrazine</p> <p>H₂N—NH₂</p>	<p>分子式 : H₄N₂ CAS : 302-01-2 既存化 : 1-374 MW : 32.05 mp : 2.0°C⁵⁾ bp : 113.5°C⁵⁾ sw : 易溶²⁸⁾ 比重 : 1.00 (25/4°C)⁵⁾ logPow : -2.07⁹⁾</p>
<p>[28] 1-ブタノール 1-Butanol</p> 	<p>分子式 : C₄H₁₀O CAS : 71-36-3 既存化 : 2-3049 MW : 74.12 mp : -89.8°C⁶⁾ bp : 117.7°C⁶⁾ sw : 63.2g/L (25°C)²⁹⁾ 比重 : 0.810 (20/4°C)⁶⁾ logPow : 0.88⁹⁾</p>
<p>[29] フルフラール Furfural</p> 	<p>分子式 : C₅H₄O₂ CAS : 98-01-1 既存化 : 5-40 MW : 96.08 mp : -38.1°C⁶⁾ bp : 161.7°C⁶⁾ sw : 74.1g/L (25°C)⁷⁾ 比重 : 1.16 (25/4°C)⁶⁾ logPow : 0.41⁹⁾</p>
<p>[30] 2-(2-ベンゾチアゾリルオキシ)-<i>N</i>-メチルアセトアニリド (別名：メフェナセツト) 2-(2-Benzothiazolyloxy)-<i>N</i>-methylacetanilide (別名：Mefenacet)</p> 	<p>分子式 : C₁₆H₁₄N₂O₂S CAS : 73250-68-7 既存化 : 不詳 MW : 298.36 mp : 134.8°C⁵⁾ bp : 不詳 sw : 4mg/L (20°C)²⁰⁾ 比重 : 不詳 logPow : 3.23¹⁰⁾</p>

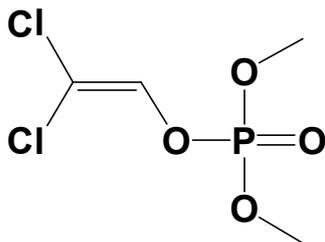
<p>[31] 2-(2<i>H</i>-1,2,3-ベンゾトリアゾール-2-イル)-4,6-ジ-<i>tert</i>-ブチルフェノール 2-(2<i>H</i>-1,2,3-Benzotriazol-2-yl)-4,6-di-<i>tert</i>-butylphenol</p> 	<p>分子式 : C₂₀H₂₅N₃O CAS : 3846-71-7 既存化 : 5-3580、5-3604 MW : 323.43 mp : 不詳 bp : 不詳 sw : 不詳 比重 : 不詳 logPow : 6.23⁹⁾</p>
<p>[32] メタクリル酸メチル Methyl methacrylate</p> 	<p>分子式 : C₅H₈O₂ CAS : 80-62-6 既存化 : 2-1036 MW : 100.12 mp : -48°C⁶⁾ bp : 105.5°C⁶⁾ sw : 15.9mg/L (25°C) ⁷⁾ 比重 : 0.944 (20/4°C) ⁶⁾ logPow : 1.38⁹⁾</p>
<p>[33] 2-(1-メチルエトキシ)エタノール 2-(1-Methylethoxy)ethanol</p> 	<p>分子式 : C₅H₁₂O₂ CAS : 109-59-1 既存化 : 2-410、2-2424 MW : 104.15 mp : 不詳 bp : 145°C⁶⁾ sw : 易溶⁶⁾ 比重 : 0.903 (20/4°C) ⁶⁾ logPow : 0.05⁹⁾</p>
<p>[34] <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 (別名 : カルボフラン) 2,3-Dihydro-2,2-dimethyl-7-benzo[b]furanyl <i>N</i>-methylcarbamate (別名 : Carbofuran)</p> 	<p>分子式 : C₁₂H₁₅NO₃ CAS : 1563-66-2 既存化 : 5-5540 MW : 221.25 mp : 151°C⁶⁾ bp : 不詳 sw : 320mg/L (25°C) ¹⁸⁾ 比重 : 1.18 (20°C) ⁶⁾ logPow : 2.32⁹⁾</p>
<p>[35] <i>N</i>-メチルカルバミン酸 2-<i>sec</i>-ブチルフェニル (別名 : フェノブカルブ又は BPMC) 2-<i>sec</i>-Butylphenyl <i>N</i>-methylcarbamate; (別名 : Fenobucarb or BPMC)</p> 	<p>分子式 : C₁₂H₁₇NO₂ CAS : 3766-81-2 既存化 : 3-2211 MW : 207.27 mp : 32~33°C¹⁰⁾ bp : 60~65°C³⁰⁾ sw : 420mg/L (20°C) ¹⁰⁾ 比重 : 不詳 logPow : 2.78⁹⁾</p>

[36] α -メチルスチレン
 α -Methylstyrene



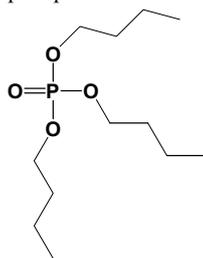
分子式 : C_9H_{10}
CAS : 98-83-9
既存化 : 3-5、3-8
MW : 118.18
mp : $-23.2^{\circ}C^{(6)}$
bp : $165.4^{\circ}C^{(6)}$
sw : $116mg/L (25^{\circ}C)^{(7)}$
比重 : $0.911 (20/4^{\circ}C)^{(6)}$
logPow : $3.48^{(9)}$

[37] リン酸ジメチル=2,2-ジクロロビニル (別名 : ジクロロボス又はDDVP)
Dimethyl 2,2-dichlorovinyl phosphate (別名 : Dichlorvos or DDVP)



分子式 : $C_4H_7Cl_2O_4P$
CAS : 62-73-7
既存化 : 2-3224
MW : 220.98
mp : $<-60^{\circ}C^{(26)}$
bp : $140^{\circ}C (20mmHg)^{(31)}$
sw : $8g/L (20^{\circ}C)^{(2)}$
比重 : $1.42 (25/4^{\circ}C)^{(6)}$
logPow : $1.47^{(32)}$

[38] リン酸トリブチル
Tributyl phosphate



分子式 : $C_{12}H_{27}O_4P$
CAS : 126-73-8
既存化 : 2-2021
MW : 266.31
mp : $<-80^{\circ}C^{(33)}$
bp : $289^{\circ}C^{(6)}$
sw : $280mg/L (25^{\circ}C)^{(34)}$
比重 : $0.973^{(6)}$
logPow : $4.00^{(9)}$

参考文献

- 1) OECD, 2,2'-Azobis-(2-isobutyronitrile), SIDS Initial Assessment Report for 9th SIAM(1999)
- 2) Ahrens, Herbicide Handbook of the Weed Science Society of America 7th edition, Weed Science Society of America(1994)
- 3) Meylan et al., Improved method for estimating water solubility from octanol/water partition coefficient, Environmental Toxicological Chemistry, 15, 100-106(1996)
- 4) Meylan et al., Atom/fragment contribution method for estimating octanol-water partition coefficients, Journal of Pharmacological Sciences, 84, 83-92(1995)
- 5) O'Neil, The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals 13th Edition, Merck Co. Inc.(2001)
- 6) Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics, 81st Edition, CRC Press LLC(2005)
- 7) Yalkowsky et al., Aquasol Database of Aqueous Solubility Version 5, College of Pharmacy, University of Arizona(1992)
- 8) Kirk-Othmer, Encyclopedia of Chemical Technology 5th Edition, John Wiley & Sons(2004)
- 9) Hansch et al., Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic and Steric Constants, American Chemical Society(1995)
- 10) Tomlin, The Pesticide Manual 13th Edition, The British Crop Protection Council(2004-2005)
- 11) Kanazawa et al., Prediction of biological concentration potential of pesticides in aquatic organisms, Review of Plant Protection Research, 13, 27-36(1980)
- 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) Wauchope et al., The SCS/ARD/CES pesticides properties database for environmental decision-making, Reviews of Environmental Contamination and Toxicology, 123, 1-36(1991)
- 14) Horvath et al., IUPAC-NIST solubility data series 67. Halogenated ethanes and ethenes with water, Journal of Physical and Chemical Reference Data, 128, 395-623(1999)
- 15) Addison et al., The predicted environmental distribution of some PCB replacements, Chemosphere, 12, 827-834 (1983)
- 16) Howard et al., Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, CRC Press Inc.(1997)
- 17) Brown et al., Research program on hazard priority ranking of manufactured chemicals, Stanford Research Institute(1975)
- 18) Sharom et al., Behavior of 12 insecticides in soil and aqueous suspensions of soil and sediment, Water Research, 14, 1095-1100(1980)
- 19) Moses, Farm Chemicals Handbook, Meister Publishing Co.(1999)
- 20) Shiu et al., Solubilities of pesticide chemicals in water Part II: data compilation, Reviews of Environmental Contamination and Toxicology, 116, 15-187(1990)
- 21) Krawchuck et al., Movement of pesticides to ground water in an irrigated soil, Water Pollution Research Journal of Canada, 22, 129-146(1987)
- 22) Riddick et al., Techniques of Chemistry 4th Edition, John Wiley & Sons(1985-1986)
- 23) Kearney et al., Herbicides: Chemistry, Degradation and Mode of Action 2nd Edition, Marcel Dekker Inc.(1975)
- 24) Spencer, Guide to the Chemicals Used in Crop Protection 7th edition, Information Canada(1982)
- 25) Sangster, LOGKOW Databook, Sangster Research Laboratory(1994)
- 26) Verschueren, Handbook of Environmental Data of Organic Chemicals 2nd Edition, Van Nostrand Reinhold Co.(1983)
- 27) Gunther et al., Reported solubilities of 738 pesticide chemicals in water, Research Reviews, 20, 1-148(1968)
- 28) Amoores et al., Odor as an aid to chemical safety: Odor thresholds compared with threshold limit values and volatilities for 214 industrial chemicals in air and water dilution, Journal of Applied Toxicology, 3, 272-290(1983)
- 29) Tewari et al., Calculation aqueous solubility of organic compounds, Journal of Research of the National Bureau of Standards. Sect. A, Physics and Chemistry, 87, 155-158(1992)
- 30) Kulkarni et al., Contra-thermodynamic trans-esterification of carbamates by counter-attack strategy, Tetrahedron, 47, 1249-1256(1991)
- 31) United States Department of Agriculture, Agricultural Research Service, Pesticide Properties Database(2007)
- 32) Bowman et al., Determination of octanol-water partitioning coefficients (Kow) of 61 organophosphorus and carbamate insecticides and their relationship to respective water solubility (s) values, Journal of Environmental Science and Health Part B, 667-683(1983)
- 33) Sax, Dangerous Properties of Industrial Materials Volumes 1-3 7th Edition, Van Nostrand Reinhold(1989)
- 34) Saeger et al., Environmental fate of selected phosphate esters, Environmental Science and Technology, 13, 840-844(1979)