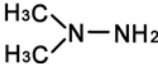
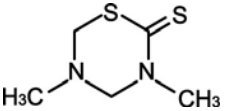
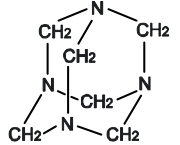
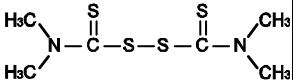
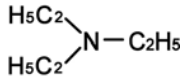
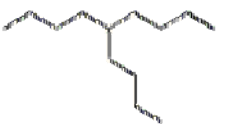
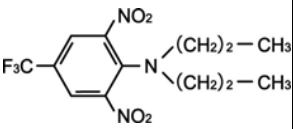
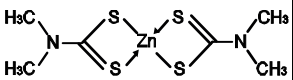


PRTR第一種指定化学物質のアルデヒド類生成能について(浅見委員提出資料)

番号	物質名	CAS No	分子式	構造式	生成可能性	生成するアルデヒド	アミン分類	農薬	アミド類 (N-アルキル基)	Log Kow	Henry	生分解性	
											(atm-m3/mol)	分解率(%)	期間(日)
145	2-(ジエチルアミノ)エタノール	100-37-8	C6H15NO		+ (?)	アセトアルデヒド	3級			0.05	3.12E-09	難分解性 CHLIP	
152	1,3-ジカルバモイルチオ-2-(N,N-ジメチルアミノ)-プロパン(別名カルタップ)	15263-53-3	C7H15N3O2S2		+ (?)	ホルムアルデヒド	3級	農薬		-0.77 WebKis- Plus内 Link	2.05E-13 CHLIP	難分解性 CHLIP	
216	N,N-ジメチルアニリン	121-69-7	C8H11N		+ (?)	ホルムアルデヒド	3級			2.31 CHLIP	5.68E-05 CHLIP	難分解性 CHLIP	
217	5-ジメチルアミノ-1,2,3-トリチアン(別名チオシクロム)	31895-21-3	C5H11NS3		+ (?)	ホルムアルデヒド	3級	農薬		-0.07 CHLIP	1.78E-11 CHLIP		
217	ジメチルアミン	124-40-3	C2H7N		++	ホルムアルデヒド	2級			-0.2 CHLIP	1.77E-05 CHLIP	良分解性 CHLIP	
220	ジメチルジチオカルバミン酸の水溶性塩	128-04-1	C6H12N2S4 + 塩		- (?)	ホルムアルデヒド	3級		チオアミド	-0.71 CHLIP		難分解性 CHLIP	
223	N,N-ジメチルドデシルアミン	112-18-5	C14H31N		+ (?)	ホルムアルデヒド	3級			5.5 CHLIP	4.9E-03 CHLIP		
224	N,N-ジメチルドデシルアミン=N-オキシド	1643-20-5	C14H31NO		- (?)	ホルムアルデヒド	4級			4.67	6.61E-11	良分解性 CHLIP	

番号	物質名	CAS No	分子式	構造式	生成可能性	生成するアルデヒド	アミン分類	農薬	アミド類 (N-アルキル基)	Log Kow	Henry	生分解性	
											(atm-m3/mol)	分解率(%)	期間(日)
226	1,1-ジメチルヒドラジン	57-14-7	C2H8N2		+	ホルムアルデヒド	3級			-0.4, -1.9 CHLIP	1.3E-05 CHLIP	難分解性 CHLIP	
244	2-チオキソ-3,5-ジメチルテトラヒドロ-2H-1,3,5-チアジアジン(別名ダゾメット)	533-74-4	C5H10N2S2		+ (?)	ホルムアルデヒド	3級	農薬		1.40	4.98E-10	難分解性 CHLIP	
258	1,3,5,7-テトラアザトリシクロ[3.3.1.1(3,7)]デカン(別名ヘキサメチレンテトラミン)	100-97-0	C6H12N4		+++	ホルムアルデヒド	3級			-4.15	1.64E-09	良分解性 CHLIP	
259	テトラエチルチウラムジスルフィド(別名ジスルフィラム)	97-77-8	C10H20N2S4		- (?)	アセトアルデヒド	3級		チオアミド	3.9 CHLIP	8.3E-05 CHLIP		
268	テトラメチルチウラムジスルフィド(別名チウラム又はチラム)	137-26-8	C6H12N2S4		- (?)	ホルムアルデヒド	3級	農薬	チオアミド	1.73	1.82E-07	2~3 MLIT	14 MLIT
277	トリエチルアミン	121-44-8	C6H15N		++	アセトアルデヒド	3級			1.45 CHLIP	1.49E-04 CHLIP	難分解性 CHLIP	
292	トリブチルアミン	102-82-9	C12H27N		++	ブタナール	3級			1.52 CHLIP	1.6E-04 CHLIP	難分解性 CHLIP	
293	アルファ,アルファ,アルファ-トリフルオロ-2,6-ジニトロ-N,N-ジプロピル-パラ-トルイジン(別名トリフルラリン)	1582-09-8	C13H16F3N3O4		+ (?)	プロパナール	3級	農薬		5.07	1.03E-04	難分解性 CHLIP	
328	ビス(N,N-ジメチルジチオカルバミン酸)亜鉛(別名ジラム)	137-30-4	C6H12N2S4Zn1		- (?)	ホルムアルデヒド	3級	農薬	チオアミド	1.23	6.19E-10	難分解性 CHLIP	

番号	物質名	CAS No	分子式	構造式	生成可能性	生成するアルデヒド	アミン分類	農薬	アミド類 (N-アルキル基)	Log Kow	Henry	生分解性	
											(atm-m3/mol)	分解率(%)	期間(日)
329	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)	64440-88-6	C10H18N4S8Zn2		- (?)	ホルムアルデヒド	3級	農薬	チオアミド	2.00	1.00E-10	難分解性 CHRIP	
389	ヘキサデシルトリメチルアンモニウムクロリド	112-02-7	C19H42ClN		- (?)	ホルムアルデヒド	4級			3.23 CHRIP	2.93E-10 CHRIP		
423	メチルアミン	74-89-5	CH5N		+	ホルムアルデヒド	1級			-0.57 CHRIP	1.11E-05 CHRIP		
432	3-メチル-1,5-ジ(2,4-キシリル)-1,3,5-トリアザベンタ-1,4-ジエン(別名アミトラズ)	33089-61-1	C19H23N3		+	ホルムアルデヒド	3級	農薬		5.50	9.87E-06		
433	N-メチルジチオカルバミン酸(別名カーバム)	144-54-7	C2H5NS2		- (?)	ホルムアルデヒド	2級	農薬	チオアミド	0.48	3.11E-07	難分解性 CHRIP	
434	メチル-N',N'-ジメチル-N-[(メチルカルバモイル)オキシ]-1-チオオキサリミデート(別名オキサミル)	23135-22-0	C7H13N3O3S		- (?)	ホルムアルデヒド	2級、3級	農薬	アミド	-0.47 CHRIP	2.37E-10 CHRIP		

1) N-アルキル基のうち、メチル基、エチル基、n-プロピル基、n-ブチル基を有する物質が対象(N-CH2-Nであるヘキサメチレンテトラミンも含む)

2) 生成可能性の判定

①+~+++ (6物質): 塩素処理によりアルデヒドの生成が報告されている物質、その類似物質、②+ (?) (8物質): 構造からある程度の生成率でアルデヒドを生成すると推測される物質、③- (?) (25物質): アルデヒドを生成したとしてもその生成率が少ないと推測される物質

④- (?)の物質のうち、一般的に、アミド類(13物質)は塩素との反応性が低いことによる、同様にチオアミド類(6物質)や4級アンモニウム類(2物質)も塩素との反応性は低いと推測されるが、モデル物質Iについて確認することが望ましい

⑤無印(3物質): 不明(全て1-メチルピラゾール構造を有する)

出典・MLIT: <http://www.mlit.go.jp/crd/city/sewage/info/prtr/guide05.pdf>

・CHRIP: <http://www.safe.nite.go.jp/japan/db.html>

・WebKis-Plus: <http://w-chemdb.nies.go.jp/>