

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

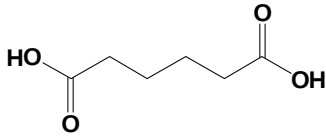
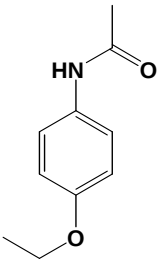
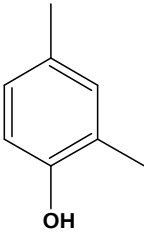
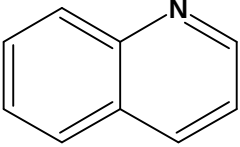
平成 19 年度の初期環境調査においては、27 物質を調査対象物質とした。調査対象物質と調査媒体との組合せは次のとおりである。

物質 調査 番号	調査対象物質	化審法 指定区分	化管法指定区分と政令番号		調査媒体		
			(現行)	(新規)	水 質	底 質	大 気
[1]	アジピン酸						○
[2]	エチレンイミン		第一種 41	第一種 55			○
[3]	4'-エトキシアセトアニリド（別名：フェナセチン）	第二種監視	第一種 52				○
[4]	2,4-キシレノール		第二種 17	第一種 78	○		
[5]	キノリン			第一種 81	○		
[6]	5-クロロ-N-{2-[4-(2-エトキシエチル)-2,3-ジメチルフェノキシ]エチル}-6-エチルピリミジン-4-アミン（別名：ピリミジフェン）		第二種 19				○
[7]	1-クロロナフタレン	第三種監視	第二種 20	第二種 19			○
[8]	2-クロロニトロベンゼン			第一種 112	○		
[9]	サリチルアルデヒド		第一種 104	第一種 136	○		
[10]	2,6-ジニトロトルエン	第二種監視 第三種監視	第一種 157	第一種 200	○		
[11]	m-ジニトロベンゼン	第二種監視	第二種 35	第二種 43	○		
[12]	ジベンジルエーテル（別名：[(ベンジルオキシ)メチル]ベンゼン）	第三種監視	第二種 41	第二種 49	○	○	
[13]	ジメチル=4,4'-(o-フェニレン)ビス(3-チオアロファナート)（別名：チオファネートメチル）			第一種 229	○		
[14]	テレフタル酸ジメチル		第一種 206	第一種 271			○
[15]	二硝酸プロピレン		第二種 54				○
[16]	o-ニトロアニリン			第一種 312	○		
[17]	m-ニトロアニリン	第二種監視	第二種 55	第二種 69	○		
[18]	バナジウム及びその化合物（バナジウムとして）				○		
[19]	フェナントレン		第二種 58		○	○	
[20]	フェニルオキシラン（別名：スチレンオキシド）		第一種 261	第一種 344	○		
[21]	フタル酸ジメチル				○	○	
[22]	ベンジルアルコール						○
[23]	メチルヒドラジン	第二種監視	第二種 74	第二種 93	○		
[24]	2-メチル-1,1'-ビフェニル-3-イルメチル=(Z)-3-(2-クロロ-3,3,3-トリフルオロ-1-プロペニル)-2,2-ジメチルシクロプロパンカルボキシラート（別名：ビフェントリン）	第二種監視	第二種 75	第二種 94	○		
[25]	2-(1-メチルプロピル)-4,6-ジニトロフェノール	第二種監視 第三種監視	第一種 339	第一種 441			○
[26]	メルカプト酢酸		第一種 345		○		
[27]	りん酸トリフェニル			第一種 461			○

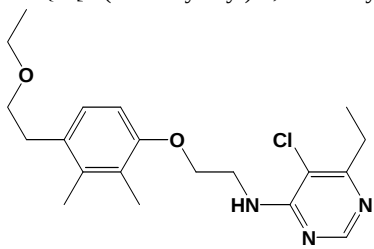
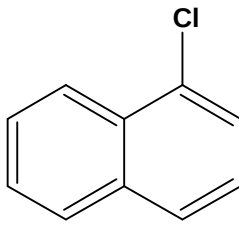
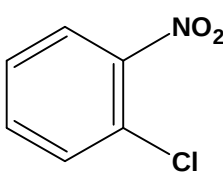
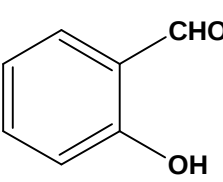
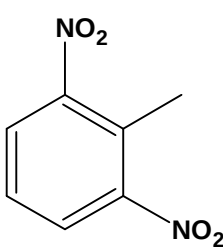
（注 1）「化審法」とは「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律」（昭和 48 年法律第 117 号）をいう。以下同じ。

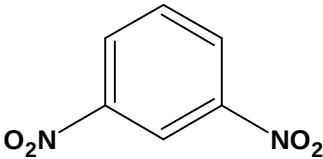
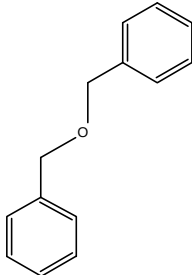
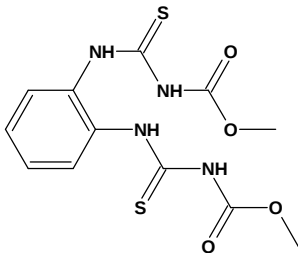
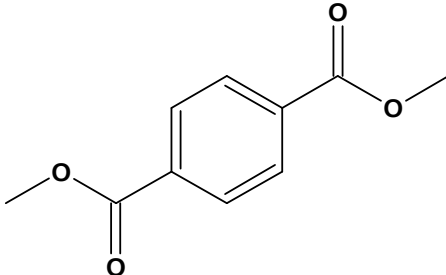
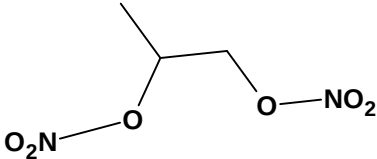
（注 2）「化管法」とは「特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律」（平成 11 年法律第 86 号）を言う。また、「現行」とは「特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律施行令」（平成 12 年 3 月 30 日施行）で指定されている対象物質、「新規」とは「特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律施行令の一部を改正する政令」（平成 21 年 10 月 1 日施行）で指定されている対象物質を指す。以下同じ。

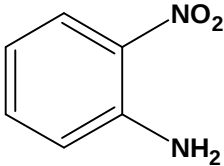
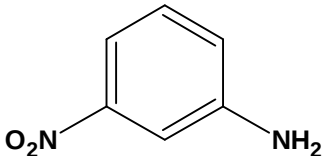
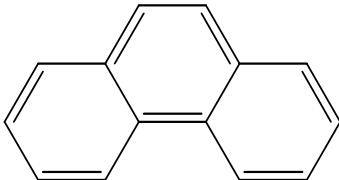
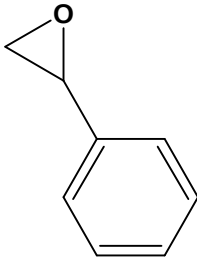
初期環境調査の調査対象物質の物理化学的性状は次のとおりである。

[1] アジピン酸 Adipic acid		分子式 : $C_6H_{10}O_4$ CAS : 124-04-9 既存化 : 2-858 MW : 146.14 mp : $152^{\circ}C^{1)}$ bp : $337.5^{\circ}C^{1)}$ sw : $15g/L (15^{\circ}C)^{1)}$ 比重 : $1.36 (25/4^{\circ}C)^{1)}$ logPow : $0.08^{2)}$
[2] エチレンイミン Ethyleneimine		分子式 : C_2H_5N CAS : 151-56-4 既存化 : 5-2 MW : 43.07 mp : $-71.5^{\circ}C^{3)}$ bp : $55 \sim 56^{\circ}C^{3)}$ sw : 易溶⁴⁾ 比重 : $0.83 (24/4^{\circ}C)^{1)}$ logPow : $-0.28^{5)}$
[3] 4'-エトキシアセトアニリド (別名 : フェナセチン) 4'-Ethoxyacetanilide (別名 : Phenacetin)		分子式 : $C_{10}H_{13}NO_2$ CAS : 62-44-2 既存化 : 3-697 MW : 179.22 mp : $134 \sim 135^{\circ}C^{1)}$ bp : $242 \sim 245^{\circ}C^{3)}$ sw : $766mg/L (25^{\circ}C)^{6)}$ 比重 : $1.36 (20/4^{\circ}C)^{7)}$ logPow : $1.58^{8)}$
[4] 2,4-キシレノール 2,4-Xylenol		分子式 : $C_8H_{10}O$ CAS : 105-67-9 既存化 : 3-521, 4-57 MW : 122.17 mp : $24.5^{\circ}C^{9)}$ bp : $210.98^{\circ}C (760 mmHg)^{9)}$ sw : $7.87 \times 10^3 mg/L (25^{\circ}C)^{10)}$ 比重 : 不詳 logPow : $2.30^{11)}$
[5] キノリン Quinoline		分子式 : C_9H_7N CAS : 91-22-5 既存化 : 5-794 MW : 129.16 mp : $-14.78^{\circ}C^{9)}$ bp : $237.7^{\circ}C^{1)}$ sw : $6.11 \times 10^3 mg/L (25^{\circ}C)^{12)}$ 比重 : $1.09 (25/4^{\circ}C)^{1)}$ logPow : $2.03^{9)}$

(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／水分配係数をそれぞれ指す。

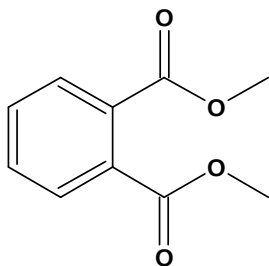
[6] 5-クロロ-N-{2-[4-(2-エトキシエチル)-2,3-ジメチルフェノキシ]エチル}-6-エチルピリミジン-4-アミン (別名：ピリミジフェン) 5-Chloro-N-{2-[4-(2-ethoxyethyl)-2,3-dimethylphenoxy]ethyl}-6-ethylpyrimidine-4-amine (別名：Pylimidifen) 	分子式： $C_{20}H_{28}ClN_3O_2$ CAS： 105779-78-0 既存化： 不詳 MW： 377.91 mp： $70^{\circ}C^{13)}$ bp： 不詳 sw： 2.17mg/L ($25^{\circ}C$)¹³⁾ 比重： 不詳 logPow： 4.84⁵⁾
[7] 1-クロロナフタレン 1-Chloronaphthalene 	分子式： $C_{10}H_7Cl$ CAS： 90-13-1 既存化： 4-316 MW： 162.62 mp： $-2.5^{\circ}C^{1)}$ bp： $259.3^{\circ}C^{1)}$ sw： 0.00224% ($25^{\circ}C$)⁹⁾ 比重： $1.19382(20/4^{\circ}C)^{1)}$ logPow： 3.9⁹⁾
[8] 2-クロロニトロベンゼン 2-Chloronitrobenzene 	分子式： $C_6H_4ClNO_2$ CAS： 88-73-3 既存化： 3-442 MW： 157.56 mp： $32.5^{\circ}C^{14)}$ bp： $245.5^{\circ}C^{14)}$ sw： 441 mg/L ($25^{\circ}C$)¹⁵⁾ 比重： $1.368 (22/4^{\circ}C)^{16)}$ logPow： 2.24²⁾
[9] サリチルアルデヒド Salicylaldehyde 	分子式： $C_7H_6O_2$ CAS： 90-02-8 既存化： 3-1183, 3-2660 MW： 122.12 mp： $-7^{\circ}C^{9)}$ bp： $197^{\circ}C^{9)}$ sw： 80.8mg/L ($25^{\circ}C$)¹⁵⁾ 比重： $1.1674 (20/4^{\circ}C)^{29)}$ logPow： 1.81 (pH5.4)¹¹⁾
[10] 2,6-ジニトロトルエン 2,6-Dinitrotoluene 	分子式： $C_7H_6N_2O_4$ CAS： 606-20-2 既存化： 3-446 MW： 182.14 mp： $64 \sim 66^{\circ}C^{17)}$ bp： $285^{\circ}C^{9)}$ sw： 208 mg/L ($25^{\circ}C$)¹⁷⁾ 比重： $1.54 (15/15^{\circ}C)^{18)}$ logPow： 2.1¹⁹⁾

[11] <i>m</i>-ジニトロベンゼン <i>m</i>-Dinitrobenzene		分子式 : $C_6H_4N_2O_4$ CAS : 99-65-0 既存化 : 3-445 MW : 168.11 mp : $90.3^{\circ}C^{(9)}$ bp : $291^{\circ}C^{(9)}$ sw : $2.09\%^{(9)}$ 比重 : 不詳 logPow : $1.49^{(20)}$
[12] ジベンジルエーテル (別名 : [(ベンジルオキシ)メチル]ベンゼン) Dibenzyl ether (別名 : [(Benzyloxy)methyl]benzene)		分子式 : $C_{14}H_{14}O$ CAS : 103-50-4 既存化 : 3-1082 MW : 198.26 mp : $3.6^{\circ}C^{(9)}$ bp : $298^{\circ}C^{(9)}$ sw : $40mg/L (35^{\circ}C)^{(21)}$ 比重 : $1.00142 (20/4^{\circ}C)^{(1)}$ logPow : $3.31^{(11)}$
[13] ジメチル=4,4'-(<i>o</i>-フェニレン)ビス(3-チオアラファネート) (別名 : チオファネートメチル) Dimethyl 4,4'-(<i>o</i>-phenylene)bis(3-thioallophanate) (別名 : Thiophanate-methyl)		分子式 : $C_{12}H_{14}N_4O_4S_2$ CAS : 23564-05-8 既存化 : 不詳 MW : 342.39 mp : $172^{\circ}C^{(9)}$ bp : 不詳 sw : $439mg/L (25^{\circ}C)^{(21)}$ 比重 : 不詳 logPow : $1.5^{(22)}$
[14] テレフタル酸ジメチル Dimethyl terephthalate		分子式 : $C_{10}H_{10}O_4$ CAS : 120-61-6 既存化 : 3-1328 MW : 194.19 mp : $141^{\circ}C^{(9)}$ bp : $288^{\circ}C(760 mmHg)^{(9)}$ sw : $19.0mg/L (25^{\circ}C)^{(21)}$ 比重 : $1.065(20/4^{\circ}C)^{(16)}$ logPow : $2.25^{(11)}$
[15] 二硝酸プロピレン Propylene dinitrate		分子式 : $C_3H_6N_2O_6$ CAS : 6423-43-4 既存化 : 2-1570 MW : 166.089 mp : $-29.49^{\circ}C^{(23)}$ bp : $92^{\circ}C(10 mmHg)^{(9)}$ sw : $0.1g/100mL^{(24)}$ 比重 : $1.2(water=1)^{(24)}$ logPow : $1.83^{(25)}$

[16] <i>o</i>-ニトロアニリン o-Nitroaniline		分子式 : $C_6H_6N_2O_2$ CAS : 88-74-4 既存化 : 3-392 MW : 138.13 mp : $69\sim 71^{\circ}C^{1)}$ bp : $284^{\circ}C^{1)}$ sw : 1260mg/L ($25^{\circ}C$)²⁶⁾ 比重 : 0.9015 ($25/4^{\circ}C$)¹⁾ logPow : $1.85^{32)}$
[17] <i>m</i>-ニトロアニリン m-Nitroaniline		分子式 : $C_6H_6N_2O_2$ CAS : 99-09-2 既存化 : 3-392 MW : 138.13 mp : $114^{\circ}C^{1)}$ bp : $306^{\circ}C^{1)}$ sw : $1g/880mL^{1)}$ 比重 : 0.9011 ($25/4^{\circ}C$)¹⁾ logPow : $1.37^{27)}$
[18] バナジウム及びその化合物 (バナジウムとして) Vanadium and its compounds	V	分子式 : V CAS : 7440-62-2 既存化 : 不詳 MW : 50.94 mp : $1917^{\circ}C^{1)}$ bp : 不詳 sw : 不溶¹⁾ 比重 : 不詳 logPow : 不詳
[19] フェナントレン Phenanthrene		分子式 : $C_{14}H_{10}$ CAS : 85-01-8 既存化 : 4-635 MW : 178.23 mp : $101^{\circ}C^{9)}$ bp : $340^{\circ}C^{9)}$ sw : 1.6 mg/L ($15^{\circ}C$)¹⁷⁾ 比重 : 0.98 ($4^{\circ}C$)⁹⁾ logPow : $4.46^{2)}$
[20] フェニルオキシラン (別名: スチレンオキシド) Phenyloxirane (別名: Styreneoxide)		分子式 : C_8H_8O CAS : 96-09-3 既存化 : 3-1033 MW : 120.15 mp : $-35.6^{\circ}C^{9)}$ bp : $194.1^{\circ}C^{9)}$ sw : $3,000mg/L$ ($20^{\circ}C$)³⁰⁾ 比重 : $1.0523^{9)}$ logPow : $1.61^{31)}$

[21] フタル酸ジメチル

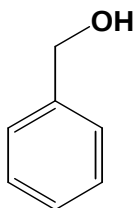
Dimethyl phthalate



分子式 : $C_{10}H_{10}O_4$
 CAS : 131-11-3
 既存化 : 3-1301
 MW : 194.19
 mp : $5.5^{\circ}C^{1)}$
 bp : $283.7^{\circ}C^{1)}$
 sw : $4g/L (20^{\circ}C)^{18)}$
 比重 : $1.192 (20^{\circ}C)^{16)}$
 logPow : $1.56^{32)}$

[22] ベンジルアルコール

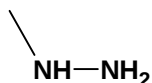
Benzyl alcohol



分子式 : C_7H_8O
 CAS : 100-51-6
 既存化 : 3-1011
 MW : 108.14
 mp : $-15.2^{\circ}C^{9)}$
 bp : $205.3^{\circ}C^{9)}$
 sw : $42.9g/L (25^{\circ}C)^{15)}$
 比重 : $1.04 (20/4^{\circ}C)^{9)}$
 logPow : $1.10^{2)}$

[23] メチルヒドラジン

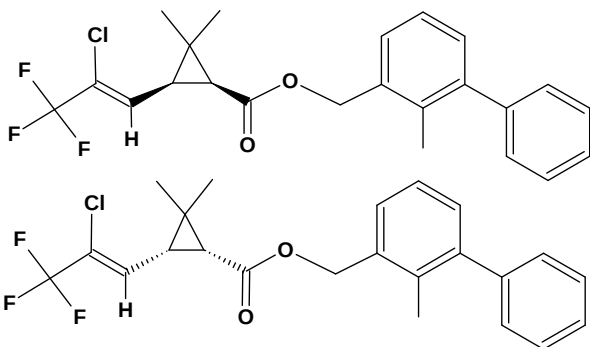
Methylhydrazine



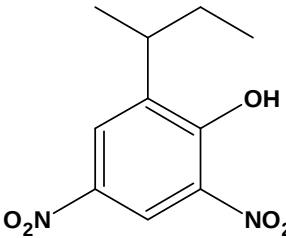
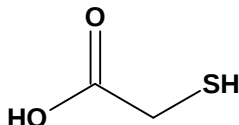
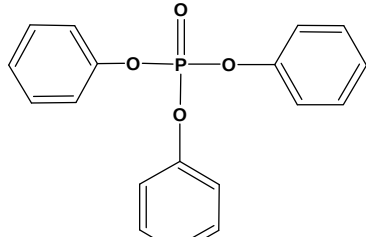
分子式 : CH_6N_2
 CAS : 60-34-4
 既存化 : 2-2385
 MW : 46.07
 mp : $-52.4^{\circ}C^{1)}$
 bp : $87.5^{\circ}C^{1)}$
 sw : $1,000 g/L (25^{\circ}C)^{33)}$
 比重 : $0.874 (25^{\circ}C)^{1)}$
 logPow : $-1.05^{34)}$

[24] 2-メチル-1,1'-ビフェニル-3-イルメチル=(Z)-3-(2-クロロ-3,3,3-トリフルオロ-1-プロペニル)-2,2-ジメチルシクロプロパノカルボキシレート (別名: ビフェントリン)

2-Methyl-1,1'-biphenyl-3-ylmethyl (Z)-3-(2-chloro-3,3,3-trifluoro-1-propenyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate (別名: Bifenthrin)



分子式 : $C_{23}H_{22}ClF_3O_2$
 CAS : 82657-04-3
 既存化 : 4-1701
 MW : 422.87
 mp : $69^{\circ}C^{1)}$
 bp : 不詳
 sw : $0.1mg/L^{13)}$
 比重 : $1.21 (25^{\circ}C)^{1)}$
 logPow : $>6^{2)}$

[25] 2-(1-メチルプロピル)-4,6-ジニトロフェノール 2-(1-Methylpropyl)-4,6-dinitrophenol 	分子式 : $C_{10}H_{12}N_2O_5$ CAS : 88-85-7 既存化 : 3-828 MW : 240.215 mp : $38 \sim 42^{\circ}C^{1)}$ bp : $332^{\circ}C^{35)}$ sw : $25.8mg/L^{36)}$ 比重 : $1.29(water=1) (30^{\circ}C)^{37)}$ logPow : $3.09^{36)}$
[26] メルカプト酢酸 Mercaptoaceticacid 	分子式 : $C_2H_4O_2S$ CAS : 68-11-1 既存化 : 2-1355 MW : 92.11 mp : $-16.5^{\circ}C^{1)}$ bp : $123^{\circ}C (3.9 kPa), 108^{\circ}C (2.0 kPa)^{1)}$ sw : Readily soluble¹⁾ 比重 : $1.300 (25^{\circ}C/4^{\circ}C)^{16)}$ logPow : $0.09^{38)}$
[27] リン酸トリフェニル Triphenyl phosphate 	分子式 : $C_{18}H_{15}O_4P$ CAS : 115-86-6 既存化 : 3-2522, 3-3363 MW : 326.29 mp : $50.5^{\circ}C^{2)}$ bp : $245^{\circ}C (11mmHg)^{2)}$ sw : $1.9 mg/L (25^{\circ}C)^{21)}$ 比重 : 不詳 logPow : $4.59^{11)}$

参考文献

- 1) O'Neil, The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals 13th Edition, Merck Co. Inc. (2001)
- 2) Hansch et al., Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic and Steric Constants, American Chemical Society (1995)
- 3) Sax, Dangerous Properties of Industrial Materials Volumes 1-3 7th Edition, Van Nostrand Reinhold (1989)
- 4) Riddick et al., Techniques of Chemistry 4th Edition, John Wiley & Sons (1985-1986)
- 5) Meylan et al., Atom/fragment contribution method for estimating octanol-water partition coefficients, Journal of Pharmacological Sciences, 84, 83-92 (1995)
- 6) Seidell, Solubilities of Organic Compounds, Van Nostrand Reinhold Co. (1941)
- 7) Wollmann et al., Zur Bestimmung der polarität von Arzneistoffen, Pharmazie, 29, 708-711 (1974)
- 8) Nakagawa et al., Analysis and Prediction of Hydrophobicity Parameters of Substituted Acetanilides, Benzamides and Related Aromatic Compounds, Environmental Toxicological Chemistry, 11, 901-916 (1992)
- 9) Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics, 81st Edition, CRC Press LLC (2005)
- 10) Sujlt Banerjee et al. Water Solubility and Octanol/Water Partition Coefficients of Organics. Limitations of the Solubility-Partition Coefficient Correlation, Environmental Science & Technology, 14(10): 1227-1229 (1980)
- 11) Hansch, C., A. Leo and D. Hoekman, Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. American Chemical Society, Washington, DC (1995)
- 12) Smith et al., Environmental pathways of selected chemicals in freshwater systems. Part II. USEPA-600/7-78-074 (1978)
- 13) Tomlin, The Pesticide Manual 13th Edition, The British Crop Protection Council (2004-2005)
- 14) Lewis, Hawley's Condensed Chemical Dictionary 13th Edition, John Wiley & Sons (1997)
- 15) Yalkowsky et al., Aquasol Database of Aqueous Solubility Version 5, College of Pharmacy, University of Arizona (1992)
- 16) 有機合成化学協会編, 有機化学物辞典, 講談社 (1985)
- 17) Verschuere, Handbook of Environmental Data of Organic Chemicals 2nd Edition, Van Nostrand Reinhold Co. (1983)
- 18) Richardson et al., The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry (1992-1995)
- 19) Nakagawa et al., Analysis and Prediction of Hydrophobicity Parameters of Substituted Acetanilides, Benzamides and Related Aromatic Compounds, Environmental Toxicology and Chemistry, 11: 901-916 (1992)
- 20) International Chemical Safety Cards ICSC0691

- 21) Howard et al., Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, CRC Press Inc. (1997)
- 22) 農薬個別票、厚生労働省健康局
- 23) Beilstein Handbook of Organic Chemistry
- 24) International Chemical Safety Cards ICSC1392
- 25) Fischer et al.; CSMHAF; Chemosphere; EN; 36; 14 (1998)
- 26) International Chemical Safety Cards ICSC0306
- 27) International Chemical Safety Cards ICSC0307
- 28) Syracuse Research Corporation(SRC), KOAWIN v1.10 (<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitdl.htm>)
- 29) Hazardous Substances Data Bank(HSDB), U.S. National Library of Medicine (2001).
- 30) Gangolli, The Dictionary of Substances and their Effects, 2nd. Ed., The Royal Society of Chemistry(1999)
- 31) Hansch et al., The Log P Database. Claremont, CA: Pomona College (1987)
- 32) 分配係数計算用プログラム"C Log P ", BioByte Corporation
- 33) Syracuse Research Corporation PhysProp Database, North Syracuse, NY (2004)
- 34) International Chemical Safety Cards ICSC 0180
- 35) 化学物質安全性(ハザード) 評価シート 2001-15
- 36) 通産省化学品安全課監修, 化学品検査協会編, 化審法の既存化学物質安全性点検データ集, 日本化学物質安全・情報センター (1992)
- 37) The Canadian Centre for Occupational Health and Safety (CCOHS) CCINFO
- 38) USEPA KOWWIN v1.66