

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 28 年度の初期環境調査においては、15 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 ^{注1、2}		化管法指定区分 ^{注3}		調査媒体		
		改正前	改正後	改正前	改正後	水 質	底 質	大 気
[1]	1-アミノ-9,10-アントラキノン	第二種監視 第三種監視			第一種 19	○	○	
[2]	2-イミダゾリジンチオン（別名：2-メルカ プトイミダゾリン）	第二種監視		第一種 32	第一種 42	○		
[3]	エストロン及びその代謝物							
	[3-1] 1,3,5(10)エストラトリエン-3-オール -17-オン（別名：エストロン）					○		
	[3-2] エストロン-3-硫酸					○		
	[3-3] エストロン-3-グルクロニド					○		
[4]	1,2-エポキシ-3-(トリルオキシ)プロパン				第二種 14	○		
[5]	シアン化物（シアン化水素を含む）			第一種 108	第一種 144			○
[6]	[o-(2,6-ジクロロアニリノ)フェニル]酢酸 （別名：ジクロフェナク）					○		
[7]	(1S,4S)-4-(3,4-ジクロロフェニル)-N-メチル -1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-1-アミン （別名：セルトラリン）					○		
[8]	5,5-ジフェニル-2,4-イミダゾリジンジオン （別名：フェントイン）	第二種監視				○		
[9]	ジフェニルジスルファン（別名：ジフェ ニルジスルフィド）	第二種監視 第三種監視				○		○
[10]	3,3'-ジメチルベンジジン（別名：o-トリジ ン）	第二種監視 第三種監視		第一種 171	第一種 231			○
[11]	トリス(2,3-ジブロモプロパン-1-イル)=ホス ファート（別名：りん酸トリス(2,3-ジブ ロモプロピル)）	第三種監視						○
[12]	m-ニトロトルエン				第二種 71	○		
[13]	p-ニトロフェノール	第二種監視 第三種監視		第一種 239	第二種 72	○		
[14]	ヘキサメチレンジアミン	第二種監視		第一種 292	第一種 390	○		○
[15]	(3S,4R)-3-[(2H-1,3-ベンゾジオキシル-5-イル オキシ)メチル]-4-(4-フルオロフェニル)ピペ リジン（別名：パロキセチン）					○		

（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。

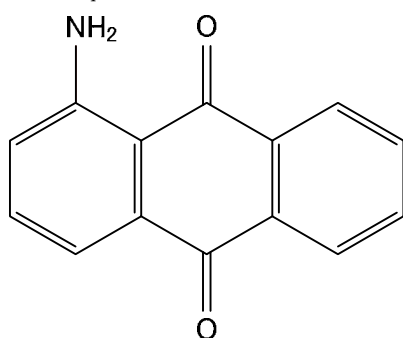
（注 2）「化審法指定区分」における「改正前」とは平成 21 年 5 月 20 日の法律改正（平成 23 年 4 月 1 日施行）前の指
定を、「改正後」とは同改正後の指定をそれぞれ意味する。

（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。なお、「改正前」「改正後」の欄における数字は第一種指定化学物質又は第
二種指定化学物質としての政令番号を意味する。

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] 1-アミノ-9,10-アントラキノン

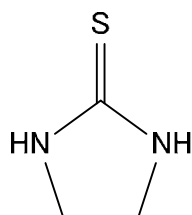
1-Amino-9,10-anthraquinone



分子式： $C_{14}H_9NO_2$
CAS： 82-45-1
既存化： 4-706
MW： 223.23
mp： $253.5^{\circ}C$ ¹⁾
bp： $300^{\circ}C$ 超 ²⁾
sw： 32mg/L ($25^{\circ}C$) ²⁾
比重等： 不詳
logPow： 3.74 ²⁾

[2] 2-イミダゾリジンチオン (別名：2-メルカプトイミダゾリン)

2-Imidazolidinethione (synonym: 2-Mercaptoimidazoline)



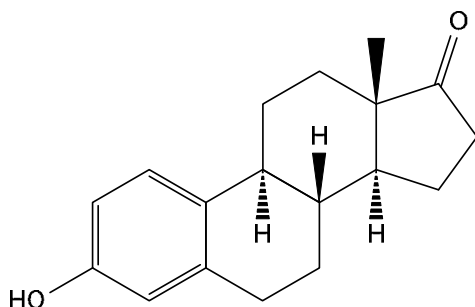
分子式： $C_3H_6N_2S$
CAS： 96-45-7
既存化： 5-423
MW： 102.16
mp： $203^{\circ}C$ ¹⁾
bp： $347.18^{\circ}C$ ³⁾
sw： 2g/100mL ($30^{\circ}C$) ⁴⁾
比重等： $1.26 \sim 1.28g/cm^3$ ($20^{\circ}C$) ⁵⁾
logPow： -0.66 ³⁾

[3] エストロン及びその代謝物

Estrone and its metabolites

[3-1] 1,3,5(10)エストラトリエン-3-オール-17-オン (別名：エストロン)

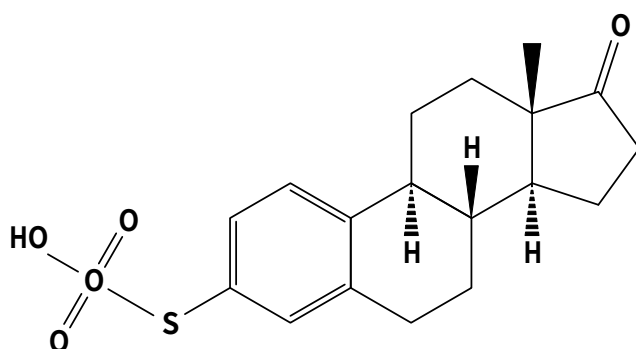
1,3,5(10)-Estratrien-3-ol-17-one (synonym: Estrone)



分子式： $C_{18}H_{22}O_2$
CAS： 53-16-7
既存化： 9-2145
MW： 270.37
mp： $260.2^{\circ}C$ ¹⁾
bp： $154^{\circ}C$ ³⁾
sw： 0.00130g/kg ($25^{\circ}C$) ¹⁾
比重等： $1.236g/cm^3$ ($25^{\circ}C$) ¹⁾
logPow： 3.13 ³⁾

[3-2] エストロン-3-硫酸

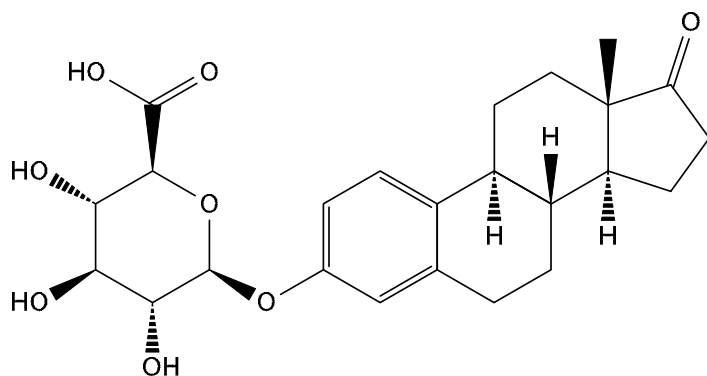
Estrone-3-sulfate



分子式： $C_{18}H_{22}O_5S$
CAS： 481-97-0
既存化： 該当なし
MW： 350.43
mp： 不詳
bp： 不詳
sw： 不詳
比重等： 不詳
logPow： 不詳

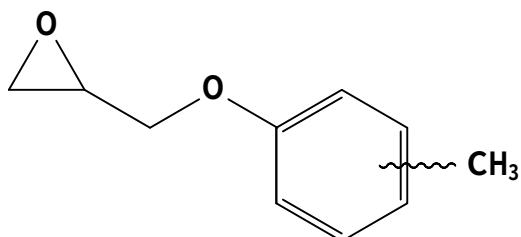
(注) 「CAS」とはCAS登録番号を、「既存化」とは既存化学物質名簿における番号を、「MW」とは分子量を、「mp」とは融点を、「bp」とは沸点を、「sw」とは水への溶解度を、「比重等」とは比重(単位なし)又は密度(単位あり)を、「logPow」とは*n*-オクタノール/水分配係数をそれぞれ意味する。以下同じ。

[3-3] エストロン-3-グルクロニド
Estrone-3-glucuronide



分子式： $C_{24}H_{30}O_8$
CAS： 2479-90-5
既存化： 該当なし
MW： 446.49
mp： 不詳
bp： 不詳
sw： 不詳
比重等： 不詳
logPow： 不詳

[4] 1,2-エポキシ-3-(トリルオキシ)プロパン
1,2-Epoxy-3-(tolylxy)propane



分子式： $C_{10}H_{12}O_2$
CAS： 26447-14-3
既存化： 3-574、3-594
MW： 164.20
mp： 不詳
bp： 170～195°C (100mbar) ⁶⁾
sw： 不詳
比重等： 1.14 (25°C) ⁶⁾
logPow： 不詳

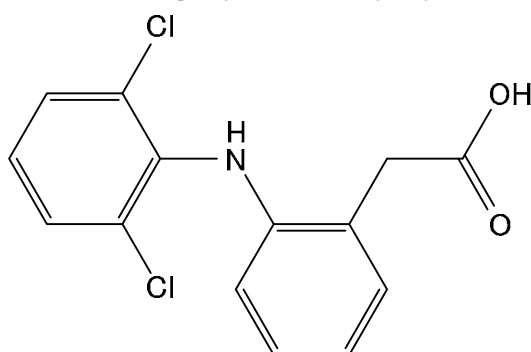
[5] シアン化物（シアン化水素を含む）
Cyanides (contains Hydrogen cyanide)



分子式： CHN
CAS： 74-90-8
既存化： 1-138
MW： 27.03
mp： -13.28°C ¹⁾
bp： 25.63°C ¹⁾
sw： 混和 ¹⁾
比重等： 0.6876g/cm³ (20°C) ¹⁾
logPow： -0.25 ³⁾

(注) 構造及び物理化学性状はシアン化水素のものを示した。

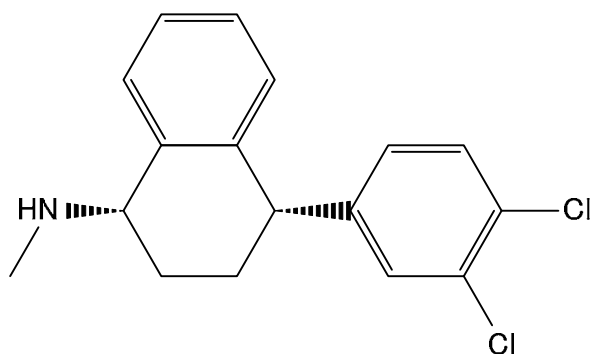
[6] [o-(2,6-ジクロロアニリノ)フェニル]酢酸（別名：ジクロフェナク）
[o-(2,6-Dichloroanilino)phenyl]acetic acid (synonym: Diclofenac)



分子式： $C_{14}H_{11}Cl_2NO_2$
CAS： 15307-86-5
既存化： 3-3082（ナトリウム塩として）
MW： 296.15
mp： 156～158°C ⁴⁾
bp： 不詳
sw： 0.00237g/L (25°C) ³⁾
比重等： 不詳
logPow： 4.51 ³⁾

[7] (1S,4S)-4-(3,4-ジクロロフェニル)-N-メチル-1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-1-アミン (別名：セルトラリン)

(1S,4S)-4-(3,4-Dichlorophenyl)-N-methyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-amine (synonym: Sertraline)



分子式： $C_{17}H_{17}Cl_2N$

CAS： 79617-96-2

既存化： 該当なし

MW： 306.23

mp： 不詳

bp： 不詳

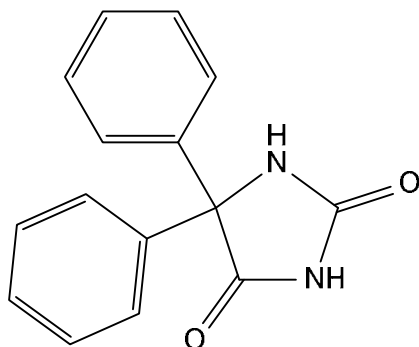
sw： 不詳

比重等： 不詳

logPow： 不詳

[8] 5,5-ジフェニル-2,4-イミダゾリジンジオン (別名：フェニトイン)

5,5-Diphenyl-2,4-Imidazolidinedione (synonym: Phenytoin)



分子式： $C_{15}H_{12}N_2O_2$

CAS： 57-41-0

既存化： 9-621

MW： 252.27

mp： $295 \sim 298^{\circ}C$ ⁴⁾

bp： 不詳

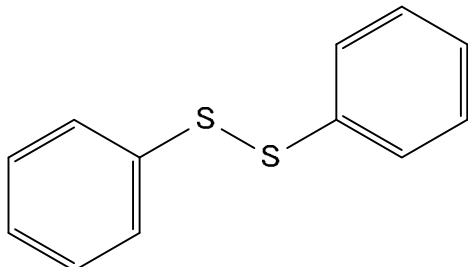
sw： $0.032g/L$ ($22^{\circ}C$) ³⁾

比重等： 不詳

logPow： 2.47 ³⁾

[9] ジフェニルジスルファン (別名：ジフェニルジスルフィド)

Diphenyldisulfane (synonym: Diphenyldisulfide)



分子式： $C_{12}H_{10}S_2$

CAS： 882-33-7

既存化： 3-1124

MW： 218.34

mp： $60.4^{\circ}C$ ¹⁾

bp： $310^{\circ}C$ ¹⁾

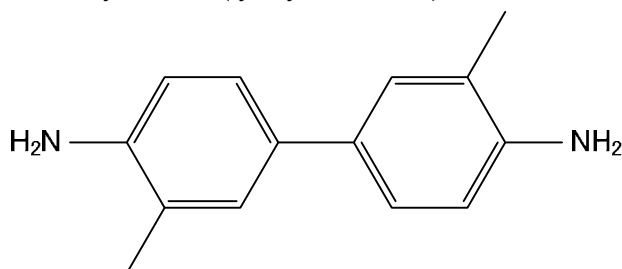
sw： 不溶 ¹⁾

比重等： $1.353g/cm^3$ ($20^{\circ}C$) ¹⁾

logPow： 4.41 ³⁾

[10] 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： $131^{\circ}C$ ¹⁾

bp： $339^{\circ}C$ ³⁾

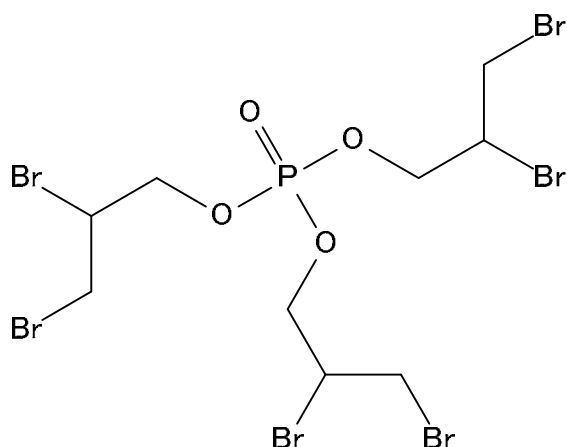
sw： $1.3g/kg$ ($25^{\circ}C$) ¹⁾

比重等： $1.234g/cm^3$ ⁶⁾

logPow： 2.34 ³⁾

[11] トリス(2,3-ジブロモプロパン-1-イル)=ホスファート (別名：りん酸トリス(2,3-ジブロモプロピル))

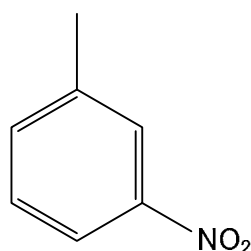
Tris(2,3-dibromopropan-1-yl) phosphate (synonym: Tris(2,3- dibromopropyl) phosphate)



分子式： $C_9H_{15}Br_6O_4P$
 CAS： 126-72-7
 既存化： 2-1941、 2-1955、 2-2188
 MW： 697.61
 mp： $5.5^{\circ}C$ ³⁾
 bp： $390^{\circ}C$ ⁷⁾
 sw： 0.008g/L ($24^{\circ}C$) ³⁾
 比重等： 2.27 ($25^{\circ}C$) ⁶⁾
 logPow： 4.29 ³⁾

[12] *m*-ニトロトルエン

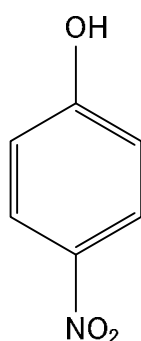
m-Nitrotoluene



分子式： $C_7H_7NO_2$
 CAS： 99-08-1
 既存化： 3-437
 MW： 137.14
 mp： $15.9^{\circ}C$ ¹⁾
 bp： $232.1^{\circ}C$ ¹⁾
 sw： 0.50g/kg ($30^{\circ}C$) ¹⁾
 比重等： 1.1581g/cm³ ($20^{\circ}C$) ¹⁾
 logPow： 2.40 ⁴⁾

[13] *p*-ニトロフェノール

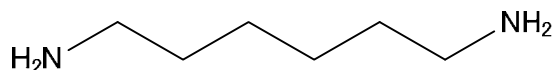
p-Nitrophenol



分子式： $C_6H_5NO_3$
 CAS： 100-02-7
 既存化： 3-777
 MW： 139.11
 mp： $113.8^{\circ}C$ ¹⁾
 bp： $279^{\circ}C$ ³⁾
 sw： 15.8g/kg ($20^{\circ}C$) ¹⁾
 比重等： 1.479g/cm³ ($20^{\circ}C$) ¹⁾
 logPow： 1.91 ³⁾

[14] ヘキサメチレンジアミン

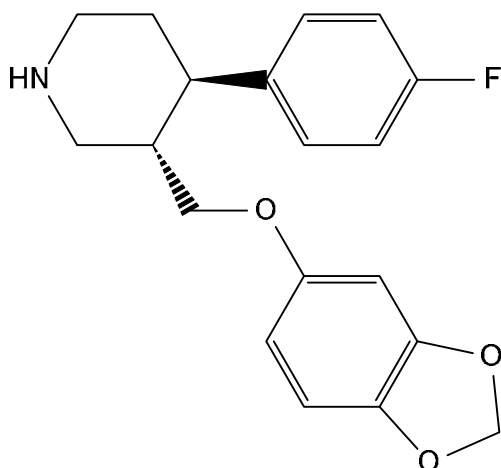
Hexamethylenediamine



分子式： $C_6H_{16}N_2$
 CAS： 124-09-4
 既存化： 2-153
 MW： 116.20
 mp： $38.8^{\circ}C$ ¹⁾
 bp： $197^{\circ}C$ ¹⁾
 sw： 約 720g/kg ($5^{\circ}C$) ¹⁾
 比重等： 0.854 ($25^{\circ}C$) ⁴⁾
 logPow： 0.02 ²⁾

[15] (3*S*,4*R*)-3-[(2*H*-1,3-ベンゾジオキシル-5-イルオキシ)メチル]-4-(4-フルオロフェニル)ピペリジン (別名: パロキセチン)

(3*S*,4*R*)-3-[(2*H*-1,3-Benzodioxol-5-yloxy)methyl]-4-(4-fluorophenyl)piperidine (synonym: Paroxetine)



分子式: $C_{19}H_{20}FNO_3$

CAS: 61869-08-7

既存化: 該当なし

MW: 329.37

mp: 不詳

bp: 不詳

sw: 1.131g/L (25°C) ⁶⁾

比重等: 不詳

logPow: 1.23 ⁶⁾

参考文献

- 1) Rumble, J.R. (ed), CRC Handbook of Chemistry and Physics 98th Edition (2017), The Royal society of Chemistry.
- 2) OECD, Screening Information Dataset (SIDS) for High Product in Volume Chemicals (Processed by UNEP Chemicals) (<http://www.inchem.org/pages/sids.html>, 2017年9月21日閲覧)
- 3) U.S. EPA, Estimation Programs Interface (EPI) Suite v4.1 (<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.html>)
- 4) O'Neil, M.J. (ed), The Merck Index 15th Edition (2013), CRC Press.
- 5) International Programme on Chemical Safety, International Chemical Safety Cards (ICSC) (http://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang-en/index.htm, 2017年10月5日閲覧)
- 6) U.S. National Library of Medicine, Hazardous Substances Data Bank (HSDB) (<https://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, 2017年8月31日閲覧)
- 7) World Health Organization, Environmental Health Criteria EHC173 (1995)