

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

2018年度の初期環境調査においては、19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]	<i>o</i> -アセトキシ安息香酸（別名：アスピリン）					○		
[2]	<i>o</i> -アニシジン	第二種監視		第一種 14	第一種 17			○
[3]	2-エチルヘキサン酸	第二種監視			第一種 51	○		
[4]	2-エトキシ-1-[2-(5-オキソ-4,5-ジヒドロ-1,2,4-オキサジアゾール-3-イル)ピフェニル-4-イル]メチル]-1 <i>H</i> -ベンゾイミダゾール-7-カルボン酸（別名：アジルサルタン）					○		
[5]	3-クロロ-5-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]-10,11-ジヒドロ-5 <i>H</i> -ジベンゾ[<i>b,f</i>]アゼピン（別名：クロミプラミン）					○		
[6]	6-クロロ-7-スルファモイル-3,4-ジヒドロベンゾ[<i>e</i>][1,2,4]-2 <i>H</i> -チアジアジン=1,1-オキシド（別名：ヒドロクロロチアジド）					○		
[7]	1-(2-クロロトリチル)イミダゾール（別名：クロトリマゾール）					○		
[8]	2-(4-{2-[4-クロロベンゾイル]アミノ}エチル}フェノキシ)-2-メチルプロパン酸（別名：ベザフィブラート）					○		
[9]	サリチル酸及びその塩類（サリチル酸ナトリウムとして）					○		
[10]	5 <i>H</i> -ジベンゾ[<i>b,f</i>]アゼピン-5-カルボキサミド（別名：カルバマゼピン）					○		
[11]	トリフルオロ酢酸							○
[12]	1,3,7-トリメチル-1 <i>H</i> -プリン-2,6(3 <i>H</i> ,7 <i>H</i>)-ジオン（別名：カフェイン）					○		
[13]	2-ナフチルアミン							○
[14]	<i>p</i> - <i>tert</i> -ブチル安息香酸					○		○
[15]	5-(プロピオチオ)-1 <i>H</i> -ベンゾイミダゾール-2-イルカルバミド酸メチル（別名：アルベンダゾール）及びその代謝物							
	[15-1] 5-(プロピオチオ)-1 <i>H</i> -ベンゾイミダゾール-2-イルカルバミド酸メチル（別名：アルベンダゾール）					○		
	[15-2] 5-(プロピルスルホニル)-1 <i>H</i> -ベンゾイミダゾール-2-イルアミン（別名：アルベンダゾール-2-アミノスルホン）					○		
	[15-3] 5-(プロピルスルフィニル)-1 <i>H</i> -ベンゾイミダゾール-2-イルカルバミド酸メチル（別名：アルベンダゾールスルホキシド）					○		
	[15-4] 5-(プロピルスルホニル)-1 <i>H</i> -ベンゾイミダゾール-2-イルカルバミド酸メチル（別名：アルベンダゾールスルホン）					○		

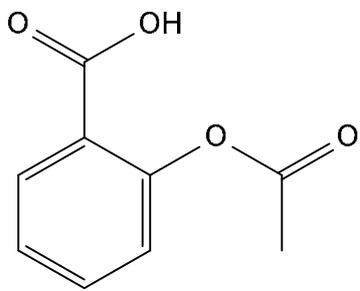
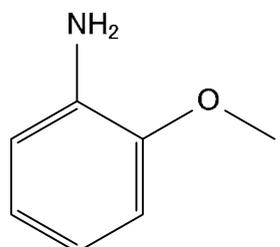
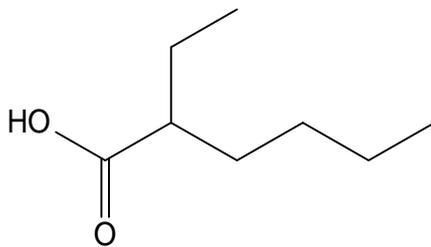
物質調査番号	調査対象物質	化審法指定区分 ^{注1, 2}		化管法指定区分 ^{注3}		調査媒体		
		改正前	改正後	改正前	改正後	水質	底質	大気
[16]	2-(<i>m</i> -ベンゾイルフェニル)プロピオン酸 (別名：ケトプロフェン)					○		
[17]	ベンゾ[<i>a</i>]ピレン					○	○	
[18]	(<i>E</i>)-5-メトキシ-4'-(トリフルオロメチル)パレロフェノン=O-(2-アミノエチル)オキシム (別名：フルボキサミン)					○		
[19]	2-メトキシ-5-メチルアニリン	第二種監視		第一種 344	第一種 451			○

(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2009年5月20日の法律改正(2011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2008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。

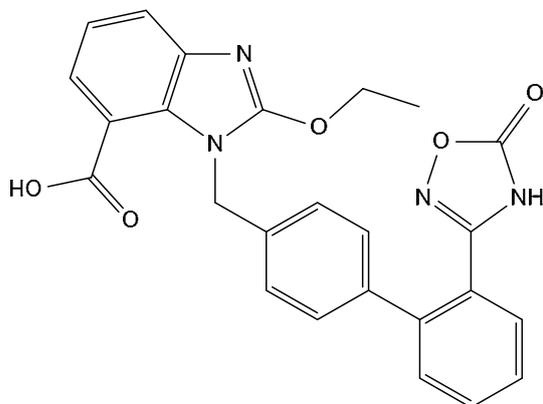
初期環境調査の調査対象物質の物理化学的性状は次のとおりである。

<p>[1] <i>o</i>-アセトキシ安息香酸 (別名：アスピリン) <i>o</i>-Acetoxybenzoic acid (synonym: Aspirin)</p> 	<p>分子式： C₉H₈O₄ CAS： 50-78-2 既存化： 3-1652 MW： 180.16 mp： 135°C (急速加熱)¹⁾ bp： 不詳 sw： 1g/300mL (25°C)¹⁾ 比重等： 1.4¹⁾ logPow： 1.19²⁾</p>
<p>[2] <i>o</i>-アニシジン <i>o</i>-Anisidine</p> 	<p>分子式： C₇H₉NO CAS： 90-04-0 既存化： 3-682 MW： 123.15 mp： 5°C¹⁾ bp： 225°C¹⁾ sw： 13g/L (25°C)²⁾ 比重等： 1.098 (15°C/15°C)¹⁾ logPow： 1.18²⁾</p>
<p>[3] 2-エチルヘキサン酸 2-Ethylhexanoic acid</p> 	<p>分子式： C₈H₁₆O₂ CAS： 149-57-5 既存化： 2-608 MW： 144.21 mp： -59°C³⁾ bp： 227.5°C⁴⁾ sw： 2g/L (20°C)⁵⁾ 比重等： 0.9031g/cm³ (25°C)⁴⁾ logPow： 2.64²⁾</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、「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。

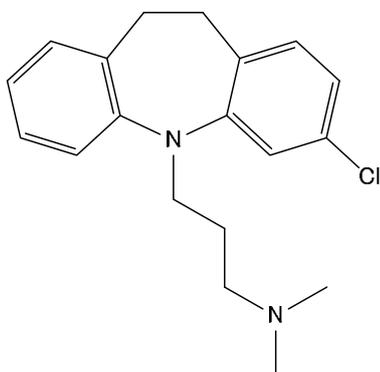
[4] 2-エトキシ-1-{[2'-(5-オキソ-4,5-ジヒドロ-1,2,4-オキサジアゾール-3-イル)ビフェニル-4-イル]メチル}-1*H*-ベンゾイミダゾール-7-カルボン酸 (別名: アジルサルタン)

2-Ethoxy-1-{[2'-(5-oxo-2,5-dihydro-1,2,4-oxadiazol-3-yl)biphenyl-4-yl]methyl}-1*H*-benzimidazole-7-carboxylic acid (synonym: Azilsartan)



分子式: C₂₅H₂₀N₄O₅
CAS: 147403-03-0
既存化: 該当なし
MW: 456.46
mp: 212-214°C¹⁾
bp: 不詳
sw: 不詳
比重等: 不詳
logPow: 0.90¹⁾

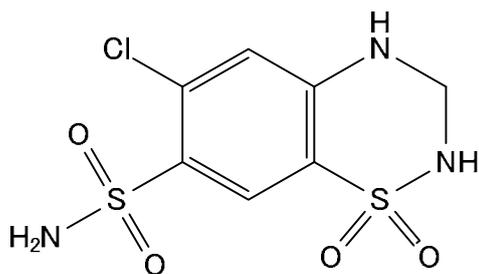
[5] 3-クロロ-5-[3'-(ジメチルアミノ)プロピル]-10,11-ジヒドロ-5*H*-ジベンゾ[*b,f*]アゼピン (別名: クロミプラミン)
3-(3-Chloro-5-[3'-(dimethylamino)propyl]-10,11-dihydro-5*H*-dibenzo[*b,f*]azepin (synonym: Clomipramine)



分子式: C₁₉H₂₃ClN₂
CAS: 303-49-1
既存化: 9-372
MW: 314.86
mp: 189.5°C⁵⁾
bp: 160~170°C (0.3mm Hg)¹⁾
sw: 不詳
比重等: 不詳
logPow: 5.19²⁾

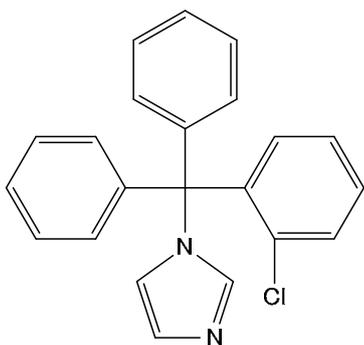
[6] 6-クロロ-7-スルファモイル-3,4-ジヒドロベンゾ[*e*][1,2,4]-2*H*-チアジアジン=1,1-ジオキシド (別名: ヒドロクロロチアジド)

6-Chloro-7-sulfamoyl-3,4-dihydrobenzo[*e*][1,2,4]-2*H*-thiadiazine 1,1-dioxide (synonym: Hydrochlorothiazide)

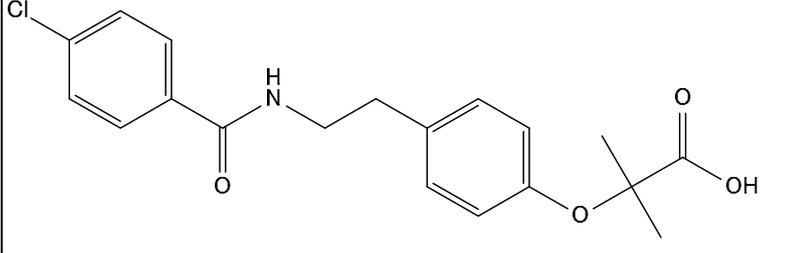
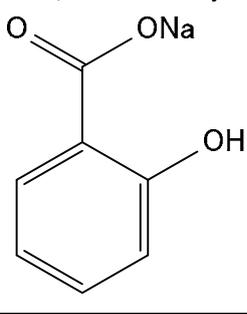
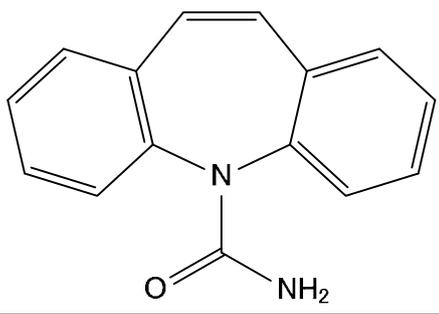
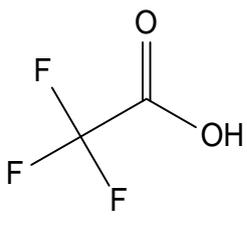
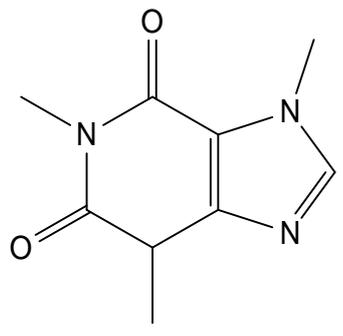


分子式: C₇H₈ClN₃O₄S₂
CAS: 58-93-5
既存化: 該当なし
MW: 297.73
mp: 273~275°C¹⁾
bp: 不詳
sw: 0.722g/L (25°C)²⁾
比重等: 1.693g/cm³²⁾
logPow: -0.07²⁾

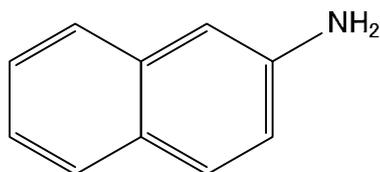
[7] 1-(2-クロロトリチル)イミダゾール (別名: クロトリマゾール)
1-(2-Chlorotriptyl)imidazole (synonym: Clotrimazole)



分子式: C₂₂H₁₇ClN₂
CAS: 23593-75-1
既存化: 該当なし
MW: 344.84
mp: 147~149°C¹⁾
bp: 不詳
sw: ほとんど溶けない¹⁾
比重等: 不詳
logPow: 不詳

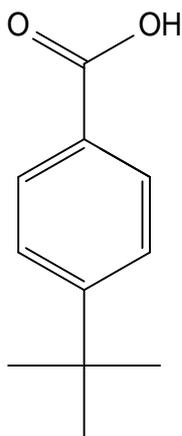
<p>[8] 2-(4-{2-[(4-クロロベンゾイル)アミノ]エチル}フェノキシ)-2-メチルプロパン酸 (別名: ベザフィブラート) 2-(4-{2-[(4-Chlorobenzoyl)amino]ethyl}phenoxy)-2-methylpropanoic acid (synonym: Bezafibrate)</p> 	<p>分子式: $C_{19}H_{20}ClNO_4$ CAS: 41859-67-0 既存化: 該当なし MW: 361.82 mp: $186^{\circ}C$ ¹⁾ bp: 不詳 sw: 不詳 比重等: 不詳 logPow: 不詳</p>
<p>[9] サリチル酸及びその塩類 (サリチル酸ナトリウムとして) Salicylic acid and its salts (as Sodium salicylate)</p> 	<p>分子式: $C_7H_5NaO_3$ CAS: 54-21-7 既存化: 3-1639 MW: 160.10 mp: $440^{\circ}C$ ¹⁾ bp: 不詳 sw: $125g/L$ ($25^{\circ}C$) ⁵⁾ 比重等: 1.443 ($20^{\circ}C/4^{\circ}C$、サリチル酸として) ¹⁾ logPow: -1.43 ⁵⁾</p>
<p>[10] 5H-ジベンゾ[b,f]アゼピン-5-カルボキサミド (別名: カルバマゼピン) 5H-Dibenzo[b,f]azepine-5-carboxamide (synonym: Carbamazepine)</p> 	<p>分子式: $C_{15}H_{12}N_2O$ CAS: 298-46-4 既存化: 9-630 MW: 236.27 mp: $190\sim 193^{\circ}C$ ¹⁾ bp: 不詳 sw: ほとんど溶けない ¹⁾ 比重等: 不詳 logPow: 2.45 ²⁾</p>
<p>[11] トリフルオロ酢酸 Trifluoroacetic acid</p> 	<p>分子式: $C_2HF_3O_2$ CAS: 76-05-1 既存化: 2-1185 MW: 114.02 mp: $-15.4^{\circ}C$ ¹⁾ bp: $72.4^{\circ}C$ ¹⁾ sw: $1,000g/L$ ($20^{\circ}C$) ⁵⁾ 比重等: 1.5351 ($20^{\circ}C$) ¹⁾ logPow: -2.1 ³⁾</p>
<p>[12] 1,3,7-トリメチル-1H-プリン-2,6(3H,7H)-ジオン (別名: カフェイン) 1,3,7-Trimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione (synonym: Caffeine)</p> 	<p>分子式: $C_8H_{10}N_4O_2$ CAS: 58-08-2 既存化: 9-419 MW: 194.19 mp: $238^{\circ}C$ ¹⁾ bp: $178^{\circ}C$ (昇華) ¹⁾ sw: $21.7g/kg$ ($25^{\circ}C$) ⁴⁾ 比重等: 1.23 ($18^{\circ}C/4^{\circ}C$) ¹⁾ logPow: -0.091 ($23^{\circ}C$) ⁶⁾</p>

[13] 2-ナフチルアミン
2-Naphthylamine



分子式 : C₁₀H₉N
CAS : 91-59-8
既存化 : 該当なし
MW : 143.18
mp : 111~113°C¹⁾
bp : 306°C¹⁾
sw : 0.189g/kg (20°C)⁴⁾
比重等 : 1.061 (98°C/4°C)¹⁾
logPow : 2.28²⁾

[14] *p*-tert-ブチル安息香酸
p-tert-Butylbenzoic acid



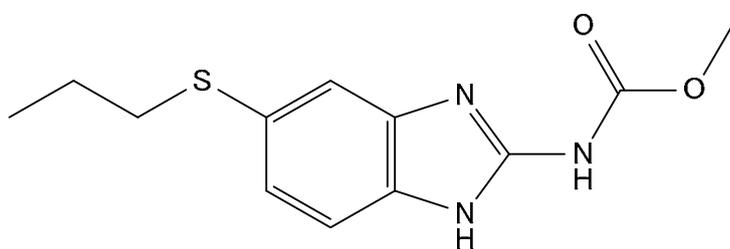
分子式 : C₁₁H₁₄O₂
CAS : 98-73-7
既存化 : 3-1338
MW : 178.23
mp : 164°C⁴⁾
bp : 不詳
sw : 0.028g/L (25°C)⁵⁾
比重等 : 不詳
logPow : 3.85⁵⁾

[15] 5-(プロピオチオ)-1*H*-ベンゾイミダゾール-2-イルカルバミド酸メチル (別名: アルベンダゾール) 及びその代謝物

5-(Propylthio)-1*H*-benzimidazol-2-yl carbamic acid methyl ester (synonym: Albendazole) and its metabolites

[15-1] 5-(プロピオチオ)-1*H*-ベンゾイミダゾール-2-イルカルバミド酸メチル (別名: アルベンダゾール)

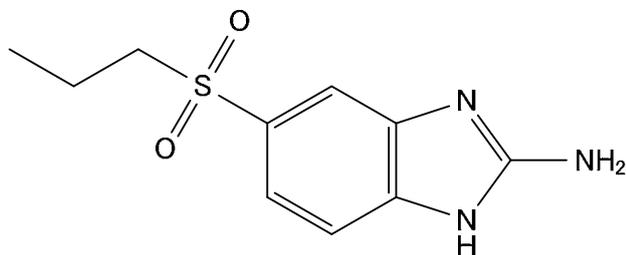
5-(Propylthio)-1*H*-benzimidazol-2-yl carbamic acid methyl ester (synonym: Albendazole)



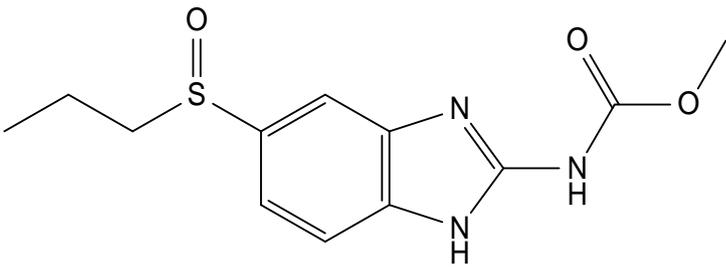
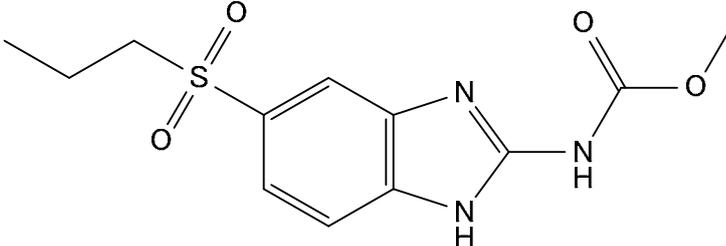
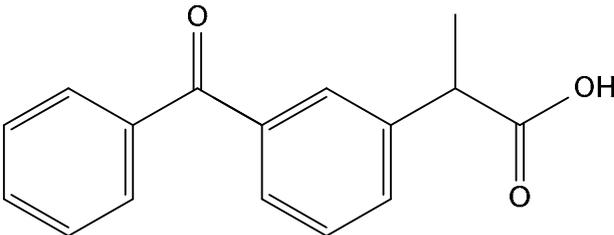
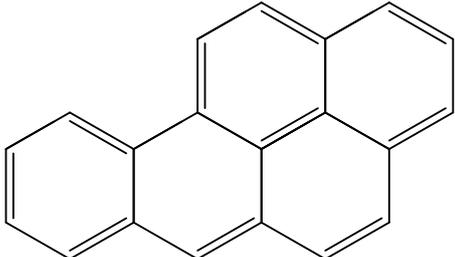
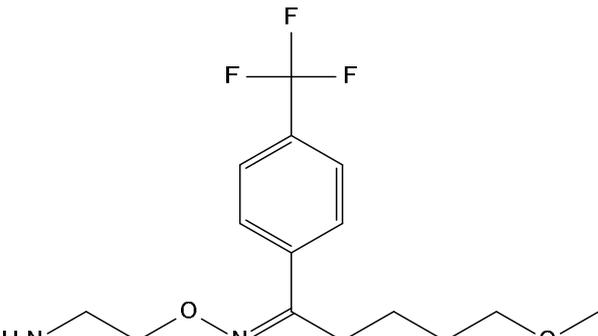
分子式 : C₁₂H₁₅N₃O₂S
CAS : 54965-21-8
既存化 : 該当なし
MW : 265.33
mp : 208~210°C¹⁾
bp : 不詳
sw : ほとんど溶けない¹⁾
比重等 : 不詳
logPow : 3.07⁵⁾

[15-2] 5-(プロピルスルホニル)-1*H*-ベンゾイミダゾール-2-イルアミン (別名: アルベンダゾール-2-アミノスルホン)

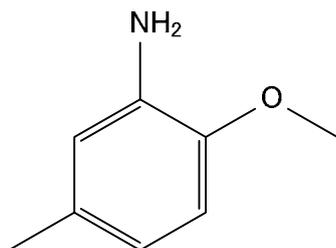
5-(Propylsulfonyl)-1*H*-benzimidazol-2-yl amine (synonym: Albendazole-2-amino sulfone)



分子式 : C₁₀H₁₃N₃O₂S
CAS : 80983-34-2
既存化 : 該当なし
MW : 239.29
mp : 不詳
bp : 不詳
sw : 不詳
比重等 : 不詳
logPow : 不詳

<p>[15-3] 5-(プロピルスルフィニル)-1<i>H</i>-ベンゾイミダゾール-2-イルカルバミド酸メチル (別名: アルベンダゾールスルホキシド)</p> <p>5-(Propylsulfinyl)-1<i>H</i>-benzimidazol-2-yl carbamic acid methyl ester (synonym: Albendazole sulfoxide)</p> 	<p>分子式: C₁₂H₁₅N₃O₃S</p> <p>CAS: 54029-12-8</p> <p>既存化: 該当なし</p> <p>MW: 281.33</p> <p>mp: 226~228°C¹⁾</p> <p>bp: 不詳</p> <p>sw: 不詳</p> <p>比重等: 不詳</p> <p>logPow: 不詳</p>
<p>[15-4] 5-(プロピルスルホニル)-1<i>H</i>-ベンゾイミダゾール-2-イルカルバミド酸メチル (別名: アルベンダゾールスルホン)</p> <p>5-(Propylsulfonyl)-1<i>H</i>-benzimidazol-2-yl carbamic acid methyl ester (synonym: Albendazole sulfone)</p> 	<p>分子式: C₁₂H₁₅N₃O₄S</p> <p>CAS: 75184-71-3</p> <p>既存化: 該当なし</p> <p>MW: 297.33</p> <p>mp: 不詳</p> <p>bp: 不詳</p> <p>sw: 不詳</p> <p>比重等: 不詳</p> <p>logPow: 不詳</p>
<p>[16] 2-(<i>m</i>-ベンゾイルフェニル)プロピオン酸 (別名: ケトプロフェン)</p> <p>2-(<i>m</i>-Benzoylphenyl)propionic acid (synonym: Ketoprofen)</p> 	<p>分子式: C₁₆H₁₄O₃</p> <p>CAS: 22071-15-4</p> <p>既存化: 該当なし</p> <p>MW: 254.29</p> <p>mp: 94°C¹⁾</p> <p>bp: 不詳</p> <p>sw: 0.051g/L (22°C)⁵⁾</p> <p>比重等: 不詳</p> <p>logPow: 3.12⁵⁾</p>
<p>[17] ベンゾ[<i>a</i>]ピレン</p> <p>Benzo[<i>a</i>]pyrene</p> 	<p>分子式: C₂₀H₁₂</p> <p>CAS: 50-32-8</p> <p>既存化: 該当なし</p> <p>MW: 252.31</p> <p>mp: 179~179.3°C¹⁾</p> <p>bp: 310~312°C (10mm Hg)¹⁾</p> <p>sw: 0.0000043g/kg (25°C)⁴⁾</p> <p>比重等: 1.351²⁾</p> <p>logPow: 6.20⁴⁾</p>
<p>[18] (<i>E</i>)-5-メトキシ-4'-(トリフルオロメチル)バレロフェノン=O-(2-アミノエチル)オキシム (別名: フルボキサミン)</p> <p>(<i>E</i>)-5-Methoxy-4'-(trifluoromethyl)valerophenone <i>O</i>-(2-aminoethyl)oxime (synonym: Fluvoxamine)</p> 	<p>分子式: C₁₅H₂₁F₃N₂O₂</p> <p>CAS: 54739-18-3</p> <p>既存化: 該当なし</p> <p>MW: 318.34</p> <p>mp: 不詳</p> <p>bp: 不詳</p> <p>sw: 不詳</p> <p>比重等: 不詳</p> <p>logPow: 不詳</p>

[19] 2-メトキシ-5-メチルアニリン
2-Methoxy-5-methylaniline



分子式 : C₈H₁₁NO
CAS : 120-71-8
既存化 : 3-614
MW : 137.18
mp : 53°C ⁴⁾
bp : 235°C ⁴⁾
sw : 難溶 ⁴⁾
比重等 : 不詳
logPow : 1.74 ²⁾

参考文献

- 1) O'Neil, M.J. (ed), The Merck Index 15th Edition (2013), CRC Press.
- 2) U.S. National Library of Medicine, Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
(<https://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>、2019年9月閲覧)
- 3) International Programme on Chemical Safety, International Chemical Safety Cards (ICSC)
(http://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang--en/index.htm、2019年11月閲覧)
- 4) Rumble, J.R. (ed), CRC Handbook of Chemistry and Physics 98th Edition (2017), The Royal Society of Chemistry.
- 5) U.S. EPA, Estimation Programs Interface (EPI) Suite v4.1 (<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.html>)
- 6) OECD, Screening Information Dataset (SIDS) for High Production Volume Chemicals (Processed by UNEP Chemicals)
(<http://www.inchem.org/pages/sids.html>、2019年9月閲覧)