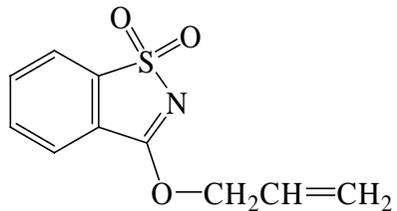
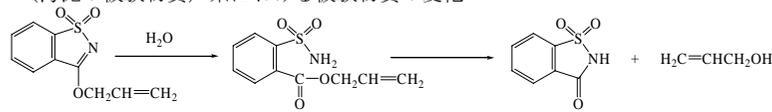


K - 6 6 3 B の類似物質表

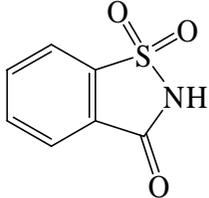
化合物名 (CAS 番号)	構造式	官報公示 整理番号 (K-番号)	分解度 (%)	分解 判定 (年)	分配係数 (log Pow)	LC ₅₀ mg/L (ヒメダカ)	濃縮倍率	濃縮 判定 (年)
セチルトリメチルアン モニウム = プロミド (57-09-0)	$\text{C}_{16}\text{H}_{33}-\text{N}^+\begin{matrix} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{matrix}-\text{CH}_3 \quad \text{Br}^-$	2-0184 (K-663)	標準(4W) 1984年実施 BOD 0, 0, 0 (0) TOC 21, 16, 14 (17) HPLC 19, 19, 19 (19) VIS(607nm) 0, 0, 0 (0)	難分解性 (1984)	解離性物質の ため測定不可	0.320 (48hr)	1993年実施 1区(0.05mg/L): 407 ~ 741 2区(0.005mg/L): 444 ~ 677 脂質含有率 3.9%	高濃縮性 ではない (1993)
ビス(水素化牛脂)ジメ チルアンモニウム = ク ロリド (61789-80-8)	$\text{H}_3\text{C}-\text{N}^+\begin{matrix} \text{CH}_3 \\ \\ (\text{CH}_2)_n-\text{CH}_3 \end{matrix}-(\text{CH}_2)_n-\text{CH}_3 \quad \text{Cl}^- \quad n=13 \sim 17$	2-0184 (K-663A)	標準(4W) 2002年実施 BOD -3, -3, -2 (0)* HPLC 17, 17, 17 (17)	難分解性 (2002)	対象外			
ジデシルジメチルア ンモニウムクロリド (7173-51-5)	$\text{H}_3\text{C}-\text{N}^+\begin{matrix} \text{CH}_3 \\ \\ (\text{CH}_2)_9-\text{CH}_3 \end{matrix}-(\text{CH}_2)_9-\text{CH}_3 \quad \text{Cl}^-$	2-0184 (K-663B)	標準(4W) 2007年実施 BOD -3, -2, -2 (0)* LC-MS 0, -1, -1 (0)*		対象外	0.707 (96hr)	2007年実施 1区(5 mg/L): 54 ~ 180 2区(0.5mg/L): 47 ~ 95 脂質含有率 開始前 3.75% 終了後 5.79%	

* 分解度の平均値が負の値に算出されたため、0 と表記した。

整理番号 K-1613 (NEDO 164, 5-3433)	分解度試験	分解度試験	分解度試験
3-アリルオキシ-1, 2-ベンゾイソチアゾール-1, 1-ジオキンド	契約 13年 11月 1日	契約 年 月 日	契約 年 月 日
[別名: 3-アリルオキシ-1, 2-ベンゾイソチアゾール=1, 1-ジオキンド] (27605-76-1)	試験期間 13.12.18~14. 3. 8	試験期間 . . . ~ . . .	試験期間 . . . ~ . . .
構造式 (示性式) ・物理化学的性状	試験装置 (標) ・揮	試験装置 標 ・揮	試験装置 標 ・揮
 <p>分子式 C₁₀H₉NO₃S 分子量 223.25</p>	試験濃度	試験濃度	試験濃度
	被験物質 100 mg/L	被験物質 mg/L	被験物質 mg/L
	汚泥 30 mg/L	汚泥 mg/L	汚泥 mg/L
	本試験期間 4 週間	本試験期間 週間	本試験期間 週間
	試験結果 間接 BOD 29, 24, 24 (26)% 直接 TOC 28, 28, 30 (29)% HPLC 100, 100, 100(100)%	試験結果 間接 直接	試験結果 間接 直接
純度*1 98.9%	外観 淡黄色結晶性粉末	審査部会 第14回 14年 5月29日開催	審査部会 第 回 年 月 日開催
不純物 (物質名, 含有率)	溶解度 (対水, その他) 対水 測定不可 対アセトニトリル 10 g/L 以上	判定 難分解性	判定
融点*1 139.5℃	1-オクタノール/水分配係数 log Kow = 2.86*3	<p>備考</p> <p>3. 特記事項</p> <p>・被験物質は試験液中で変化し、(水+被験物質)系においては、アリル=2-(スルファモイル)ベンゾアート、1,2-ベンゾイソチアゾール-3(2<i>H</i>)-オン=1,1-ジオキンド(5-0198, log Kow = 0.45*3)及びアリル=アルコール(2-0260, K-115, S50. 11. 25(18)良分解)を生成した。(汚泥+被験物質)系ではアリル基部分は分解し、1,2-ベンゾイソチアゾール-3(2<i>H</i>)-オン=1,1-ジオキンドが残留した。</p> <p>・後続試験は1,2-ベンゾイソチアゾール-3(2<i>H</i>)-オン=1,1-ジオキンドで実施した。</p> <p>(汚泥+被験物質)系における被験物質の変化</p>  <p>被験物質 (消失) アリル=2-(スルファモイル)ベンゾアート (不検出) 1,2-ベンゾイソチアゾール-3(2<i>H</i>)-オン=1,1-ジオキンド (残留) アリル=アルコール (生分解)</p>	審査部会 第 回 年 月 日開催
沸点 測定不可(295℃付近で茶色変化)	安定性 水中で変化する。		判定
密度 1.16 g/cm ³ (25℃)	IRチャートの有無 (有) ・ 無		用途*4 殺虫剤、殺菌剤、防虫剤、防腐剤、防臭剤、防かび剤
LD50*2 2,030mg/kg(ラット、経口) 2,750mg/kg(マウス、経口)	生産量*4 (11年) 製造及び輸入 100~1,000 t 未満		試験料 購入先 和光純薬工業 残留農薬試験用
経済産業公報発表年月日 年 月 日			

*1 和光純薬工業添付資料による。 *2 有機化合物辞典(講談社)による。 *3 Kowwin v 1.67による計算値。 *4 化学物質の製造・輸入量に関する実態調査による。

濃縮度試験						濃縮度試験						毒性試験		
年 月 日						年 月 日						依 頼	年 月 日	
試験期間						試験期間								
試験装置 標・揮		LC50 値 mg/L(hr)魚種()				試験装置 標・揮		LC50 値 mg/L(hr)魚種()						
水槽設定濃度 (mg/Lµg/L)						水槽設定濃度 ()								
被験物質		分散剤				被験物質		分散剤				経過		
第1濃度区						第1濃度区								
第2濃度区						第2濃度区								
第3濃度区						第3濃度区								
濃縮倍率		脂質含有率 開始前 終了後 % % 魚種()				濃縮倍率		脂質含有率 開始前 終了後 % % 魚種()						
		日後	日後	日後	日後			日後	日後	日後	日後			
第1	水槽濃度()					第1	水槽濃度()							
	倍率						倍率							
第2	水槽濃度()					第2	水槽濃度()							
	倍率						倍率							
第3	水槽濃度()					第3	水槽濃度()							
	倍率						倍率							
審査部会 第68回 19年 10月 26日 開催						審査部会 第 回 年 月 日 開催								
判定結果						判定結果								
備考						備考								
変化物1,2-ベンゾイソチアゾール-3(2H)-オン=1,1-ジオキ シドから類推。														

整理番号 K-1613変化物 (NEDO 164, 5-0198)	分解度試験		分解度試験		分解度試験		
1,2-ベンゾイソチアゾール-3(2H)-オン=1,1-ジオキソド	事業対象年度		契約 年 月 日		契約 年 月 日		
(81-07-2)	試験期間 . . . ~ . . .		試験期間 . . . ~ . . .		試験期間 . . . ~ . . .		
	試験装置 標・揮		試験装置 標・揮		試験装置 標・揮		
構造式(示性式)・物理化学的性状  分子式 C ₇ H ₅ NO ₃ S 分子量 183.18	試験濃度		試験濃度		試験濃度		
	被験物質 mg/L		被験物質 mg/L		被験物質 mg/L		
	汚泥 mg/L		汚泥 mg/L		汚泥 mg/L		
	本試験期間 週間		本試験期間 週間		本試験期間 週間		
	試験結果	間接		間接		間接	
		直接		直接		直接	
純度*1 99.5%	外観 白色結晶性粉末		審査部会 第 回		審査部会 第 回		
不純物*1 (物質名, 含有率) 残り 0.5%は不明	溶解度*2 (対水, その他) 対水 4000 mg/L(25°C)		年 月 日開催		年 月 日開催		
融点*2 228°C			判定		判定		
沸点 測定不可(280°C付近から淡茶色に変化した)	1-オクタノール/水分係数 log Pow<0.3 (HPLC法)*3		備考		備考		
比重*2 0.828							
LD50	解離定数 pKa = 2.72						
IRチャートの有無 (有)・無							
用途							
生産量(年)							
試料 購入先 和光純薬工業							
経済産業公報発表年月日	年 月 日						

*1 和光純薬工業添付資料による。 *2 The Physical Properties Database(Jan.2000)(Syracuse Research Corporation)による。

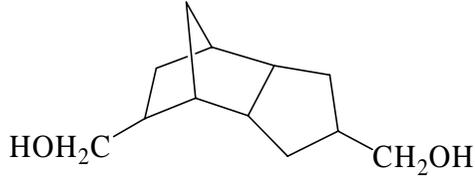
*3 International Uniform Chemical Information Database(European Chemicals Bureau)(Edition 2000)による。 *4 溶離液：メタノール/緩衝液(pH1.7)(1/1 V/V)

濃縮度試験 事業対象年度 平成18年度					濃縮度試験					依 頼	毒性試験	
試験期間 18.12.1 ~ 19.1.26					試験期間 . . . ~ . . .						年月日	
試験装置 標・揮		LC50値 mg/L(hr)魚種()			試験装置 標・揮		LC50値 mg/L(hr)魚種()			経過		
水槽設定濃度 ()					水槽設定濃度 ()							
被験物質		分散剤			被験物質		分散剤					
第1濃度区					第1濃度区							
第2濃度区					第2濃度区							
第3濃度区					第3濃度区							
濃縮倍率		脂質含有率 開始前 終了後 % 魚種()			濃縮倍率		脂質含有率 開始前 終了後 % 魚種()					
		日後	日後	日後	日後	日後	日後	日後	日後			
第1	水槽濃度 ()											
	倍率											
第2	水槽濃度 ()											
	倍率											
第3	水槽濃度 ()											
	倍率											
審査部会 第68回 19年 10月 26日 開催					審査部会 第 回 年 月 日 開催							
判定結果					判定結果							
備考					備考							
分配係数から類推												
[実施機関] 財団法人 化学物質評価研究機構												

K - 1 6 1 3 変化物の類似物質表

化合物名 (CAS 番号)	構造式	官報公示 整理番号 (K- 番号)	分解度 (%)	分解 判定 (年)	分配係数 (log Pow)	LC50 mg/L (ヒメダカ)	濃縮倍率	濃縮 判定 (年)
2 -メルカプト=ベンゾチアゾール (149-30-4)		5-0242 (K-140)	標準(2W) 1975年実施 BOD 6, 0 (3) U V(330nm) 0, 0 (0) HPLC 0, 0 (0)	難分解性 (1976)	/	8.4 (48hr)	1976年実施 1区(100µg/L) : <0.8 2区(10µg/L) : <8 脂質含有率 -	高濃縮性 ではない (1976)
2 - (チオシアノメチルチオ)ベンゾチアゾール (21564-17-0)		5-3424 (K-868)	標準(4W) 1989年実施 BOD 0, 0, 0 (0) HPLC 22, 20, 19 (20) 〔一部変化し、2 -メルカプトベンゾチアゾール、ビス(2 -ベンゾチアゾリルチオメチル)ジスルフィド、1 - (2 -ベンゾチアゾリル) - 4 - (2 -ベンゾチアゾリルチオメチルジチオ) - 1, 3 -ジチアブタンを生成し、残留した。〕	難分解性 (1989)	1989年実施 被験物質 3.30 (フラスコ振とう法) 不純物 >4.37 (フラスコ振とう法)	0.0989 (48hr)	1989年実施 1区(2 µg/L) : < 14 ~ 20 2区(0.2µg/L) : <153 ~ 268 脂質含有率 4.6%	高濃縮性 ではない (1990)
ベンゾチアゾール (95-16-9)		5-3426 (K-1042)	標準(4W) 1989年実施 BOD 0, 0, 0 (0) TOC 1, 0, 2 (1) HPLC 0, 1, 1 (1)	難分解性 (1989)	1990年実施 2.01 (フラスコ振とう法)	87.2 (48hr)	1990年実施 1区(200µg/L) : 2.1 ~ 5.1 2区(20µg/L) : <4.1 ~ 7.5 脂質含有率 4.0%	高濃縮性 ではない (1990)
3 - アリルオキシ - 1, 2 - ベンゾイソチアゾール = 1, 1 - ジオキシド (27605-76-1)		5-3433 (K-1613)	標準(4W) 2002年実施 BOD 29, 24, 24 (26) TOC 28, 28, 30 (29) HPLC 100, 100, 100 (100) 〔1, 2 - ベンゾイソチアゾール - 3 (2 H) オン = 1, 1 - ジオキシドを生成し、残留した。〕	難分解性 (2002)	/	/	1, 2 - ベンゾイソチアゾール - 3 (2 H) - オン = 1, 1 - ジオキシドから類推	
1, 2 - ベンゾイソチアゾール - 3 (2 H) - オン = 1, 1 - ジオキシド (81-07-2)		5-0198 (K-1613 変化物)	/	/	2006年実施 <0.3 (HPLC法)*	/	分配係数から類推	

* 溶離液 : メタノール / 緩衝液 (pH1.7) (1/1 V/V)

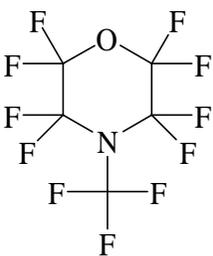
整理番号 K-1705 (NEDO 276, 4-0641)	分解度試験	分解度試験	分解度試験
ジメチロールトリシクロデカン (26896-48-0)	事業対象年度 平成15年度	契約 年 月 日	契約 年 月 日
[別名: 4, 8-ジヒドロキシメチルトリシクロ[5.2.1.0 ^{2,6}]デカン]	試験期間 15.10.2~15.12.18	試験期間 . . . ~ . . .	試験期間 . . . ~ . . .
	試験装置 (標)・揮	試験装置 標・揮	試験装置 標・揮
構造式(示性式)・物理化学的性状  分子式 C ₁₂ H ₂₀ O ₂ 分子量 196.29	試験濃度	試験濃度	試験濃度
	被験物質 100 mg/L	被験物質 mg/L	被験物質 mg/L
	汚泥 30 mg/L	汚泥 mg/L	汚泥 mg/L
	本試験期間 4 週間	本試験期間 週間	本試験期間 週間
	試験結果 間接 BOD 2, 1, 1 (1%) 直接 G C 19, 22, 15 (19%)	試験結果 間接 直接	試験結果 間接 直接
純度 95.4%(異性体を含む) 外観 無色粘稠液体	審査部会 第35回 16年 6月18日開催	審査部会 第 回 年 月 日開催	審査部会 第 回 年 月 日開催
不純物(物質名, 含有率) 残り4.6%は不明	溶解度(対水, その他) 対水*1 11 g/L(20°C)	判定 難分解性	判定
融点*1 約23°C	備考 1. 回収率 (水+被験物質)系 100% (汚泥+被験物質)系 100% 2. 実施機関 ・株式会社 三菱化学安全科学研究所 3. 特記事項 ・被験物質は7種の異性体混合物 ・(汚泥+被験物質)系において、被験物質は一部変化して、メチロールトリシクロデカンアルデヒド(2~7%生成, log Kow = 1.48*3)及びメチロールトリシクロデカン酸(12~15%生成, log Kow = 1.73*3)を生成し、残留した。 また、LC-MSクロマトグラム上の保持時間から、メチロールトリシクロデカンアルデヒドとメチロールトリシクロデカン酸は被験物質より極性が高いと推定された。従って、後続試験は被験物質で実施した。 ・変化の経路 	判定	
沸点*1 約175°C(1.3 hPa)		1-オクタノール/水分配係数	
密度*1 1.102~1.109cm ³ (50°C)		log Pow = 1.2~2.1 (HPLC法)*2	
LD50		(加重平均値 = 1.8)	
IRチャートの有無 (有)・無			
用途			
生産量(年)			
試料 購入先 東京化成工業			
経済産業公報発表年月日 年 月 日			

*1 International Uniform Chemical Information Database(European Chemicals Bureau)(Edition 2000)による。

*2 溶離液:メタノール/精製水(6/4 V/V)

*3 Kowwin v 1.67による計算値。

濃縮度試験					事業対象年度 平成17年度					濃縮度試験				
試験期間					17.10.24 ~ 17.11.28					試験期間				
試験装置 標・揮		LC50値 mg/L(hr)魚種()			試験装置 標・揮		LC50値 mg/L(hr)魚種()							
水槽設定濃度 ()					水槽設定濃度 ()									
被験物質		分散剤			被験物質		分散剤							
第1濃度区					第1濃度区									
第2濃度区					第2濃度区									
第3濃度区					第3濃度区									
濃縮倍率		脂質含有率 開始前 終了後 % % 魚種()			濃縮倍率		脂質含有率 開始前 終了後 % % 魚種()							
		日後	日後	日後	日後	日後	日後	日後	日後					
第1	水槽濃度 ()													
	倍率													
第2	水槽濃度 ()													
	倍率													
第3	水槽濃度 ()													
	倍率													
審査部会 第68回 19年 10月 26日 開催					審査部会 第 回 年 月 日 開催									
判定結果					判定結果									
備考					備考									
分配係数から類推														
[実施機関] 財団法人 化学物質評価研究機構														
依 頼										毒 性 試 験				
										年 月 日				
依 頼										經過				

整理番号 K-1738 (NEDO 312, 5-3790)	分解度試験	分解度試験	分解度試験
ペルフルオロ-N-メチルモルホリン (382-28-5)	事業対象年度 平成17年度	契約 年 月 日	契約 年 月 日
	試験期間 17.11.28~18.1.31	試験期間 . . . ~ . . .	試験期間 . . . ~ . . .
	試験装置 Closed bottle	試験装置 標・揮	試験装置 標・揮
構造式 (示性式) ・物理化学的性状  分子式 C ₅ F ₁₁ NO 分子量 299.04	試験濃度	試験濃度	試験濃度
	被験物質 10.2 mg/L	被験物質 mg/L	被験物質 mg/L
	都市下水処理場二次放流水 1滴/L	汚泥 mg/L	汚泥 mg/L
	本試験期間 4 週間	本試験期間 週間	本試験期間 週間
	試験結果 間接 BOD -4, -6 (0)% 直接 GC 2, -1 (0)%	試験結果 間接 直接	試験結果 間接 直接
純度 ①99.5%* ¹ ②98%* ² ③99.5%* ³	外観 無色透明液体		
不純物 (物質名, 含有率)	溶解度 (対水, その他) 対水 5.10 mg/L (20°C) (フラスコ法) 対クロロホルム 10 g/L 以上 対テトラヒドロフラン 2 g/L 以上	審査部会 第56回 18年 7月 21日開催	審査部会 第 回 年 月 日開催
融点* ⁴ -80°C		判定 難分解性	判定
沸点* ⁴ 51°C	1-オクタノール/水分配係数 log Pow > 3.93 (フラスコ振とう法による予備値)	備考 1. 回収率 (水+被験物質)系 92.5% (汚泥+被験物質)系 92.4% 2. 実施機関 ・財団法人 化学物質評価研究機構 3. 特記事項 ・分解度の平均値が負の値に算出されたため、0と表記した。	備考
密度 1.695 g/cm ³ (25°C)	解離定数 解離基なし		
LD ₅₀			
IRチャートの有無 (有)・無			
用途			
生産量 (年)			
試料購入先 ①AVOCADO RESEARCH CHEMICALS LTD. ②Fluorochem Limited ③企業提供			
経済産業省公報発表年月日 年 月 日			

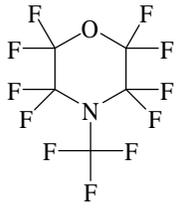
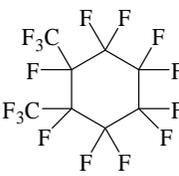
*1 AVOCADO RESEARCH CHEMICALS LTD. 添付資料による。 *2 Fluorochem Limited 添付資料による。 *3 試料提供企業添付資料による。

*4 The Physical Properties Database (Syracuse Research Corporation)による。

①分配係数試験及び物理化学性状試験 ②分解度試験 ③濃縮度試験

濃縮度試験			事業対象年度 平成17年度			濃縮度試験			濃縮度試験			毒性試験			
試験期間			18.2.6 ~ 18.6.27			試験期間			. . . ~ . . .			年月日			
試験装置 標・揮		LC50値 >0.500 mg/L(96hr)魚種(ヒメダカ)				試験装置 標・揮		LC50値 mg/L(hr)魚種()					依 頼 経過		
水槽設定濃度 (μg/L)						水槽設定濃度 ()									
被験物質		分散剤				被験物質		分散剤							
		メガファック F-443	テトラヒドロ フラン												
第1濃度区		25.4	25.4	8900		第1濃度区									
第2濃度区		2.54	2.54	8900		第2濃度区									
第3濃度区						第3濃度区									
濃縮倍率			脂質含有率 開始前 2.43% 終了後 4.55% 魚種(コイ)			濃縮倍率			脂質含有率 開始前 % 終了後 % 魚種()						
		14日後	28日後	42日後	52日後	60日後			日後	日後	日後	日後	日後		
第1	水槽濃度(μg/L)	25.1	23.5	24.8	25.3	24.7	第1	水槽濃度()							
	倍率	76	170	240	250	250		倍率							
		85	200	210	250	260									
第2	水槽濃度(μg/L)	2.44	2.39	2.47	2.49	2.50	第2	水槽濃度()							
	倍率	74	160	170	220	210		倍率							
		64	140	170	220	250									
第3	水槽濃度()						第3	水槽濃度()							
	倍率							倍率							
審査部会 第68回 19年 10月 26日 開催						審査部会 第 回 年 月 日 開催									
判定結果						判定結果									
備考 [定常状態における濃縮倍率] 第1濃度区 240倍 第2濃度区 200倍 [回収率] [定量下限濃度] 試験水 第1濃度区 1.2 μg/L 第2濃度区 0.12μg/L 供試魚 第1濃度区 81.6% 供試魚 第1濃度区 710 ng/g 第2濃度区 97.6% 第2濃度区 63 ng/g [実施機関] 財団法人 化学物質評価研究機構						備考									

K - 1738 の類似物質表

化合物名 (CAS 番号)	構造式	官報公示 整理番号 (K- 番号)	分解度 (%)	分解 判定 (年)	分配係数 (log Pow)	LC ₅₀ mg/L (ヒメダカ)	濃縮倍率	濃縮 判定 (年)
ペルフルオロ - N - メチルモルホリン (382-28-5)		5-3790 (K-1738)	Closed bottle法(4W) (10.2mg/L) 2006年実施 BOD -4, -6 (0)* G C 2, -1 (0)	難分解性 (2006)	2005年実施 >3.93 (フラスコ振とう 法による予備値)	>0.500 (96hr)	2006年実施 定常状態における濃縮倍率 1区(25.4μg/L) : 240 2区(2.54μg/L) : 200 脂質含有率 開始前 2.43% 終了後 4.55%	
ペルフルオロ - 1 , 2 - ジメチルシクロ ヘキサン (306-98-9)		3-3247 (K-1739)	標準(4W) 2006年実施 BOD 1, -9, -5 (0)* G C -6, -3, -4 (0)*	難分解性 (2006)	2005年実施 >3.80 (フラスコ振とう 法による予備値)	>1.50 (96hr)	2006年実施 定常状態における濃縮倍率 ピーク1 1区(2.33 μg/L) : 1400 2区(0.233μg/L) : 1600 ピーク2 1区(2.33 μg/L) : 6900 2区(0.233μg/L) : 7700 ピーク3 1区(2.33 μg/L) : 6000 2区(0.233μg/L) : 5800 ピーク4 1区(2.33 μg/L) : 5400 2区(0.233μg/L) : 5700 ピーク5 1区(2.33 μg/L) : 16000 2区(0.233μg/L) : 15000 脂質含有率 開始前 3.20% 終了後 4.59%	高濃縮性 (2006)

* 分解度の平均値が負の値に算出されたため、0 と表記した。