

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 22 年度の初期環境調査においては、16 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	改正前	改正後	水 質	底 質	大 気
[1]	アミルケイ皮アルデヒド					○		
[2]	イオパノ酸					○		
[3]	ϵ -カプロラクタム	第二種監視	優先評価	第一種 61	第一種 76			○
[4]	2,4-キシレノール			第二種 17	第一種 78		○	
[5]	キノリン	第二種監視			第一種 81		○	
[6]	酢酸 2-エトキシエチル（別名：エチレンジグリコールモノエチルエーテルアセテート）	第二種監視		第一種 101	第一種 133			○
[7]	4,4'-ジアミノジフェニルエーテル				第一種 143		○	
[8]	ジエチルスチルベストロール					○		
[9]	ジメチルスルホキシド							○
[10]	L-チロキシン					○		
[11]	o-ニトロトルエン	第二種監視			第一種 315		○	
[12]	4-ヒドロキシ安息香酸メチル				第一種 334		○	
[13]	フタル酸 n-ブチル=ベンジル			第一種 273	第一種 356			○
[14]	1,2,4-ベンゼントリカルボン酸トリ-n-オクチル					○		
[15]	ペンタナール					○		
[16]	4-メトキシベンズアルデヒド					○		

（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。

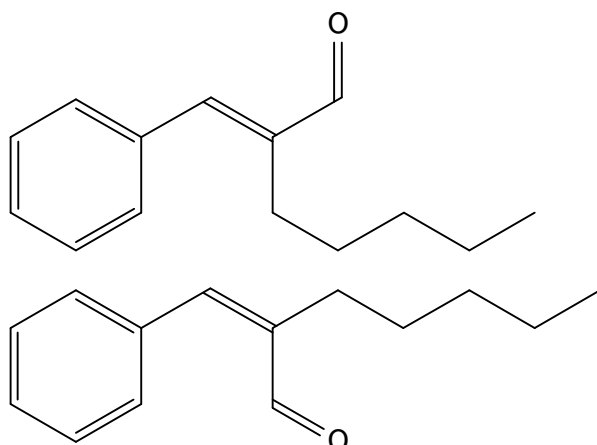
（注 2）「化審法指定区分」における「改正前」とは平成 21 年 5 月 20 日の法律改正（平成 23 年 4 月 1 日施行）前の指定を、「改正後」とは同改正後の指定をそれぞれ意味する。

（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] アミルケイ皮アルデヒド

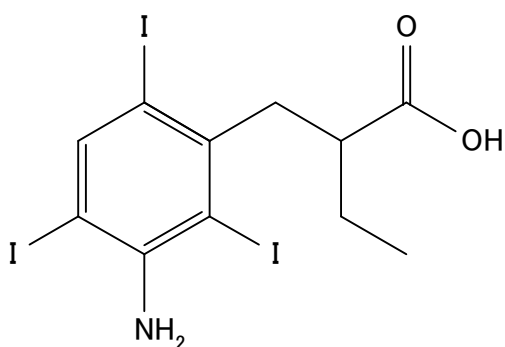
Amylcinnamaldehyde



分子式 : $C_{14}H_{18}O$
 CAS : 122-40-7
 既存化 : 3-2657
 MW : 202.29
 mp : 80 ¹⁾
 bp : 174 (20mmHg) ¹⁾
 sw : 不詳
 比重 : 0.9711g/cm³ (20) ¹⁾
 logPow : 不詳

[2] イオパノ酸

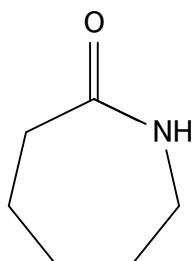
Iopanoic acid



分子式 : $C_{11}H_{12}I_3NO_2$
 CAS : 96-83-3
 既存化 : 3-3088、9-171
 MW : 570.93
 mp : 156 ¹⁾
 bp : 不詳
 sw : 不詳
 比重 : 不詳
 logPow : 不詳

[3] ε-カプロラクタム

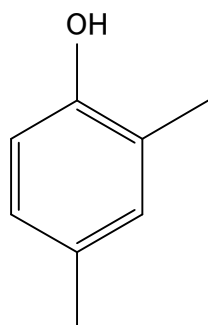
ε-Caprolactam



分子式 : $C_6H_{11}NO$
 CAS : 105-60-2
 既存化 : 5-1097
 MW : 113.16
 mp : 70 ²⁾
 bp : 180 ²⁾
 sw : 5,525g/kg (25) ³⁾
 比重 : 1.05 (25/4) ²⁾
 logPow : 不詳

[4] 2,4-キシレノール

2,4-Xylenol

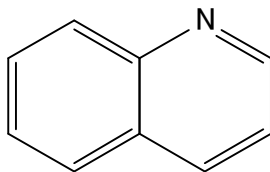


分子式 : $C_8H_{10}O$
 CAS : 105-67-9
 既存化 : 3-521、4-57
 MW : 122.16
 mp : 25 ¹⁾
 bp : 210.94 ¹⁾
 sw : 7.87g/kg (25) ¹⁾
 比重 : 0.9650g/cm³ (20) ¹⁾
 logPow : 2.35 ¹⁾

(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/水分分配係数をそれぞれ意味する。

[5] キノリン

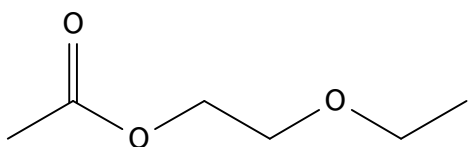
Quinoline



分子式 : C_9H_7N
 CAS : 91-22-5
 既存化 : 5-794
 MW : 129.16
 mp : -15²⁾
 bp : 237.7²⁾
 sw : 6.33g/kg (20¹⁾)
 比重 : 1.0900 (25/4²⁾)
 logPow : 2.03⁴⁾

[6] 酢酸 2-エトキシエチル (別名: エチレングリコールモノエチルエーテルアセテート)

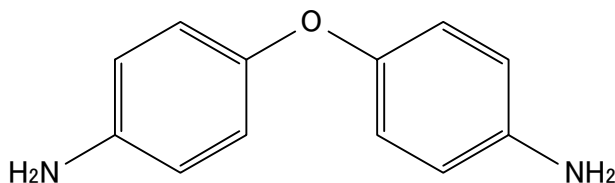
2-Ethoxyethyl acetate (synonym: Ethylene glycol monoethyl ether acetate)



分子式 : $C_6H_{12}O_3$
 CAS : 111-15-9
 既存化 : 2-740
 MW : 132.16
 mp : -61.7¹⁾
 bp : 156.6¹⁾
 sw : 163g/kg¹⁾
 比重 : 0.9740g/cm³ (20¹⁾)
 logPow : 0.24⁵⁾

[7] 4,4'-ジアミノジフェニルエーテル

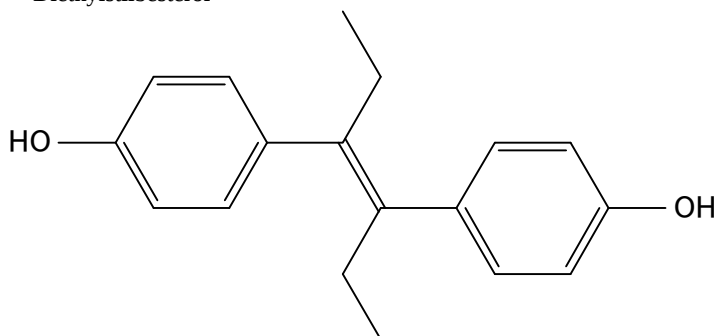
4,4'-Diaminodiphenyl ether



分子式 : $C_{12}H_{12}N_2O$
 CAS : 101-80-4
 既存化 : 3-854
 MW : 200.24
 mp : 186 ~ 187³⁾
 bp : 350³⁾
 sw : 不詳
 比重 : 不詳
 logPow : 不詳

[8] ジエチルスチルベストール

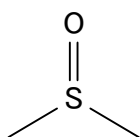
Diethylstilbestrol



分子式 : $C_{18}H_{20}O_2$
 CAS : 56-53-1
 既存化 : 該当なし
 MW : 268.35
 mp : 169 ~ 172²⁾
 bp : 不詳
 sw : 0.1g/kg (20¹⁾)
 比重 : 不詳
 logPow : 5.07⁴⁾

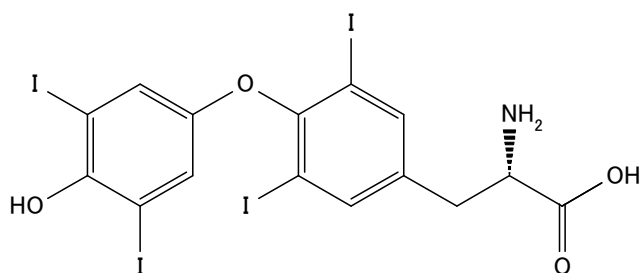
[9] ジメチルスルホキシド

Dimethyl sulfoxide



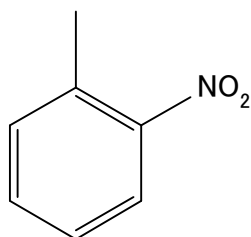
分子式 : C_2H_6OS
 CAS : 67-68-5
 既存化 : 2-1553
 MW : 78.13
 mp : 18.55²⁾
 bp : 189²⁾
 sw : 339g/kg (25¹⁾)
 比重 : 1.100 (20/4²⁾)
 logPow : -1.35²⁾

[10] *L*-チロキシン
L-Thyroxine



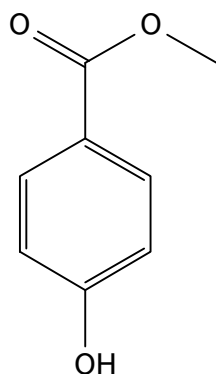
分子式 : $C_{15}H_{11}I_4NO_4$
CAS : 51-48-9
既存化 : 該当なし
MW : 776.87
mp : 235~236°C (分解)²⁾
bp : 不詳
sw : 15mg/100mL (25°C、ナトリウム塩として)²⁾
比重 : 2.381 (20/4°C、ナトリウム塩として)²⁾
logPow : 不詳

[11] *o*-ニトロトルエン
o-Nitrotoluene



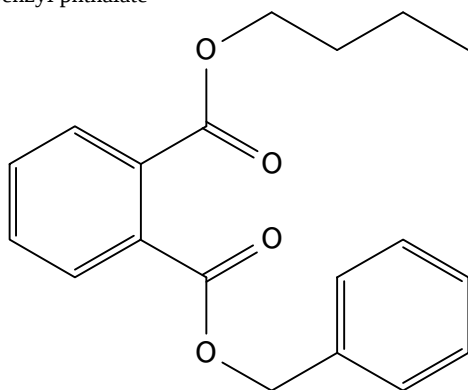
分子式 : $C_7H_7NO_2$
CAS : 88-72-2
既存化 : 3-437
MW : 137.14
mp : -9.3°C²⁾
bp : 220.4°C²⁾
sw : 652mg/L²⁾
比重 : 1.1622 (19/15°C)²⁾
logPow : 2.30⁴⁾

[12] 4-ヒドロキシ安息香酸メチル
Methyl 4-hydroxybenzoate



分子式 : $C_8H_8O_3$
CAS : 99-76-3
既存化 : 3-1585
MW : 152.15
mp : 131°C²⁾
bp : 270~280°C (分解)²⁾
sw : 1g/400mL (20°C)²⁾
比重 : 不詳
logPow : 1.96⁴⁾

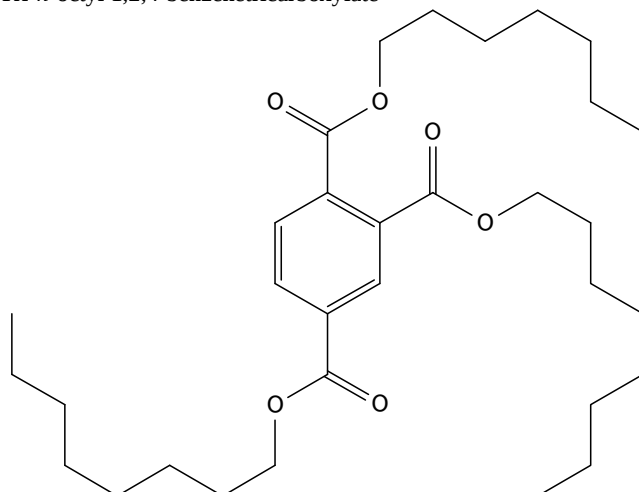
[13] フタル酸 *n*-ブチルベンジル
n-Butyl benzyl phthalate



分子式 : $C_{19}H_{20}O_4$
CAS : 85-68-7
既存化 : 3-1312
MW : 312.36
mp : -3.5°C⁶⁾
bp : 370°C¹⁾
sw : 2.69mg/L (25°C)³⁾
比重 : 1.119g/cm³ (25°C)¹⁾
logPow : 4.91³⁾

[14] 1,2,4-ベンゼントリカルボン酸トリ-*n*-オクチル

Tri-*n*-octyl 1,2,4-benzenetricarboxylate



分子式 : $C_{33}H_{54}O_6$

CAS : 89-04-3

既存化 : 3-1372

MW : 546.78

mp : 不詳

bp : 不詳

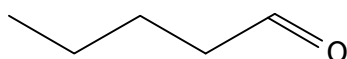
sw : 不詳

比重 : 不詳

logPow : 不詳

[15] ペンタナール

Pentanal



分子式 : $C_5H_{10}O$

CAS : 110-62-3

既存化 : 2-494

MW : 86.13

mp : -81.5 ¹⁾

bp : 103 ¹⁾

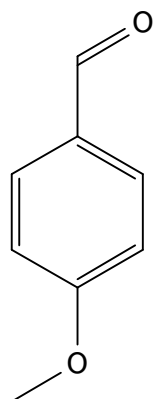
sw : 12g/kg (25) ¹⁾

比重 : 0.8095g/cm³ (20) ¹⁾

logPow : 不詳

[16] 4-メトキシベンズアルデヒド

4-Methoxybenzaldehyde



分子式 : $C_8H_8O_2$

CAS : 123-11-5

既存化 : 3-2661

MW : 136.15

mp : 0 ²⁾

bp : 248 ²⁾

sw : 4.29g/kg (25) ¹⁾

比重 : 1.119 (15/4) ²⁾

logPow : 1.76 ⁴⁾

参考文献

- 1) Haynes, CRC Handbook of Chemistry and Physics, 92nd Edition, CRC Press LLC (2011)
- 2) O'Neil, The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals 14th Edition, Merck Co. Inc. (2006)
- 3) Howard et al., Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, CRC Press Inc. (1996)
- 4) Hansch et al., Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic and Steric Constants, American Chemical Society (1995)
- 5) Verschueren, Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals 5th Edition, John Wiley & Sons (2008)
- 6) Richardson et al., Dictionary of Substances and Their Effects; Index, Royal Society of Chemistry, 620 (1995)