

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 24 年度の初期環境調査においては、18 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	生 物	大 気
[1]	アニシジン類							
	[1-1] <i>o</i> -アニシジン	第二種監視		第一種 14	第一種 17	○		
	[1-2] <i>m</i> -アニシジン	第二種監視				○		
	[1-3] <i>p</i> -アニシジン			第二種 2	第二種 2	○		
[2]	2-エチルヘキサン酸	第二種監視			第一種 51			○
[3]	3-クロロ-2-メチル-1-プロペン	第二種監視			第一種 131			○
[4]	4,6-ジニトロ- <i>o</i> -クレゾール			第二種 34				○
[5]	2,4-ジ- <i>tert</i> -ブチルフェノール	第二種監視 第三種監視			第一種 208	○		
[6]	1,2-ジブロモエタン	第二種監視			第二種 45	○		
[7]	ジブロモクロロメタン				第一種 209			○
[8]	3,3'-ジメチルベンジジン (別名： <i>o</i> -トリジン)	第二種監視 第三種監視		第一種 171	第一種 231	○		
[9]	1,1,2,2-テトラクロロエタン	第二種監視		第二種 47	第二種 60	○		
[10]	テトラフルオロエチレン			第一種 203				○
[11]	2,4,6-トリクロロフェノール				第一種 287	○	○	
[12]	4-ヒドロキシ安息香酸プロピル (別名：プロピルパラベン)					○		
[13]	17 β -ヒドロキシエストロ-4,9,11-トリエン-3- オン (別名：トレンボロン)					○		
[14]	ピロカテコール (別名：カテコール)	第二種監視	優先評価	第一種 260	第一種 343			○
[15]	ブロモジクロロメタン				第一種 381			○
[16]	1-ブロモプロパン	第二種監視			第一種 384	○		
[17]	ベンズアルデヒド			第一種 298	第一種 399			○
[18]	ベンゾフェノン				第一種 403	○		

(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。

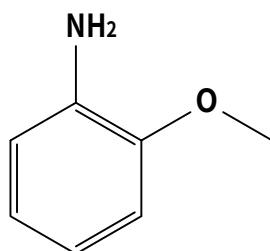
(注 3) 「化管法指定区分」における「改正前」とは平成 20 年 11 月 21 日の政令改正前の指定を、「改正後」とは同改正後の指定をそれぞれ意味する。

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] アニシジン類

[1-1] *o*-アニシジン

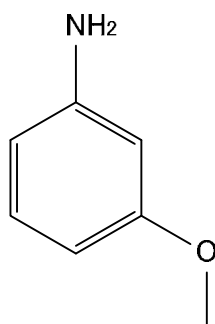
o-Anisidine



分子式 : C_7H_9NO
 CAS : 90-04-0
 既存化 : 3-682
 MW : 123.15
 mp : $6.2^{\circ}C$ ¹⁾
 bp : $224^{\circ}C$ ¹⁾
 sw : $12.6g/L$ ($25^{\circ}C$) ¹⁾
 比重等 : 1.0923 ($20^{\circ}C$) ¹⁾
 logPow : 1.18 ¹⁾

[1-2] *m*-アニシジン

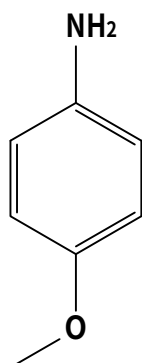
m-Anisidine



分子式 : C_7H_9NO
 CAS : 536-90-3
 既存化 : 3-682
 MW : 123.15
 mp : $-1^{\circ}C$ ³⁾
 bp : $251^{\circ}C$ ³⁾
 sw : $2.05g/100mL$ ⁴⁾
 比重等 : 1.096 ($20^{\circ}C$) ³⁾
 logPow : 0.93 ⁴⁾

[1-3] *p*-アニシジン

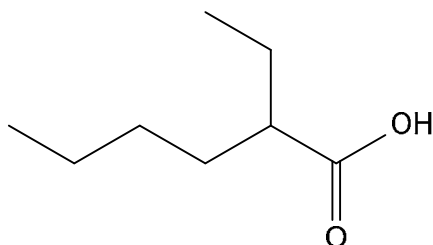
p-Anisidine



分子式 : C_7H_9NO
 CAS : 104-94-9
 既存化 : 3-682
 MW : 123.15
 mp : $57.2^{\circ}C$ ³⁾
 bp : $243^{\circ}C$ ³⁾
 sw : $15,400mg/L$ ($25^{\circ}C$) ⁵⁾
 比重等 : 1.071 ($57^{\circ}C$) ³⁾
 logPow : 0.95 ⁶⁾

[2] 2-エチルヘキサン酸

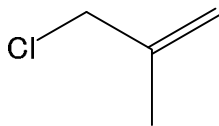
2-Ethylhexanoic acid



分子式 : $C_8H_{16}O_2$
 CAS : 149-57-5
 既存化 : 2-608
 MW : 144.21
 mp : $-59^{\circ}C$ ⁷⁾
 bp : $228^{\circ}C$ ³⁾
 sw : $2,000mg/L$ ⁷⁾
 比重等 : 0.9031 ³⁾
 logPow : 2.64 ⁵⁾

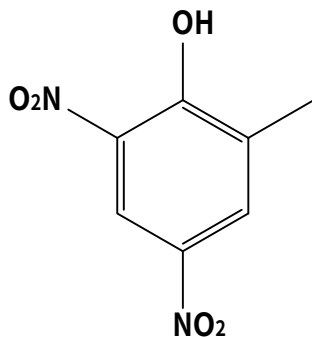
(注) 「CAS」とはCAS登録番号を、「既存化」とは既存化学物質名簿における番号を、「MW」とは分子量を、「mp」とは融点を、「bp」とは沸点を、「sw」とは水への溶解度を、「比重等」とは比重(単位なし)又は密度(単位あり)を、「logPow」とは*n*-オクタノール/水分配係数をそれぞれ意味する。

[3] 3-クロロ-2-メチル-1-プロペン
3-Chloro-2-methyl-1-propene



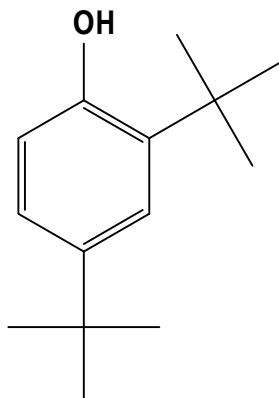
分子式 : C_4H_7Cl
CAS : 563-47-3
既存化 : 2-117、2-2367
MW : 90.55
mp : $-80^{\circ}C$ ⁸⁾
bp : $71-72^{\circ}C$ ⁹⁾
sw : $1,400mg/L$ ⁸⁾
比重等 : 0.9165 ⁹⁾
logPow : 1.98 ⁹⁾

[4] 4,6-ジニトロ-*o*-クレゾール
4,6-Dinitro-*o*-cresol



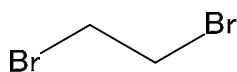
分子式 : $C_7H_6N_2O_5$
CAS : 534-52-1
既存化 : 3-2769
MW : 198.13
mp : $87.5^{\circ}C$ ⁹⁾
bp : $378^{\circ}C$ ⁵⁾
sw : $198mg/L$ ($20^{\circ}C$) ⁵⁾
比重等 : $1.58 g/cm^3$ ($20^{\circ}C$) ¹⁰⁾
logPow : 2.12 ⁵⁾

[5] 2,4-ジ-*tert*-ブチルフェノール
2,4-Di-*tert*-butylphenol



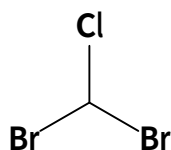
分子式 : $C_{14}H_{22}O$
CAS : 96-76-4
既存化 : 3-521、3-526
MW : 206.32
mp : $56.5^{\circ}C$ ³⁾
bp : $263.5^{\circ}C$ ³⁾
sw : $35mg/kg$ ($25^{\circ}C$) ⁵⁾
比重等 : $0.935g/cm^3$ ($22^{\circ}C$) ²⁾
logPow : 5.19 ⁵⁾

[6] 1,2-ジブロモエタン
1,2-Dibromoethane



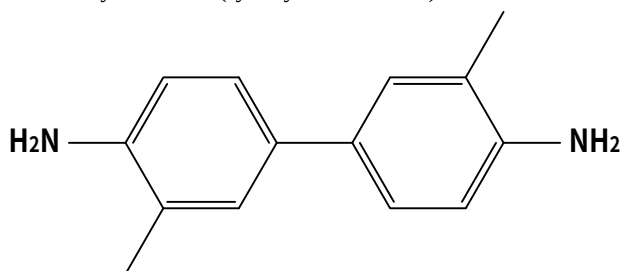
分子式 : $C_2H_4Br_2$
CAS : 106-93-4
既存化 : 2-59
MW : 187.86
mp : $9^{\circ}C$ ⁹⁾
bp : $131-132^{\circ}C$ ⁹⁾
sw : $0.034g/L$ ($20^{\circ}C$) ¹⁰⁾
比重等 : 2.172 ($25/25^{\circ}C$) ⁹⁾
logPow : 1.93 ¹²⁾

[7] ジブロモクロロメタン
Dibromochloromethane



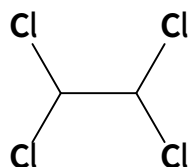
分子式 : $CHBr_2Cl$
CAS : 124-48-1
既存化 : 該当なし
MW : 208.28
mp : $-20^{\circ}C$ ¹⁾
bp : $121.3-121.8^{\circ}C$ ¹²⁾
sw : $2.51g/L$ ($30^{\circ}C$) ¹⁾
比重等 : $2.445cm^3$ ($15^{\circ}C$) ¹³⁾
logPow : 2.16 ¹⁴⁾

[8] 3,3'-ジメチルベンジジン (別名: *o*-トリジン)
3,3'-Dimethylbenzidine (synonym: *o*-Tolidine)



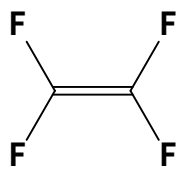
分子式: $C_{14}H_{16}N_2$
CAS: 119-93-7
既存化: 9-882
MW: 212.29
mp: $129-131^{\circ}C$ ¹³⁾
bp: $300^{\circ}C$ ¹⁵⁾
sw: $1.3g/L$ ($25^{\circ}C$) ¹⁾
比重等: $1.234g/cm^3$ ¹⁶⁾
logPow: 2.34 ¹⁵⁾

[9] 1,1,2,2-テトラクロロエタン
1,1,2,2-Tetrachloroethane



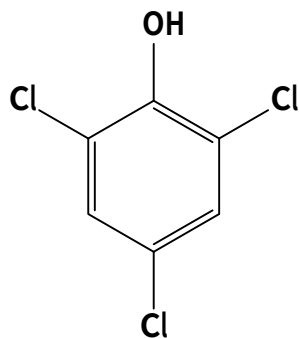
分子式: $C_2H_2Cl_4$
CAS: 79-34-5
既存化: 2-56
MW: 167.85
mp: $-44^{\circ}C$ ⁹⁾
bp: $146.5^{\circ}C$ ⁹⁾
sw: $1g/350mL$ ($25^{\circ}C$) ⁹⁾
比重等: 1.58658 ($25/4^{\circ}C$) ⁹⁾
logPow: 2.39 ³⁾

[10] テトラフルオロエチレン
Tetrafluoroethylene



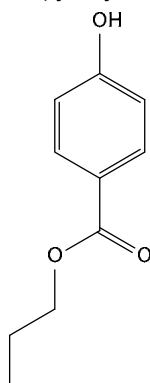
分子式: C_2F_4
CAS: 116-14-3
既存化: 2-112
MW: 100.02
mp: $-142.5^{\circ}C$ ¹³⁾
bp: $-76.3^{\circ}C$ (760mmHg) ¹³⁾
sw: $0.158g/L$ ($25^{\circ}C$) ¹⁾
比重等: $1.519 g/cm^3$ ¹³⁾
logPow: 1.21 ¹⁵⁾

[11] 2,4,6-トリクロロフェノール
2,4,6-Trichlorophenol

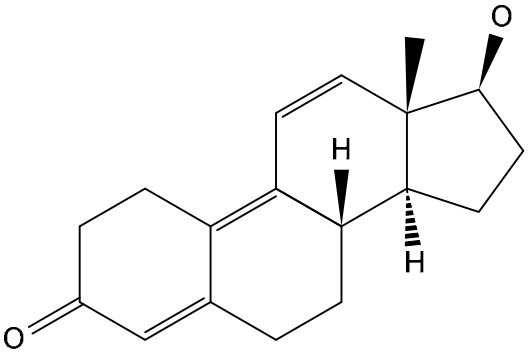
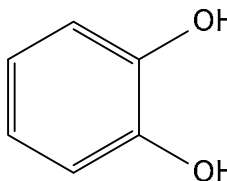
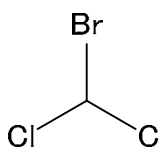
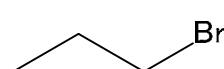
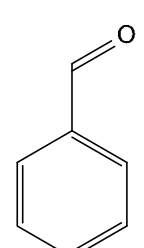


分子式: $C_6H_3Cl_3O$
CAS: 88-06-2
既存化: 3-931
MW: 197.45
mp: $69^{\circ}C$ ⁹⁾
bp: $246^{\circ}C$ ⁹⁾
sw: $< 0.1g/100g$ ⁹⁾
比重等: 1.4901 ⁹⁾
logPow: 3.87 ¹⁷⁾

[12] 4-ヒドロキシ安息香酸プロピル (別名: プロピルパラベン)
Propyl 4-hydroxybenzoate (synonym: Propylparaben)

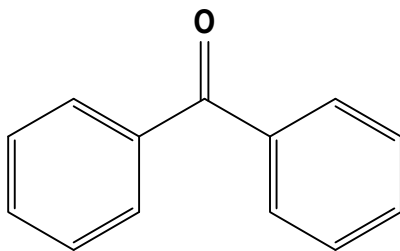


分子式: $C_{10}H_{12}O_3$
CAS: 94-13-3
既存化: 3-1585
MW: 180.20
mp: $96-97^{\circ}C$ ⁹⁾
bp: 不詳
sw: $0.4g/L$ ⁹⁾
比重等: $1.287 g/cm^3$ ¹⁷⁾
logPow: 1.49 ¹⁹⁾

[13] 17β-ヒドロキシエストラ-4,9,11-トリエン-3-オン (別名：トレンボロン) 17β-Hydroxyestra-4,9,11-trien-3-one (synonym: Trenbolone) 	分子式： C₁₈H₂₂O₂ CAS： 10161-33-8 既存化： 該当なし MW： 270.37 mp： 不詳 bp： 不詳 sw： 不詳 比重等： 不詳 logPow： 不詳
[14] ピロカテコール (別名：カテコール) Pyrocatechol (synonym: Catechol) 	分子式： C₆H₆O₂ CAS： 120-80-9 既存化： 3-543 MW： 110.11 mp： 105°C ¹³⁾ bp： 245.5°C (760mmHg) ¹³⁾ sw： 461g/L (25°C) ²⁰⁾ 比重等： 1.344g/cm³ ¹³⁾ logPow： 0.88 ¹⁴⁾
[15] ブロモジクロロメタン Bromodichloromethane 	分子式： CHBrCl₂ CAS： 75-27-4 既存化： 1-381 MW： 163.83 mp： -57°C ³⁾ bp： 88.4-88.6°C ⁹⁾ sw： 1290mg/L (25°C) ⁵⁾ 比重等： 1.9254 (15°C) ⁹⁾ logPow： 2 ¹⁾
[16] 1-ブロモプロパン 1-Bromopropane 	分子式： C₃H₇Br CAS： 106-94-5 既存化： 2-73 MW： 122.99 mp： -110°C ⁹⁾ bp： 71°C ⁹⁾ sw： 2.5g/L (20°C) ⁹⁾ 比重等： 1.353 (20/20°C) ⁹⁾ logPow： 2.1 ³⁾
[17] ベンズアルデヒド Benzaldehyde 	分子式： C₇H₆O CAS： 100-52-7 既存化： 3-1142 MW： 106.12 mp： -56.5°C ¹³⁾ bp： 179°C ¹³⁾ sw： 3g/L (20°C) ¹⁾ 比重等： 1.050 (15/4°C) ¹³⁾ logPow： 1.48 ¹⁾

[18] ベンゾフェノン

Benzophenone



分子式 : $C_{13}H_{10}O$
 CAS : 119-61-9
 既存化 : 3-1258、4-125
 MW : 182.22
 mp : $48.5^{\circ}C$ ⁹⁾
 bp : $305.4^{\circ}C$ ⁹⁾
 sw : 137mg/L ($25^{\circ}C$) ⁵⁾
 比重等 : 1.1108 ($18/4^{\circ}C$) ⁹⁾
 logPow : 3.18 ³⁾

参考文献

- 1) Lide, D.R.(ed), CRC Handbook of Chemistry and Physics 88th Edition, CRC Press LLC (2007)
- 2) International Uniform Chemical Information Database IUCLID Data Set
- 3) Lide, D.R.(ed), Budavar (2003)
- 4) IPCS, International Chemical Safety Cards, 3-Aminoanisole, ICSC0375(2002)
- 5) Philip H. Howard, William M. Meylan, Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals (1997)
- 6) IPCS, International Chemical Safety Cards, 1-Amino-4-methoxybenzene, ICSC0971 (1999)
- 7) IPCS, International Chemical Safety Cards, 2-Ethylcaproic acid, ICSC0477 (2005)
- 8) IPCS, International Chemical Safety Cards, 3-Chloro-2-Methyl-1-Propene, ICSC1341(2008)
- 9) Budavari, S.,(Ed), The Merck Index Ver.12:2 (1995)
- 10) IPCS : 国際化学物質安全性カード(ICSC)日本語版 No.45 (1993)
- 11) Environmental Health Criteria EHC
- 12) IPCS, International Chemical Safety Cards, 1,2-Dibromoethane, ICSC0045(1993)
- 13) O'Neil, The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals 14th Edition, Merck Co. Inc. (2006)
- 14) web sites ; Data from SRC PhysProp Database
- 15) PRTR 排出量等算出マニュアル 第4版(2009)
- 16) IPCS, International Chemical Safety Cards, o-Tolodone, ICSC0960(1998)
- 17) IPCS, International Chemical Safety Cards, 2,4,6-Trichlorophenol, ICSC1122(1998)
- 18) Giordano et al; J. Pharm.Sci.; EN; 88; 11; 1210 - 1216.(1999)
- 19) Hansch,C.et al :Exploring QSAR-Hydrophobic,Electronic and Steric Constants,American Chemical Society (1995)
- 20) Samuel H. Yalkowsky, Handbook of Aqueous Solubility Data, (2010)