

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

2023 年度の初期環境調査においては、14 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	2000 年～	2008 年～	2021 年～	水 質	底 質	大 気
[1]	エストラジオール類								
	[1-1] 17 β -エストラジオール						○		
	[1-2] 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] 17 α -エチニルエストラジオール						○		
	[1-4] 16 α -ヒドロキシエストラジオール（別名：エストリオール）						○		
[2]	2,4-キシレノール				第一種 78	第一種 101	○	○	○
[3]	<i>p</i> -クロロフェノール	第二種監視 第三種監視			第一種 121	第一種 146	○		○
[4]	酢酸 <i>n</i> -プロピル						○		
[5]	<i>N,N</i> -ジエチル-3-メチルベンズアミド（別名： <i>N,N</i> -ジエチル- <i>m</i> -トルアミド）	第二種監視					○		
[6]	1-[2-[(2,4-ジクロロベンジル)オキシ]-2-(2,4-ジクロロフェニル)エチル]-1 <i>H</i> -イミダゾール（別名：ミコナゾール）						○		
[7]	(<i>Z</i>)-2-[4-(1,2-ジフェニル-1-ブテニル)フェノキシ]- <i>N,N</i> -ジメチルエチルアミン（別名：タモキシフェン）及びその代謝物								
	[7-1] (<i>Z</i>)-2-[4-(1,2-ジフェニル-1-ブテニル)フェノキシ]- <i>N,N</i> -ジメチルエチルアミン（別名：タモキシフェン）						○		
	[7-2] (<i>Z</i>)-2-[4-(1,2-ジフェニル-1-ブテニル)フェノキシ]- <i>N</i> -メチルエチルアミン（別名： <i>N</i> -デスメチルタモキシフェン）						○		
	[7-3] 4-[(<i>Z</i>)-1-[4-(2-(ジメチルアミノ)エトキシ)フェニル]-2-フェニル-1-ブテニル]フェノール（別名：4-ヒドロキシタモキシフェン）						○		
	[7-4] 4-[(<i>Z</i>)-1-[4-(2-(メチルアミノ)エトキシ)フェニル]-2-フェニル-1-ブテニル]フェノール（別名：4-エンドキシフェン）						○		
[8]	2-(2,4-ジフルオロフェニル)-1,3-ビス(1 <i>H</i> -1,2,4-トリアゾール-1-イル)プロパン-2-オール（別名：フルコナゾール）						○		
[9]	シプロフロキサシン						○		
[10]	トリクロロ酢酸	第二種監視			第一種 282		○		

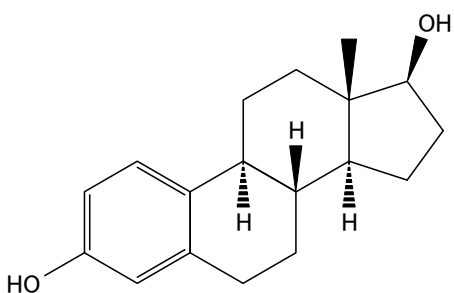
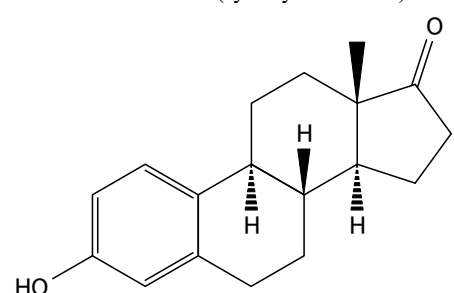
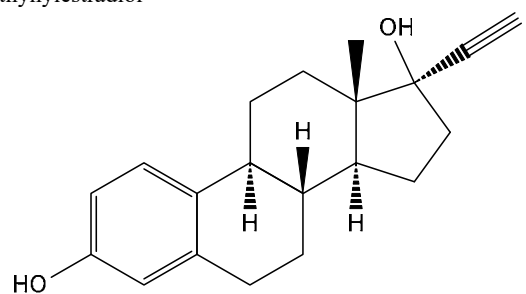
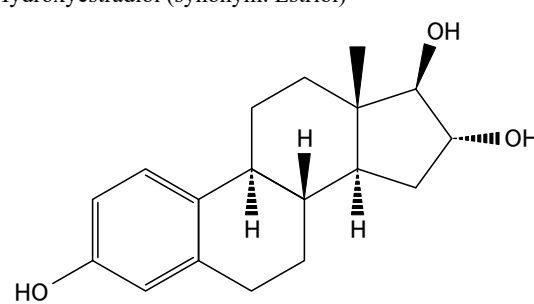
物質 調査 番号	調査対象物質	化審法指定区分 ^{注1、2}		化管法指定区分 ^{注3}			調査媒体		
		改正前	改正後	2000 年～	2008 年～	2021 年～	水 質	底 質	大 気
[11]	ヘキサメチレンジアミン	第二種監視		第一種 292	第一種 390	第一種 434	○		○
[12]	ベンゾフェノン				第一種 403	第二種 456	○		
[13]	メチルシクロヘキサン	第三種監視					○		
[14]	メチル- <i>tert</i> -ブチルエーテル						○		

(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。

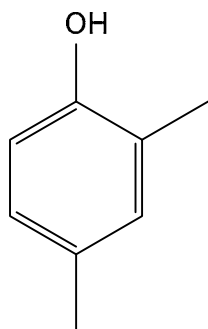
(注3) 「化管法指定区分」における「2000 年～」とは 2000 年 6 月 7 日の政令制定時の指定を、「2008 年～」とは 2008 年 11 月 21 日の政令改正後の指定を、「2021 年～」とは 2021 年 10 月 20 日の政令改正後の指定をそれぞれ意味する。なお、それぞれの欄における数字は第一種指定化学物質又は第二種指定化学物質としての政令番号を意味する。

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。

[1] エストラジオール類 Estradiols	
[1-1] 17β-エストラジオール 17β-Estradiol	 分子式： C₁₈H₂₄O₂ CAS： 50-28-2 既存化： 該当なし MW： 272.38 mp： 169.9 °C¹⁾ bp： 413.45 °C¹⁾ sw： 1.5 mg/L (20 °C)¹⁾ 比重等： 1.202 (20 °C)¹⁾ logPow： 4.01²⁾
[1-2] 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： C₁₈H₂₂O₂ CAS： 53-16-7 既存化： 9-2145 MW： 270.37 mp： 262.4 °C¹⁾ bp： 445.2 °C²⁾ sw： 0.76 mg/L (20 °C)¹⁾ 比重等： 1.24 g/cm³ (20 °C)¹⁾ logPow： 2.6 (25 °C)¹⁾
[1-3] 17α-エチニルエストラジオール 17α-Ethynylestradiol	 分子式： C₂₀H₂₄O₂ CAS： 57-63-6 既存化： 該当なし MW： 296.40 mp： 142～146 °C 又は 180～186 °C²⁾ bp： 不詳 sw： 11.3 mg/L (27 °C)²⁾ 比重等： 不詳 logPow： 3.67²⁾
[1-4] 16α-ヒドロキシエストラジオール (別名：エストリオール) 16α-Hydroxyestradiol (synonym: Estriol)	 分子式： C₁₈H₂₄O₃ CAS： 50-27-1 既存化： 9-203 MW： 288.39 mp： 288 °C で分解²⁾ bp： 不詳 sw： 13.25 mg/L²⁾ 比重等： 1.24 g/cm³ (25 °C)²⁾ logPow： 2.45²⁾

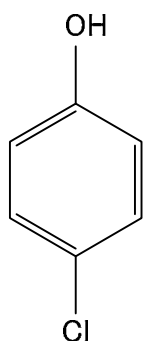
(略称) 「CAS」とは CAS 登録番号を、「既存化」とは既存化学物質名簿における番号を、「MW」とは分子量を、「mp」は融点を、「bp」とは沸点を、「sw」とは水への溶解度を、「比重等」とは比重 (単位なし) 又は密度 (単位あり) を、「logPow」とは *n*-オクタノール/水分配係数をそれぞれ意味する。

[2] 2,4-キシレノール
2,4-Xylenol



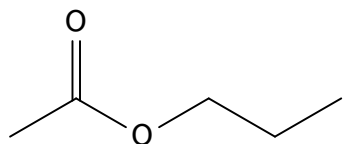
分子式 : $C_8H_{10}O$
CAS : 105-67-9
既存化 : 3-521^{注1}、4-57^{注2}
MW : 117.19
mp : 25.4~26 °C³⁾
bp : 211.5 °C³⁾
sw : 7,870 mg/L (25 °C)³⁾
比重等 : 0.9650 (20 °C/4 °C)²⁾
logPow : 2.30³⁾

[3] *p*-クロロフェノール
p-Chlorophenol



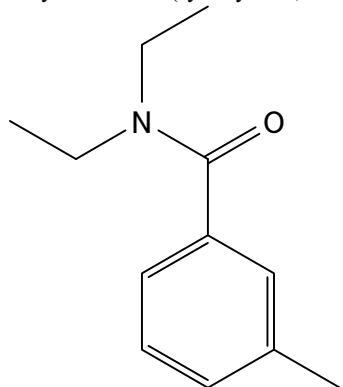
分子式 : C_6H_5ClO
CAS : 106-48-9
既存化 : 3-895 (モノクロロフェノール)
MW : 128.56
mp : 42.8 °C³⁾
bp : 220 °C³⁾
sw : 24×10^3 mg/L (25 °C)³⁾
比重等 : 1.2238 (78 °C/4 °C)⁴⁾
logPow : 2.39³⁾

[4] 酢酸 *n*-プロピル
n-Propylacetate



分子式 : $C_5H_{10}O_2$
CAS : 109-60-4
既存化 : 2-727 (酢酸プロピル)
MW : 102.13
mp : -92 °C⁵⁾
bp : 101.6 °C⁵⁾
sw : 16×10^3 mg/L (20 °C)⁵⁾
比重等 : 0.9⁵⁾
logPow : 1.24⁵⁾

[5] *N,N*-ジエチル-3-メチルベンズアミド (別名 : *N,N*-ジエチル-*m*-トルアミド)
N,N-Diethyl-3-methylbenzamide (synonym: *N,N*-Diethyl-*m*-toluamide)



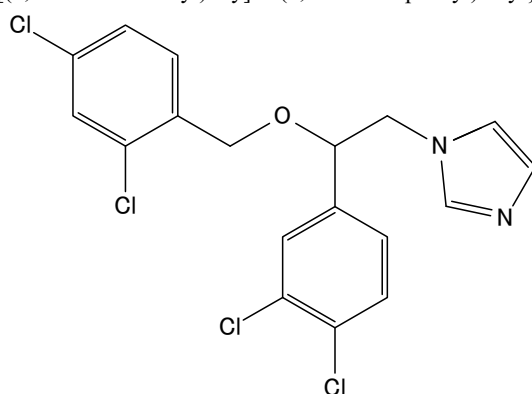
分子式 : $C_{12}H_{17}NO$
CAS : 134-62-3
既存化 : 3-1321
MW : 191.27
mp : -45 °C²⁾
bp : 285 °C (760 mmHg)²⁾
sw : 19.6 mg/L²⁾
比重等 : 0.996 g/cm³ (20 °C)²⁾
logPow : 2.02²⁾

(注1) ジアルキルフェノール (アルキル基の炭素数が1から5までのもの)

(注2) ポリアルキルポリヒドロキシポリフェニル (炭素数が1から3までのアルキル基の数が1から3までで、ヒドロキシル基の数が1から3までで、フェニル基の数が1から5までのもの)

[6] 1-{2-[(2,4-ジクロロベンジル)オキシ]-2-(2,4-ジクロロフェニル)エチル}-1*H*-イミダゾール (別名：ミコナゾール)

1-{2-[(2,4-Dichlorobenzyl)oxy]-2-(2,4-dichlorophenyl)ethyl}-1*H*-imidazole (synonym: Miconazole)



分子式： C₁₈H₁₄Cl₄N₂O

CAS： 22916-47-8

既存化： 該当なし

MW： 416.12

mp： 159～163 °C²⁾

bp： 不詳

sw： 0.763 mg/L²⁾

比重等： 不詳

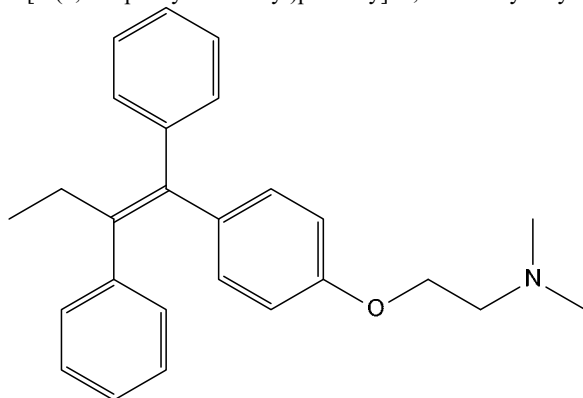
logPow： 6.1²⁾

[7] (Z)-2-[4-(1,2-ジフェニル-1-ブテニル)フェノキシ]-*N,N*-ジメチルエチルアミン (別名：タモキシフェン) 及びその代謝物

(Z)-2-[4-(1,2-Diphenyl-1-butenyl)phenoxy]-*N,N*-dimethylethylamine (synonym: Tamoxifen) and its metabolites

[7-1] (Z)-2-[4-(1,2-ジフェニル-1-ブテニル)フェノキシ]-*N,N*-ジメチルエチルアミン (別名：タモキシフェン)

(Z)-2-[4-(1,2-Diphenyl-1-butenyl)phenoxy]-*N,N*-dimethylethylamine (synonym: Tamoxifen)



分子式： C₂₆H₂₉NO

CAS： 10540-29-1

既存化： 該当なし

MW： 371.52

mp： 96 °C¹⁾

bp： 不詳

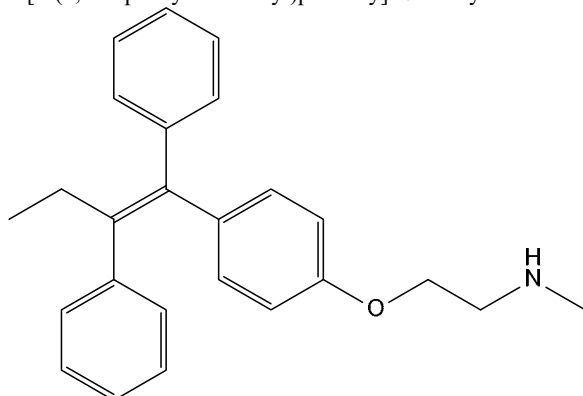
sw： 0.167 mg/L (25 °C)¹⁾

比重等： 1.042 (20 °C)¹⁾

logPow： 7.1²⁾

[7-2] (Z)-2-[4-(1,2-ジフェニル-1-ブテニル)フェノキシ]-*N*-メチルエチルアミン (別名：*N*-デスメチルタモキシフェン)

(Z)-2-[4-(1,2-Diphenyl-1-butenyl)phenoxy]-*N*-methyl-ethanamine (synonym: *N*-Desmethyltamoxifen)



分子式： C₂₅H₂₇NO

CAS： 31750-48-8

既存化： 該当なし

MW： 357.50

mp： 不詳

bp： 不詳

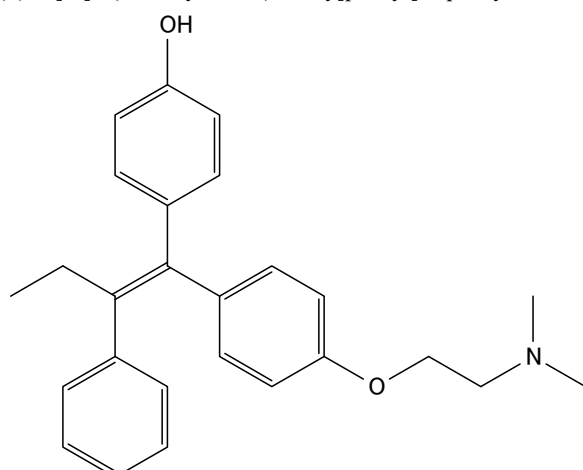
sw： 不詳

比重等： 不詳

logPow： 不詳

[7-3] 4-[(Z)-1-[4-[2-(ジメチルアミノ)エトキシ]フェニル]-2-フェニル-1-ブテニル]フェノール (別名：4-ヒドロキシタモキシフェン)

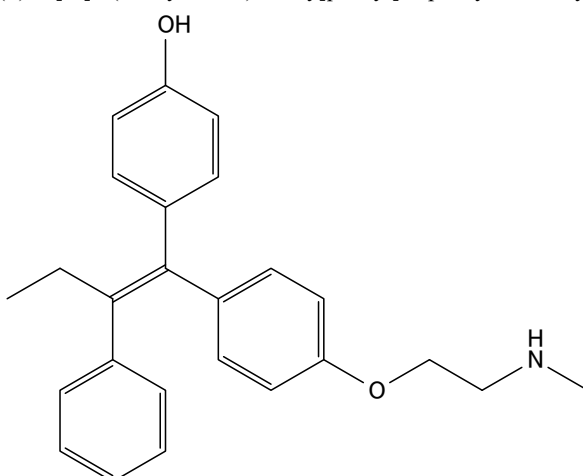
4-[(Z)-1-[4-[2-(dimethylamino)ethoxy]phenyl]-2-phenyl-1-butenyl]phenol (synonym: 4-Hydroxytamoxifen)



分子式： $C_{26}H_{29}NO_2$
CAS： 68047-06-3
既存化： 該当なし
MW： 387.51
mp： 不詳
bp： 不詳
sw： 不詳
比重等： 不詳
logPow： 不詳

[7-4] 4-[(Z)-1-[4-[2-(メチルアミノ)エトキシ]フェニル]-2-フェニル-1-ブテニル]フェノール (別名：4-エンドキシフェン)

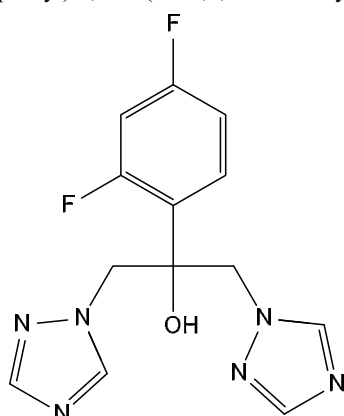
4-[(Z)-1-[4-[2-(methylamino)ethoxy]phenyl]-2-phenyl-1-butenyl]phenol (synonym: 4-Endoxifen)



分子式： $C_{25}H_{27}NO_2$
CAS： 112093-28-4
既存化： 該当なし
MW： 373.49
mp： 不詳
bp： 不詳
sw： 不詳
比重等： 不詳
logPow： 不詳

[8] 2-(2,4-ジフルオロフェニル)-1,3-ビス(1H-1,2,4-トリアゾール-1-イル)プロパン-2-オール (別名：フルコナゾール)

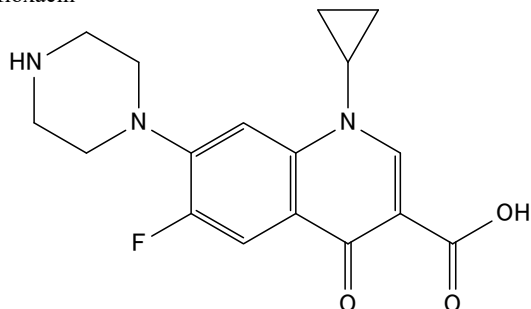
2-(2,4-Difluorophenyl)-1,3-bis(1H-1,2,4-triazol-1-yl)propan-2-ol (synonym: Fluconazole)



分子式： $C_{13}H_{12}F_2N_6O$
CAS： 86386-73-4
既存化： 該当なし
MW： 306.28
mp： $138 \sim 140\text{ }^{\circ}\text{C}^{2)}$
bp： $579.8\text{ }^{\circ}\text{C}^{2)}$
sw： $1.39 \times 10^3\text{ mg/L}^{2)}$
比重等： 不詳
logPow： $0.5^{2)}$

[9] シプロフロキサシン

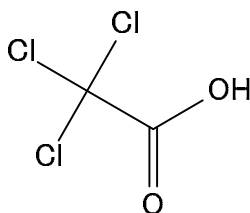
Ciprofloxacin



分子式 : $C_{17}H_{18}FN_2O_3$
 CAS : 85721-33-1
 既存化 : 該当なし
 MW : 331.35
 mp : 225~257 °C²⁾
 bp : 不詳
 sw : 30×10^3 mg/L (20 °C)²⁾
 比重等 : 不詳
 logPow : 0.28²⁾

[10] トリクロロ酢酸

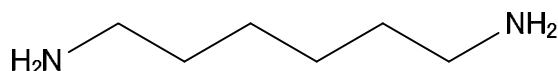
Trichloroacetic acid



分子式 : $C_2HCl_3O_2$
 CAS : 76-03-9
 既存化 : 2-1188
 MW : 163.39
 mp : 57~59.1 °C³⁾
 bp : 198.2 °C (760 mmHg)³⁾
 sw : $923 \times 10^3 \sim 930 \times 10^3$ mg/L (20 °C)³⁾
 比重等 : 1.6126 g/cm³ (64 °C)³⁾
 logPow : 1.33³⁾

[11] ヘキサメチレンジアミン

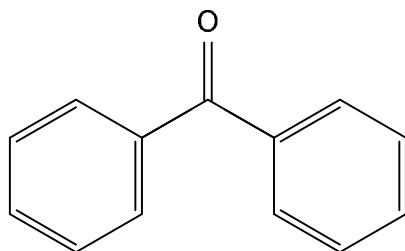
Hexamethylenediamine



分子式 : $C_6H_{16}N_2$
 CAS : 124-09-4
 既存化 : 2-153
 MW : 116.21
 mp : 38.8~40.75 °C³⁾
 bp : 197~205 °C (760 mmHg)³⁾
 sw : 600×10^3 mg/L (16 °C)³⁾
 比重等 : 0.854 g/cm³ (25 °C)³⁾
 logPow : 1.33³⁾

[12] ベンゾフェノン

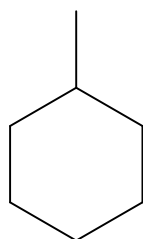
Benzophenone



分子式 : $C_{13}H_{10}O$
 CAS : 119-61-9
 既存化 : 3-1258、4-125
 MW : 182.22
 mp : 48.0~51 °C³⁾
 bp : 305.4~305.9 °C (760 mmHg)³⁾
 sw : 137 mg/L (25 °C)³⁾
 比重等 : 1.11 g/cm³ (18 °C)³⁾
 logPow : 3.18³⁾

[13] メチルシクロヘキサン

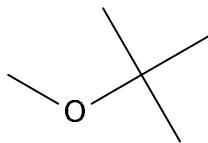
Methylcyclohexane



分子式 : C_7H_{14}
 CAS : 108-87-2
 既存化 : 3-2230
 MW : 98.19
 mp : -126.6 °C¹⁾
 bp : 100.93 °C¹⁾
 sw : 14 mg/L (25 °C)¹⁾
 比重等 : 0.7694 g/cm³ (20 °C)¹⁾
 logPow : 3.88¹⁾

[14] メチル-*tert*-ブチルエーテル

Methyl *tert*-butyl ether



分子式 : C₅H₁₂O

CAS : 1634-04-4

既存化 : 2-3220

MW : 88.15

mp : -108.6 °C³⁾

bp : 55.2 °C (760 mmHg)³⁾

sw : 51×10³ mg/L (25 °C)³⁾

比重等 : 0.7405 g/cm³ (20 °C)³⁾

logPow : 0.94³⁾

参考文献

- 1) European Chemicals Agency (ECHA), REACH registered substance factsheets (<https://echa.europa.eu/>、2024 年 10 月閲覧)
- 2) U.S. National Library of Medicine, PubChem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>、2024 年 10 月閲覧)
- 3) 環境省環境リスク評価室、「化学物質の環境リスク評価」(<http://www.env.go.jp/chemi/risk/>、2024 年 10 月閲覧)
- 4) 独立行政法人製品評価技術基盤機構 (NITE)、*p*-クロロフェノール、有害性評価書 Ver. 1.0 No. 209 (2005)
- 5) International Labour Organization (ILO), *n*-Propyl acetate, International Chemical Safety Cards (ICSCs), 0940 (2014)