

## 1. 調査目的

詳細環境調査は、「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）（以下「化審法」という。）の優先評価化学物質のリスク評価等を行うため、一般環境中における全国的なばく露評価について検討するための資料とすることを目的としている。

## 2. 調査対象物質

2019年度の詳細環境調査においては、7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 <sup>注1</sup>		化管法指定区分 <sup>注2,3</sup>		調査媒体		
		改正前	改正後	2000年～	2008年～	水質	底質	生物
[1]	イソシアヌル酸					○		
[2]	環状ポリジメチルシロキサン類							
	[2-1] オクタメチルシクロテトラシロキサン		監視			注4		○
	[2-2] デカメチルシクロペンタシロキサン					注4		○
	[2-3] ドデカメチルシクロヘキサシロキサン		監視			注4		○
[3]	クラリスロマイシン及びその代謝物							
	[3-1] クラリスロマイシン					○		
	[3-2] 14-(R)-ヒドロキシクラリスロマイシン					○		
[4]	2,6-ジ- <i>tert</i> -ブチル-4-メチルフェノール (別名：BHT)	第三種監視	優先評価		第一種 207	○	○	○
[5]	N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアラルアミド		優先評価			○	○	
[6]	N,N-ジメチルアルカン-1-アミン=N-オキシド類		優先評価					
	[6-1] N,N-ジメチルデシル-1-アミン=N-オキシド					○		
	[6-2] N,N-ジメチルドデシル-1-アミン=N-オキシド			第一種 166	第一種 224	○		
	[6-3] N,N-ジメチルテトラデシル-1-アミン=N-オキシド					○		
	[6-4] N,N-ジメチルオクタデシル-1-アミン=N-オキシド					○		
[7]	ビス(N,N-ジメチルジチオカルバミン酸)N,N'-エチレンビス(チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名：ポリカーパメート)	第三種監視	優先評価	第一種 250	第一種 329			
	[7-1] N,N'-エチレンビス(ジチオカルバミン酸)					○		
	[7-2] N,N-ジメチルジチオカルバミン酸					○		

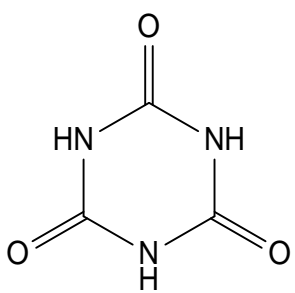
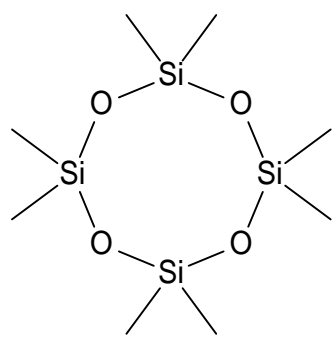
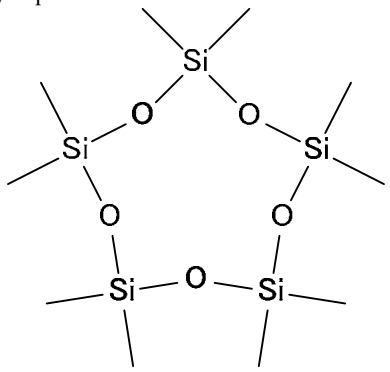
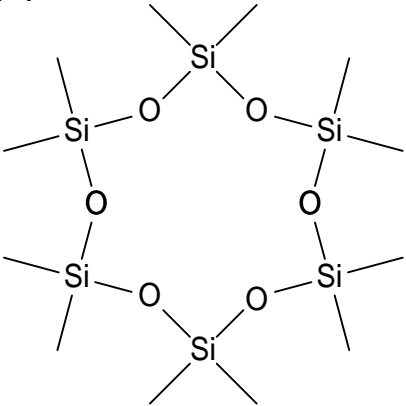
(注1) 「化審法指定区分」における「改正前」とは2009年5月20日の法律改正（2011年4月1日施行）前の指定を、「改正後」とは同改正後の指定をそれぞれ意味する。

(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）をいう。以下同じ。

(注3) 「化管法指定区分」における「2000年～」とは2000年6月7日の政令制定時の指定を、「2008年～」とは2008年11月21日の政令改正後の指定をそれぞれ意味する。なお、それぞれ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。

(注4) [2] 環状ポリジメチルシロキサン類については、生物の他に水質においても2019年度に調査を実施したが、分析結果に疑義が生じており、2020年度も調査を実施し、その結果を踏まえて2019年度の結果を採用するか改めて判断することとしており、本書には掲載しないこととした。

詳細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] イソシアヌル酸 Isocyanuric acid</p> 	<p>分子式 : C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub> CAS : 108-80-5 既存化 : 5-1037、5-1038 MW : 129.07 mp : 330°C<sup>1)</sup> bp : 330°C以上で昇華<sup>2)</sup> sw : 1.994g/L (25°C)<sup>3)</sup> 比重等 : 2.5g/cm<sup>3</sup><sup>4)</sup> logPow : 0.3 未満<sup>1),4)</sup></p>
<p>[2] 環状ポリジメチルシロキサン類 Cyclopolydimethylsiloxanes</p>	
<p>[2-1] オクタメチルシクロテトラシロキサン Octamethylcyclotetrasiloxane</p> 	<p>分子式 : C<sub>8</sub>H<sub>24</sub>O<sub>4</sub>Si<sub>4</sub> CAS : 556-67-2 既存化 : 7-475 (環状ポリアルキルシロキサン(アルキル基の炭素数が1から20までのもの) MW : 296.62 mp : 17.10°C<sup>5)</sup> bp : 175.4°C<sup>5)</sup> sw : 6.124×10<sup>-5</sup> g/L (25°C)<sup>3)</sup> 比重等 : 0.9561g/cm<sup>3</sup><sup>5)</sup> logPow : 6.74<sup>2)</sup></p>
<p>[2-2] デカメチルシクロペンタシロキサン Decamethylcyclopentasiloxane</p> 	<p>分子式 : C<sub>10</sub>H<sub>30</sub>O<sub>5</sub>Si<sub>5</sub> CAS : 541-02-6 既存化 : 7-475 (環状ポリアルキルシロキサン(アルキル基の炭素数が1から20までのもの) MW : 370.77 mp : -37.0°C<sup>5)</sup> bp : 213°C<sup>5)</sup> sw : 1.419×10<sup>-5</sup> g/L (25°C)<sup>3)</sup> 比重等 : 0.9593 g/cm<sup>3</sup><sup>5)</sup> logPow : 8.06<sup>2)</sup></p>
<p>[2-3] ドデカメチルシクロヘキサシロキサン Dodecamethylcyclohexasiloxane</p> 	<p>分子式 : C<sub>12</sub>H<sub>36</sub>O<sub>6</sub>Si<sub>6</sub> CAS : 540-97-6 既存化 : 7-475 (環状ポリアルキルシロキサン(アルキル基の炭素数が1から20までのもの) MW : 444.92 mp : -4.2°C<sup>5)</sup> bp : 245.0°C<sup>2),5)</sup> sw : 5.266×10<sup>-6</sup> g/L (25°C)<sup>3)</sup> 比重等 : 0.9672 g/cm<sup>3</sup><sup>2),5)</sup> logPow : 8.87<sup>2)</sup></p>

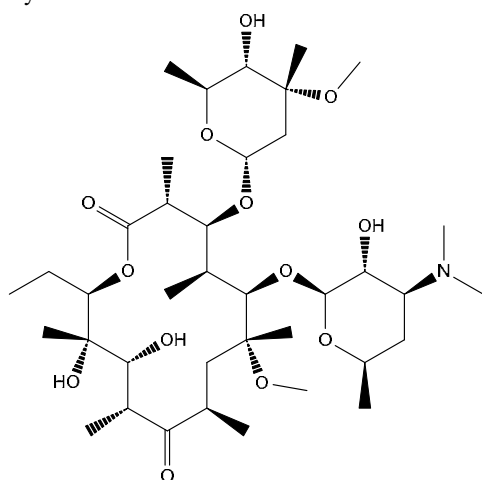
「mp」は融点を、「bp」とは沸点を、「sw」とは水への溶解度を、「比重等」とは比重(単位なし)又は密度(単位あり)を、「logPow」とは*n*-オクタノール/水分配係数をそれぞれ意味する。

[3] クラリスロマイシン及びその代謝物

Clarithromycin and its metabolite

[3-1] クラリスロマイシン

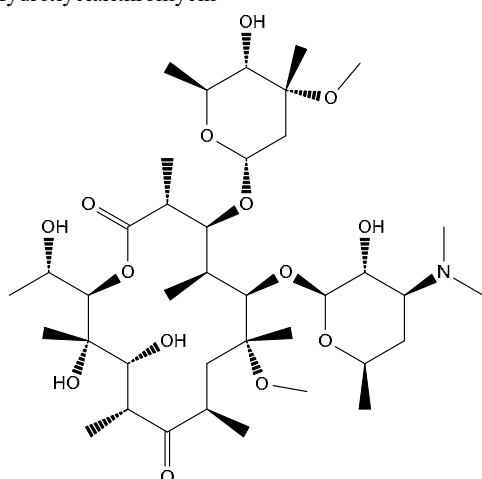
Clarithromycin



分子式 : C<sub>38</sub>H<sub>69</sub>NO<sub>13</sub>  
CAS : 81103-11-9  
既存化 : 該当なし  
MW : 747.95  
mp : 222~225°C<sup>6)</sup>  
bp : 不詳  
sw : 0.000342g/L (25°C)<sup>3)</sup>  
比重等 : 不詳  
logPow : 3.16<sup>3)</sup>

[3-2] 14-(R)-ヒドロキシクラリスロマイシン

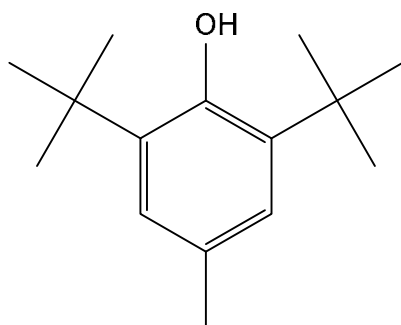
14-(R)-Hydroxyclearithromycin



分子式 : C<sub>38</sub>H<sub>69</sub>NO<sub>14</sub>  
CAS : 116836-41-0  
既存化 : 該当なし  
MW : 763.95  
mp : 217~220°Cで分解、222~225°C  
としても報告あり<sup>2)</sup>  
bp : 不詳  
sw : 不詳  
比重等 : 不詳  
logPow : 3.16<sup>2)</sup>

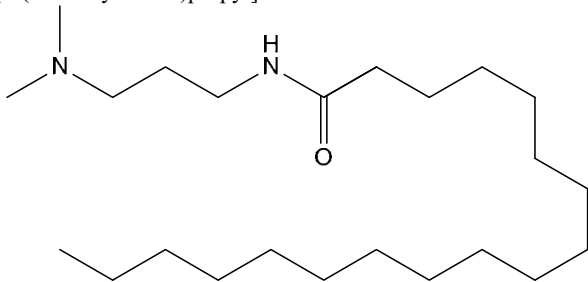
[4] 2,6-ジ-tert-ブチル-4-メチルフェノール (別名 : BHT)

2,6-Di-tert-butyl-4-methylphenol (synonym: BHT)



分子式 : C<sub>15</sub>H<sub>24</sub>O  
CAS : 128-37-0  
既存化 : 3-540 (トリアルキル (又はアルケニル) フェノール (アルキル基又はアルケニル基の炭素数が1から4までのもの)、9-1805 (p-クレゾールとイソブチレンの反応生成物)  
MW : 220.36  
mp : 70°C<sup>1), 2), 6)</sup>  
bp : 265°C<sup>2)</sup>  
sw : 0.005748g/L (25°C)<sup>3)</sup>  
比重等 : 1.048g/cm<sup>3</sup> (20°C/4°C)<sup>2)</sup>  
logPow : 5.10<sup>3), 4)</sup>

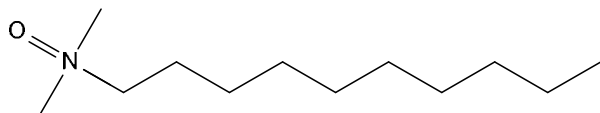
[5] *N*-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアルアミド  
*N*-[3-(Dimethylamino)propyl]stearamide



分子式 : C<sub>23</sub>H<sub>48</sub>N<sub>2</sub>O  
CAS : 7651-02-7  
既存化 : 2-2509、2-2521  
MW : 368.65  
mp : 不詳  
bp : 不詳  
sw : 2.525 × 10<sup>-6</sup> g/L (25°C)<sup>3)</sup>  
比重等 : 不詳  
logPow : 不詳

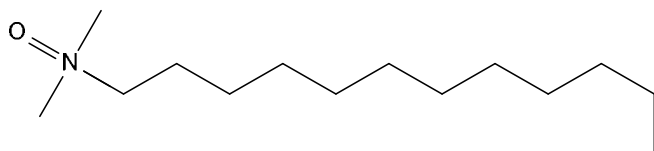
[6] *N,N*-ジメチルアルカン-1-アミン=*N*-オキシド類  
*N,N*-Dimethylalkane-1-amine *N*-oxides

[6-1] *N,N*-ジメチルデシル-1-アミン=*N*-オキシド  
*N,N*-Dimethyldecyl-1-amine *N*-oxide



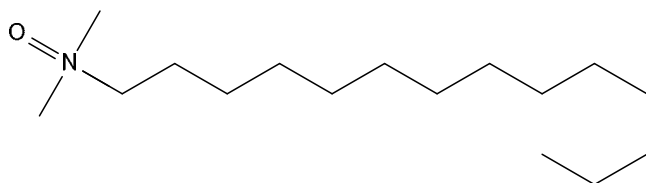
分子式 : C<sub>12</sub>H<sub>27</sub>NO  
CAS : 2605-79-0  
既存化 : 2-198 (アルキル (又はアルケニル) アミンオキシド (アルキル基又はアルケニル基のうちの少なくとも1個は炭素数が8から24までで、他は炭素数が1から5までのもの) )  
MW : 201.35  
mp : 不詳  
bp : 不詳  
sw : 0.03035g/L (25°C)<sup>3)</sup>  
比重等 : 不詳  
logPow : 不詳

[6-2] *N,N*-ジメチルドデシル-1-アミン=*N*-オキシド  
*N,N*-Dimethyldodecyl-1-amine *N*-oxide



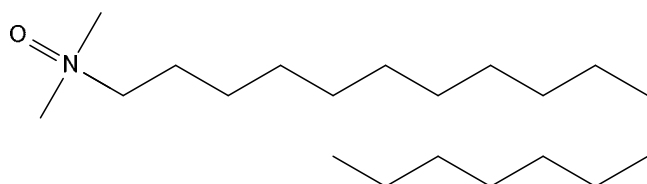
分子式 : C<sub>14</sub>H<sub>31</sub>NO  
CAS : 1643-20-5  
既存化 : 2-198 (アルキル (又はアルケニル) アミンオキシド (アルキル基又はアルケニル基のうちの少なくとも1個は炭素数が8から24までで、他は炭素数が1から5までのもの) )  
MW : 229.41  
mp : 130.5°C<sup>5)</sup>  
bp : 不詳  
sw : 0.003132g/L (25°C)<sup>3)</sup>  
比重等 : 不詳  
logPow : 不詳

[6-3] *N,N*-ジメチルテトラデシル-1-アミン=*N*-オキシド  
*N,N*-Dimethyltetradecyl-1-amine *N*-oxide



分子式 : C<sub>16</sub>H<sub>35</sub>NO  
CAS : 3332-27-2  
既存化 : 2-198 (アルキル (又はアルケニル) アミンオキシド (アルキル基又はアルケニル基のうちの少なくとも1個は炭素数が8から24までで、他は炭素数が1から5までのもの) )  
MW : 257.46  
mp : 不詳  
bp : 不詳  
sw : 0.0003183g/L (25°C)<sup>3)</sup>  
比重等 : 不詳  
logPow : 不詳

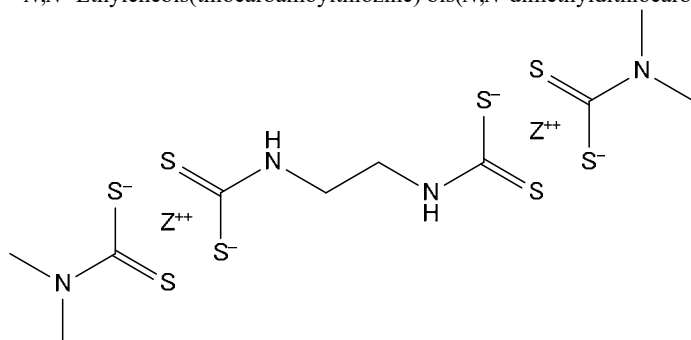
[6-4] *N,N*-ジメチルオクタデシル-1-アミン=*N*-オキシド  
*N,N*-Dimethyloctadecyl-1-amine *N*-oxide



分子式 :  $C_{20}H_{43}NO$   
CAS : 2571-88-2  
既存化 : 2-198 (アルキル (又はアルケニル) アミンオキシド (アルキル基又はアルケニル基のうちの少くとも 1 個は炭素数が 8 から 24 までで、他は炭素数が 1 から 5 までのもの) )  
MW : 313.56  
mp : 不詳  
bp : 不詳  
sw :  $3.18 \times 10^{-6} \text{ g/L (25}^\circ\text{C)}^3$   
比重等 : 不詳  
logPow : 不詳

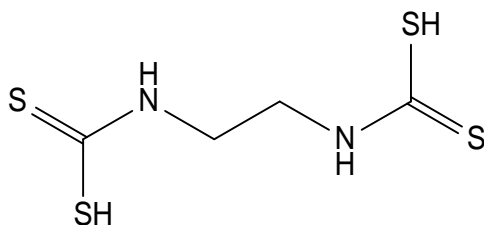
[7] ビス(*N,N*-ジメチルジチオカルバミン酸)*N,N'*-エチレンビス(チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名 : ポリカーバメート)

*N,N'*-Ethylenebis(thiocarbamoylthiozinc) bis(*N,N*-dimethyldithiocarbamate) (synonym: Polycarbamate)



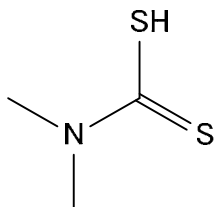
分子式 :  $C_{10}H_{18}N_4S_8Zn_2$   
CAS : 64440-88-6  
既存化 : 2-1848  
MW : 581.61  
mp : 不詳  
bp : 不詳  
sw :  $0.1077 \text{ g/L (25}^\circ\text{C)}^3$   
比重等 : 不詳  
logPow : 不詳

[7-1] *N,N'*-エチレンビス(ジチオカルバミン酸)  
*N,N'*-Ethylenebis(dithiocarbamic acid)



分子式 :  $C_4H_8N_2S_4$   
CAS : 111-54-6  
既存化 : 2-1808  
MW : 212.38  
mp : 不詳  
bp : 不詳  
sw : 不詳  
比重等 : 不詳  
logPow : 不詳

[7-2] *N,N*-ジメチルジチオカルバミン酸  
*N,N*-Dimethyldithiocarbamic acid



分子式 :  $C_3H_7NS_2$   
CAS : 79-45-8  
既存化 : 2-1798  
MW : 121.22  
mp : 不詳  
bp : 不詳  
sw : 不詳  
比重等 : 不詳  
logPow : 不詳

参考文献

- 1) OECD, Screening Information Dataset (SIDS) for High Product in Volume Chemicals (Processed by UNEP Chemicals) (<http://www.inchem.org/pages/sids.html>、2020 年 10 月閲覧)
- 2) U.S. National Library of Medicine, Hazardous Substances Data Bank (HSDB) (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>、2020 年 10 月閲覧)
- 3) U.S. EPA, Estimation Programs Interface (EPI) Suite v4.1 (<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedl.htm>)
- 4) International Programme on Chemical Safety, International Chemical Safety Cards (ICSC) ([http://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS\\_113134/lang--en/index.htm](http://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang--en/index.htm)、2020 年 10 月閲覧)
- 5) Rumble, J.R. (ed), CRC Handbook of Chemistry and Physics 98th Edition (2017), The Royal society of Chemistry.
- 6) O'Neil, M.J. (ed), The Merck Index 15th Edition (2013), CRC Press.