

## 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

2022年度の初期環境調査においては、13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。

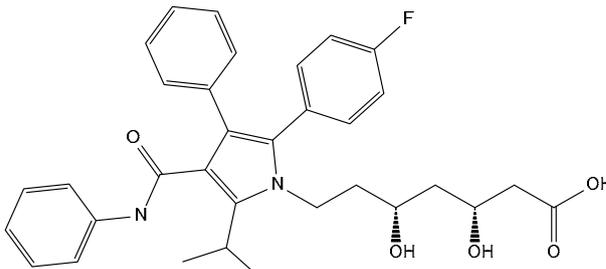
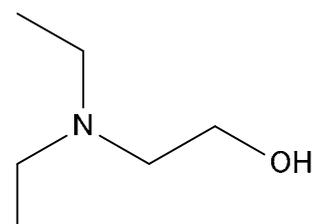
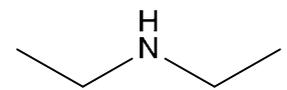
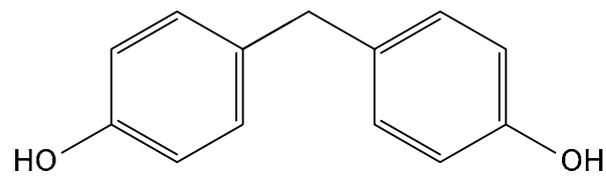
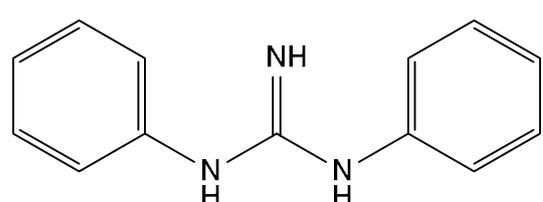
物質 調査 番号	調査対象物質	化審法指定区分 <sup>注1,2</sup>		化管法指定区分 <sup>注3</sup>			調査媒体	
		改正前	改正後	2000年～	2008年～	2021年～	水質	大気
[1]	アトルバスタチン						○	
[2]	2-(ジエチルアミノ)エタノール	第二種監視		第一種 109	第一種 145			○
[3]	ジエチルアミン						○	
[4]	4,4'-ジヒドロキシジフェニルメタン (別名：ビスフェノールF)						○	
[5]	1,3-ジフェニルグアニジン	第二種監視			第一種 205	第二種 56	○	
[6]	4,4'-スルホニルジフェノール (別名：ビスフェノールS)	第二種監視					○	
[7]	2,5,8,11-テトラオキサドデカン (別名：トリエチレングリコールジメチルエーテル)						○	
[8]	1,3,5-トリス(2,3-エポキシプロピル)-1,3,5-トリアジン-2,4,6(1H,3H,5H)-トリオン (別名：1,3,5-トリスグリシジル-イソシアヌル酸)	第二種監視		第一種 218	第一種 291	第二種 71	○	
[9]	4,4'-[2,2,2-トリフルオロ-1-(トリフルオロメチル)エチリデン]ビスフェノール (別名：ビスフェノールAF)						○	
[10]	3,5,5-トリメチル-1-ヘキサノール			第一種 223	第一種 295	第二種 76	○	
[11]	1,2-ビス(2-クロロフェニル)ヒドラジン	第三種監視			第一種 327		○	
[12]	フラン	第二種監視			第一種 377	第二種 110	○	
[13]	2-メルカプトベンゾチアゾール (別名：1,3-ベンゾチアゾール-2-チオール)	第二種監視 第三種監視			第一種 452	第二種 132	○	

(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「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、「2021年～」とは2021年10月20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。

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。

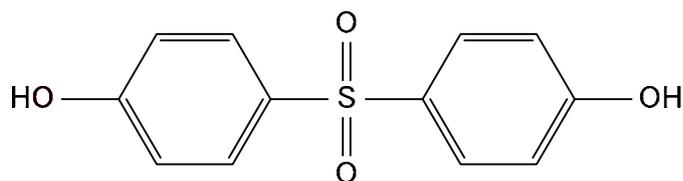
<p>[1] アトルバスタチン Atorvastatin</p> 	<p>分子式 : C<sub>33</sub>H<sub>35</sub>FN<sub>2</sub>O<sub>5</sub> CAS : 134523-00-5 既存化 : 該当なし MW : 558.64 mp : 176 °C<sup>1)</sup> bp : 722 °C (760 mmHg)<sup>1)</sup> sw : 1 g/L 未満<sup>2)</sup> 比重等 : 不詳 logPow : 不詳</p>
<p>[2] 2-(ジエチルアミノ)エタノール 2-(Diethylamino)ethanol</p> 	<p>分子式 : C<sub>6</sub>H<sub>15</sub>NO CAS : 100-37-8 既存化 : 2-297<sup>注1)</sup>、2-353<sup>注2)</sup> MW : 117.19 mp : -70 °C<sup>3)</sup> bp : 163 °C<sup>3)</sup> sw : 混和<sup>3)</sup> 比重等 : 0.88<sup>3)</sup> logPow : 0.46<sup>3)</sup></p>
<p>[3] ジエチルアミン Diethylamine</p> 	<p>分子式 : C<sub>4</sub>H<sub>11</sub>N CAS : 109-89-7 既存化 : 2-135 MW : 73.40 mp : -50 °C<sup>4)</sup> bp : 55.5 °C<sup>4)</sup> sw : 混和<sup>4)</sup> 比重等 : 0.7<sup>4)</sup> logPow : 0.58<sup>4)</sup></p>
<p>[4] 4,4'-ジヒドロキシジフェニルメタン (別名: ビスフェノール F) 4,4'-Dihydroxydiphenylmethane (synonym: Bisphenol F)</p> 	<p>分子式 : C<sub>13</sub>H<sub>12</sub>O<sub>2</sub> CAS : 620-92-8 既存化 : 4-90 MW : 200.24 mp : 162.5 °C<sup>1)</sup> bp : 昇華<sup>1)</sup> sw : 不詳 比重等 : 不詳 logPow : 2.91 °C<sup>1)</sup></p>
<p>[5] 1,3-ジフェニルグアニジン 1,3-Diphenylguanidine</p> 	<p>分子式 : C<sub>13</sub>H<sub>13</sub>N<sub>3</sub> CAS : 102-06-7 既存化 : 3-480 (ジフェニルグアニジン)、3-2189 MW : 211.27 mp : 150 °C<sup>5)</sup> bp : 170 °C (分解)<sup>5)</sup> sw : 29.5 mg/L (pH 7.4 での平均値)<sup>1)</sup> 比重等 : 1.19 g/cm<sup>3</sup><sup>5)</sup> logPow : 1.69<sup>5)</sup></p>

(注1) *N,N*ジアルキル-*N*-エタノールアミン (アルキル基の炭素数が1から3までのもの)

(注2) *N,N*ジアルキル (又はヒドロキシアリル) -*N*-(2-ヒドロキシアリル)アミン

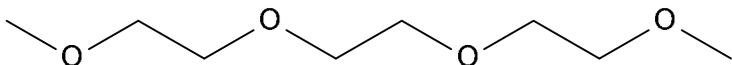
「mp」は融点を、「bp」とは沸点を、「sw」とは水への溶解度を、「比重等」とは比重 (単位なし) 又は密度 (単位あり) を、「logPow」とは *n*-オクタノール/水分配係数をそれぞれ意味する。

[6] 4,4'-スルホニルジフェノール (別名: ビスフェノール S)  
4,4'-Sulfonyldiphenol (synonym: Bisphenol S)



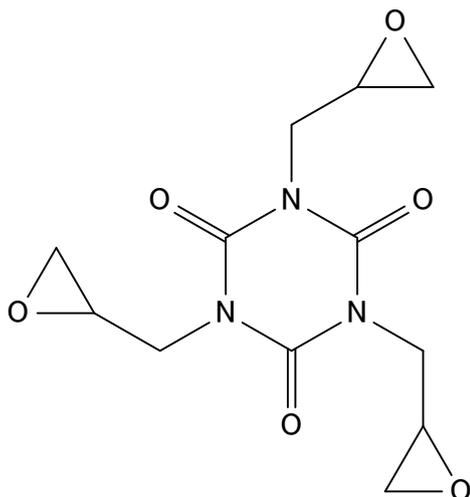
分子式:  $C_{12}H_{10}O_4S$   
CAS: 80-09-1  
既存化: 3-2169<sup>註1</sup>  
MW: 250.27  
mp: 240.5 °C<sup>6)</sup>  
bp: 測定不能 (330 °Cで黒色に変化)<sup>6)</sup>  
sw: 770 mg/L (20 °C)<sup>6)</sup>  
比重等: 1.366 g/cm<sup>3</sup> (15 °C)<sup>6)</sup>  
logPow: 2.36 (24.5 °C)<sup>6)</sup>

[7] 2,5,8,11-テトラオキサドデカン (別名: トリエチレングリコールジメチルエーテル)  
2,5,8,11-Tetraoxadodecane (synonym: Triethylene glycol dimethyl ether)



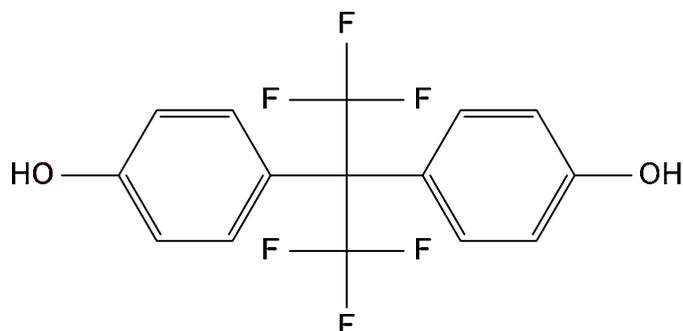
分子式:  $C_8H_{18}O_4$   
CAS: 112-49-2  
既存化: 7-1321<sup>註2</sup>  
MW: 178.23  
mp: -45 °C<sup>7)</sup>  
bp: 216 °C<sup>7)</sup>  
sw: 混和<sup>7)</sup>  
比重等: 0.99<sup>7)</sup>  
logPow: -0.48<sup>7)</sup>

[8] 1,3,5-トリス(2,3-エポキシプロピル)-1,3,5-トリアジン-2,4,6(1*H*,3*H*,5*H*)-トリオン (別名: 1,3,5-トリスグリシジル-イソシアヌル酸)  
1,3,5-Tris(2,3-epoxypropyl)-1,3,5-triazine-2,4,6(1*H*,3*H*,5*H*)-trione (synonym: 1,3,5-Triglycidyl isocyanurate)



分子式:  $C_{12}H_{15}N_3O_6$   
CAS: 2451-62-9  
既存化: 5-1052  
MW: 297.26  
mp: 105 °C ( $\alpha$ 型)、156 °C ( $\beta$ 型)<sup>8)</sup>  
bp: 240 °C超で分解<sup>1)</sup>  
sw: 10.1 mg/L ( $\alpha$ 型)、0.53 mg/L ( $\beta$ 型)<sup>8)</sup>  
比重等: 1.5 g/cm<sup>3</sup> ( $\alpha$ 型約90%と $\beta$ 型約10%の混合物)<sup>8)</sup>  
logPow: -1.07<sup>8)</sup>

[9] 4,4'-[2,2,2-トリフルオロ-1-(トリフルオロメチル)エチリデン]ビスフェノール (別名: ビスフェノール AF)  
4,4'-[2,2,2-Trifluoro-1-(trifluoromethyl)ethylidene]bisphenol (synonym: Bisphenol AF)

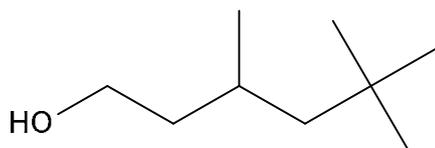


分子式:  $C_{15}H_{10}F_6O_2$   
CAS: 1478-61-1  
既存化: 4-1335  
MW: 336.23  
mp: 159~162 °C<sup>1)</sup>  
bp: 400 °C<sup>1)</sup>  
sw: ごく少量  
比重等: 1.447 g/cm<sup>3</sup><sup>1)</sup>  
logPow: 不詳

(注1) ジヒドロキシジフェニルスルホン (核メチル置換体を含む)

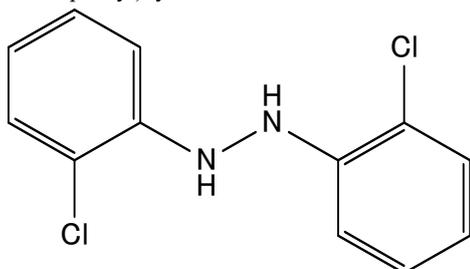
(注2) ポリオキシアルキレンジアルキル (又はアルケニル) エーテル (オキシアルキレンの炭素数が2から3まで、アルキル基 (又はアルケニル基) の炭素数が1から5まで、かつ、オキシアルキレンの重合度が1から150までのもの)

[10] 3,5,5-トリメチル-1-ヘキサノール  
3,5,5-Trimethyl-1-hexanol



分子式 : C<sub>9</sub>H<sub>20</sub>O  
CAS : 3452-97-9  
既存化 : 2-217<sup>注3</sup>  
MW : 144.26  
mp : -70 °C<sup>9)</sup>  
bp : 190 °C (1,013 hPa)<sup>10)</sup>  
sw : 490 mg/L (20 °C)<sup>10)</sup>  
比重等 : 0.828 g/cm<sup>3</sup><sup>10)</sup>  
logPow : 3.42 (23°C)<sup>10)</sup>

[11] 1,2-ビス(2-クロロフェニル)ヒドラジン  
1,2-Bis(2-chlorophenyl)hydrazine



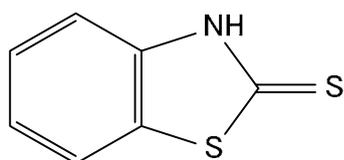
分子式 : C<sub>12</sub>H<sub>10</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>2</sub>  
CAS : 782-74-1  
既存化 : 3-2756  
MW : 253.13  
mp : 87 °C<sup>1)</sup>  
bp : 不詳  
sw : 10 mg/L 未満<sup>1)</sup>  
比重等 : 不詳  
logPow : 不詳

[12] フラン  
Furan



分子式 : C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>O  
CAS : 110-00-9  
既存化 : 5-3334  
MW : 68.08  
mp : -85.6 °C<sup>11)</sup>  
bp : 31.3<sup>11)</sup>  
sw : 10 g/L (25 °C)<sup>11)</sup>  
比重等 : 0.94<sup>11)</sup>  
logPow : 1.34<sup>11)</sup>

[13] 2-メルカプトベンゾチアゾール (別名 : 1,3-ベンゾチアゾール-2-チオール)  
2-Mercaptobenzothiazole (synonym: 1,3-Benzothiazole-2-thiol)



分子式 : C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>NS<sub>2</sub>  
CAS : 149-30-4  
既存化 : 5-242  
MW : 167.24  
mp : 180~182 °C<sup>12)</sup>  
bp : 分解<sup>1)</sup>  
sw : 0.1 g/L (20 °C)<sup>12)</sup>  
比重等 : 1.42 g/cm<sup>3</sup><sup>12)</sup>  
logPow : 2.41<sup>12)</sup>

(注3) アルカノール (アルキル基の炭素数が5から38までのもの)

#### 参考文献

- 1) U.S. National Library of Medicine, PubChem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>、2023年11月閲覧)
- 2) Royal Society of Chemistry, ChemSpider (<http://www.chemspider.com/>、2023年11月閲覧)
- 3) International Labour Organization (ILO), 2-Diethylaminoethanol, International Chemical Safety Cards (ICSCs), 0257 (2002)
- 4) International Labour Organization (ILO), Diethylamine, International Chemical Safety Cards (ICSCs), 0444 (2008)
- 5) International Labour Organization (ILO), 1,3-Diphenylguanidine, International Chemical Safety Cards (ICSCs), 0467 (2000)
- 6) OECD, 4,4'-Sulfonyldiphenol, SIDS Initial Assessment Report, CoCAM 4, 16-18 April 2013
- 7) International Labour Organization (ILO), Triethylene glycol dimethyl ether, International Chemical Safety Cards (ICSCs), 1570 (2004)
- 8) 独立行政法人製品評価技術基盤機構 (NITE)、1,3,5-トリス(2,3-エポキシプロピル)-1,3,5-トリアジン-2,4,6(1*H*,3*H*,5*H*)-トリオン、化学物質の初期リスク評価書 Ver. 1.0 No. 146 (2008)
- 9) 独立行政法人製品評価技術基盤機構 (NITE)、3,5,5-トリメチル-1-ヘキサノール、化学物質の初期リスク評価書 Ver. 1.0 No. 27 (2008)
- 10) OECD, 3,5,5-Trimethyl-1-hexano, SIDS Initial Assessment Report, SIAM 14, 26-28th March 2002
- 11) International Labour Organization (ILO), Furan, International Chemical Safety Cards (ICSCs), 1257 (2014)
- 12) International Labour Organization (ILO), 2-Mercaptobenzothiazole, International Chemical Safety Cards (ICSCs), 1183