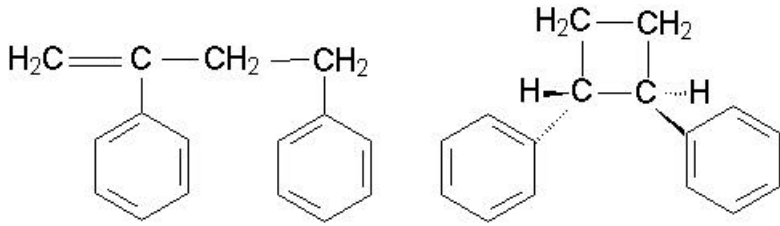


No	58		
一般名(英名)	シマジン(Simazine)		
略名	CAT	CAS No.	122-34-9
化学名	6-Chloro-N,N'-diethyl-1,3,5-triazine-2,4-diamine 2-Chloro-4,6-bis(ethylamino)-S-triazine		
【化学構造式】			
分子式	C ₇ H ₁₂ ClN ₅	分子量	201.66
物性等	外観等	無色結晶, 特徴的な臭気	
	融点(沸点)	mp 226-227, 225	蒸気圧 6.1 x 10 ⁻⁹ mmHg(20) 8.1 x 10 ⁻⁷ Pa (20)
	水溶解性	5mg/L(20) < 1 mg/mL(22)	オクタン-1/水分配係数 Log Pow=1.96, 4.7
	有機溶解性	ジ オキサ, イソプロピル, セルソルブ, メタノール, DMSO, クロロホルムに微溶	
		強酸, 強アルカリで加水分解	
毒性等	急性毒性	LD ₅₀ 5,000mg/kg, 971mg/kg (ラット, 経口)	ADI 0.005 (mg/kg/ 日)
	特殊毒性	目を刺激, 神経系に影響	
用途等	トリアジン系除草剤 (トウモロコシ, サトウキビ 畑の一年生多年生雑草に適用)	生産量	水和剤 256t, 粒剤 2,690t, 輸入 125t(原体), 36t(製剤)('94)
規制等	1958年に農薬登録, 水質汚濁防止法(第2条有害物質), 水道法, 廃掃法, 地下水・土壌・水質環境基準, 国連番号 2763, IARC 3		
【備考】			

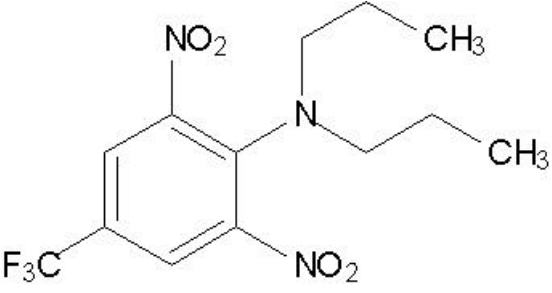
No	59		
一般名(英名)	スチレン2量体(Styrene dimers)		
略名		CAS No.	25241-68-1
化学名			
【化学構造式】			
			
分子式	C ₁₆ H ₁₆	分子量	
物性等	外観等	無色透明液体	
	融点(沸点)	bp (不明)	蒸気圧 mmHg ()
	水溶解性	溶解(25)	オクタノール/水分配係数 Log Pow=
	有機溶解性	有機溶媒に可溶	
毒性等	急性毒性	LD ₅₀ mg/kg(ラット, 経口)	ADI (mg/kg/日)
	特殊毒性		
用途等	styrene monomer を重合させる polymer (樹脂) 製造時における副産物	生産量	styrene monomer 2,939,111t(生産量)('95)
規制等	styrene monomer の規制 : 消防法(危険物第4類), 悪臭防止法, 労働安全衛生法, 海洋汚染防止法(B類), 航空法(第3引火性液体), 港則法(第1条特定悪臭物質), IARC 2B, 国連番号 2055		
【備考】 3種の二量体がGC/MS, NMR等により構造が推定されているが, 物性等については明らかではない。 styrene dimer A: cis-1,2-diphenylcyclobutane B: trans-1,2-diphenylcyclobutane C: 2,4-diphenyl-1-butene			


No	59		
一般名(英名)	スチレン3量体(Styrene trimers)		
略名		CAS No.	28213-80-1
化学名			
【化学構造式】			
分子式	C ₂₄ H ₂₄	分子量	
物性等	外観等	無色透明液体及び固体	
	融点(沸点)	bp	蒸気圧 mmHg()
	水溶解性	水に ppm 溶解(25)	オクタノール/水分配係数 Log Pow=
	有機溶解性	有機溶媒に可溶	
毒性等	急性毒性	不明 (LD ₅₀ mg/kg(経口,マウス))	ADI (mg/kg/日)
	特殊毒性		
用途等	styrene monomer 重合時における副産物		生産量
規制等	styrene monomer の規則, 生産量は2量体の項を参照		
【備考】 6種の三量体がGC/MS, NMRなどより分離, 構造解析が行われているが, 物性等については明確ではない。 styrene trimer A: 2,4,6-triphenyl-1-hexene B: 1e-phenyl-4e-(1'-phenylethyl)tetralin (isomer) C: 1a-phenyl-4e-(1'-phenylethyl)tetralin (isomer) D: 1a-phenyl-4a-(1'-phenylethyl)tetralin (isomer) E: 1e-phenyl-4a-(1'-phenylethyl)tetralin (isomer) F: triphenylcyclohexane			

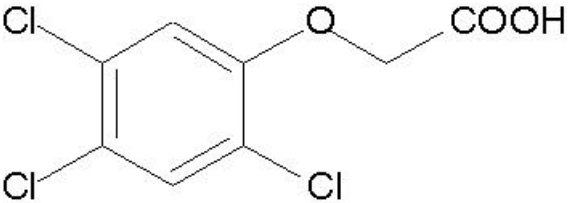
No	60			
一般名(英名)	トキサフェン (Toxaphene)			
略名	カンフェクロル(Camphechlor) ; Alltox	CAS No.	8001-35-2	
化学名	Chlorinated camphene ; polychlorocamphene			
【化学構造式】				
分子式	C ₁₀ H ₁₀ Cl ₈ が主成分	分子量	413.8(平均値)	
物性等	外観等	黄色ワックス状固体, 黄色～琥珀色ロウ状固体, 特徴ある臭気		
	融点(沸点)	mp 65-90	蒸気圧 3 x10 ⁻⁷ mmHg(20), 53Pa(25), 0.2 -0.4 mmHg(25)	
	水溶解性	0.40ppm, 3ppm 溶解 0.055mg/100mL 溶解	オクタン-1/水分配係数	Log Pow = 6.44, 3.3
	有機溶解性	芳香族系溶媒に易溶, 加味ルム, ハキチなど多くの有機溶媒に可溶		
		加熱, アルカリ, 強い日光, 鉄触媒下で分解		
毒性等	急性毒性	LD ₅₀ 90(), 80() mg/kg(ラット,経口)	ADI (mg/kg/ 日)	
	特殊毒性	発癌性		
用途等	有機塩素系殺虫剤	生産量	無	
規制等	農薬未登録, 米国では 1983 年に農薬の規制強化で使用量が減少, 国連番号 2761, POPs, IARC 2B			
【備考】 カンファの塩素化物で多成分混合物				

No	61		
一般名(英名)	トリブチルスズ (Tributyltin) Bis(tributyltin)oxide, ビストリブチルスズオキサイド, ビストリブチルスズオキシド		
略名	TBTO	CAS No.	56-35-9
化学名	Hexabutyldistannoxane ; Hexabutyl distannoxane		
【化学構造式】			
分子式	C ₂₄ H ₅₄ Sn ₂ O	分子量	596.16
物性等	外観等	無色透明液体, 特有の刺激臭(微黄色)	
	融点(沸点)	bp 180 (2mmHg,分解)	蒸気圧 1.6 x 10 ⁻³ mmHg(25)
	水溶解性	0.75ppm(pH6.0-6.6) < 1mg/mL(21.5)	オクタン-1/水分配係数 Log Pow = 3.20 (pH 6)
	有機溶解性	95%イタノール, アセトンに可溶, 多くの有機溶媒と混じる (芳香族溶剤に可溶)	
毒性等	急性毒性	LD ₅₀ 87mg/kg, 55mg/kg (ラット, マウス: 経口)	ADI 1.6 μg/kg/日
	特殊毒性	摂取, 吸入により毒性。皮膚, 眼を刺激	
用途等	漁網防染剤, 船底塗料, 繊維・皮革などの防かび加工 木材の防腐加工, 中間原料	生産量	無
規制等	TBTO は毒劇物取締法(劇物), 1990年 TBTO を化審法第1種特定化学物質に指定(その他の TBT 化合物 13 種は第2種特化指定), 家庭用品, POPs, 国連番号 3020		
【備考】 トリブチルスズ (TBT) 化合物としては bis(tributyltin)oxide(TBTO), tributyltin chloride, tributyltin fluoride, tributyltin hydroxide, tributyltin acetate 等があるが、ここでは TBTO, tributyltin chloride の2物質について紹介する。			

No	6 1		
一般名 (英名)	トリブチルスズ (Tributyltin) Tributyltin chloride, 塩化トリブチルスズ		
略 名		CAS No.	1461-22-9
化学名			
【化学構造式】			
分子式	C ₁₂ H ₂₇ SnCl	分子量	325.53
物性等	外観等	無色透明液体, 特有の刺激臭	
	融点(沸点)	bp 132 (12mmHg,分解)	蒸気圧 mmHg ()
	水溶解性	()	オクタン-1/水分配係数 Log Pow = (pH)
	有機溶解性		
毒性等	急性毒性	LD ₅₀ 129, 117mg(ラット, マウス:経口)	ADI 1.6 μ g/kg/ 日(TBTO)
	特殊毒性		
用途等	殺菌剤	生産量	無
規制等	TBTchloride は毒劇物取締法(劇物), 1990 年化審法第 2 種特定化学物質に指定 (TBTO は第 1 種特定化学物質、その他 TBT 化合物の 13 種は第 2 種特定化学物質に指定), 家庭用品 (有害物質)		
【備考】 トリブチルスズ (TBT) 化合物としては bis(tributyltin)oxide(TBTO), tributyltin chloride, tributyltin fluoride, tributyltin hydroxide, tributyltin acetate 等があるが、ここでは TBTO, tributyltin chloride の 2 物質について紹介する。			

No	62		
一般名(英名)	トリフルラリン(Trifluralin)		
略名		CAS No.	1582-09-8
化学名	2,6-Dinitro-N,N-dipropyl-4-(trifluoromethyl)benzenamine		
【化学構造式】			
			
分子式	C ₁₃ H ₁₆ F ₃ N ₃ O ₄	分子量	335.28
物性等	外観等	黄色結晶, 橙色結晶, 無臭	
	融点(沸点)	mp 48.5-49, 46-47 bp 139-140 (0.5kPa) 139-140 (4.2mmHg)	蒸気圧 1.99 x 10 ⁻⁴ mmHg(29.5) 0.014 Pa (25)
	水溶解性	水に 0.0024g/100mL 溶解	オクタン/水分配係数 Log Pow = 5.07 (pH=7.25)
	有機溶解性	アセトンに易溶, メタノール, イタノール, 加水ホルムに可溶, 酢酸エチルに微溶, 1-ヒルに不溶	
毒性等	急性毒性	LD ₅₀ 500 mg/kg(ラット, 経口)	ADI (mg/kg/日)
	特殊毒性		
用途等	除草剤(野菜, 花卉, 桑, 茶畑に1年生休耕雑草及び非農地に適用)	生産量	乳剤 212kL, 粒剤 3,701t, 輸入 157t(原体)('94)
規制等	1966年に農薬登録, IARC3		
【備考】			

No	63		
一般名(英名)	トリフェニルスズ (Triphenyltin) 塩化トリフェニルスズ (triphenyltin chloride)		
略名		CAS No.	639-58-7
化学名			
【化学構造式】			
			
分子式	C ₁₈ H ₁₅ SnCl	分子量	385.47
物性等	外観等	無色結晶	
	融点(沸点)	mp 104-105	蒸気圧 mmHg()
	水溶解性	溶解(25)	オクタン-1/水分配係数 Log Pow =
	有機溶解性	芳香族溶剤に可溶	
毒性等	急性毒性	塩化トリフェニルスズ : LD ₅₀ 190, 18mg/kg(ラット, マウス; 経口)	ADI 0.5 μg/kg/日(トリフェニルスズ)
	特殊毒性		
用途等	船底塗料, (塩化トリフェニルスズ : 殺菌剤)		生産量
規制等	1990年化審法(7種のトリフェニルスズ化合物を第2種特定化学物質に指定), 家庭用品(有害物質), 毒劇物取締法(劇物), POPs		
【備考】			

No	64		
一般名(英名)	2,4,5-トリクロロフェノキシ酢酸(2,4,5-Trichlorophenoxyacetic acid)		
略名	2,4,5-T ; Esteron ; Trioxone	CAS No.	93-76-5
化学名	(2,4,5-Trichlorophenoxy)acetic acid		
【化学構造式】			
			
分子式	C ₈ H ₅ Cl ₃ O ₃	分子量	255.48
物性等	外観等	白色結晶性粉末	
	融点(沸点)	mp 156.6, 153-158	蒸気圧 << 1 Pa mmHg(25)
	水溶解性	238mg/kg 溶解(30)	オタノール/水分配係数 Log Pow=
	有機溶解性	エタノール, エーテル, メタノール, トルエンに可溶	
毒性等	急性毒性	LD ₅₀ 389, 500mg/kg(マウス, ラット: 経口)	ADI 0.03 (mg/kg/ 日)
	特殊毒性		
用途等	フェノキシ系除草剤(広葉雑草, 灌木に有効)		生産量 無
規制等	1964年農薬登録, 1975年農薬失効, 毒劇物取締法(劇物), 国連番号 2765		
【備考】ベトナム戦争の際, 枯葉剤として2,4,5-T, 2,4-PAの混合剤(オラシノ剤)がジャングルに散布された。不純物としてダイオキシン(2,3,7,8-TCDD)を含み問題となった。			

No	65		
一般名(英名)	ビンクロゾリン(Vinclozolin)		
略名	Ronilan ; Vorlan	CAS No.	50471-44-8
化学名	3-(3,5-Dichlorophenyl)-5-ethenyl-5-2,4-oxazolidinedione		
【化学構造式】			
分子式	C ₁₂ H ₉ Cl ₂ NO ₃	分子量	286.11
物性等	外観等	無色結晶, 微芳香臭	
	融点(沸点)	mp 108	蒸気圧 0.1 x 10 ⁻⁶ mmHg(20)
	水溶解性	水 3.4 ppm 溶解(20)	オクタノール/水分配係数 Log Pow = 3.0(pH 7)
	有機溶解性	アセトン, ヘキサン, シクロヘキサノール, エーテル, 四ヒドロフラン, 酢酸エチルに可溶	
		アルカリ溶液で徐々に加水分解	
毒性等	急性毒性	LD ₅₀ 9,590mg/kg, 10g/kg (ラット,経口)	ADI 0.01 (mg/kg/日) (0.07mg/kg/day)
	特殊毒性	目及び皮膚に刺激性, 潜在的な皮膚過敏性物質	
用途等	カーバマイト系殺菌剤(ウドン病, ヲカ病に適用)	生産量	水和剤 103t, 燻煙剤 5t, 輸入 3t (原体), 72t (製剤) ('94)
規制等	1971年農薬登録, 1998年農薬失効		
【備考】			

No	66		
一般名(英名)	ジネブ(Zineb)		
略名		CAS No.	12122-67-7
化学名	[ethylenebis(dithiocarbamate)] zinc [[1,2-Ethanediybis[carbamoedithioato]](2-)] zinc		
【化学構造式】			
分子式	(C ₄ H ₆ N ₂ S ₄ Zn) _n	分子量	(275.7) _n
物性等	外観等	黄色～褐色粉末	
	融点(沸点)	mp(157)以下で分解	蒸気圧 mmHg()
	水溶解性	水に 10 ppm 溶解(室温)	オクタン-1/水分配係数 Log Pow =
	有機溶解性	二硫化炭素, ピリジンに可溶	
		光, 水に不安定	
毒性等	急性毒性	LD ₅₀ > 5,000mg/kg, 5.2g/kg(ラット, 経口)	ADI 0.03 (mg/kg/日)
	特殊毒性		
用途等	ジチオカルバメイト系殺菌剤(野菜, 桑のサト病, ヲト病, 加病, 果樹のクテン病, タソ病に適用)	生産量	原体 150t, 水和剤 251t ('94)
規制等	1952年に農薬登録, 国連番号 2588(2771), IARC3		
【備考】			

No	67			
一般名(英名)	ジラム(Ziram)			
略名		CAS No.	137-30-4	
化学名	bis(dimethyldithiocarbamato) zinc, (T-4)-Bis(dimethylcarbamidithioato--S,S') zinc			
【化学構造式】				
分子式	C ₆ H ₁₂ N ₂ S ₄ Zn	分子量	305.83	
物性等	外観等	白色結晶, 白色粉末		
	融点(沸点)	mp 250, 240	蒸気圧	
	水溶解性	水に 65 ppm 溶解	オクタン-1/水分配係数	Log Pow = 1.08, 1.23
	有機溶解性	エタノール, エーテルに微溶, アセトン, 二硫化炭素に溶解		
		酸性にて分解		
毒性等	急性毒性	LD ₅₀ 1.4g/kg(ラット, 経口)	ADI 0.02 (mg/kg/日)	
	特殊毒性	皮膚, 粘膜を刺激		
用途等	ジチオカルバメイト系殺菌剤 (果樹, 野菜のうどんこ病, 加病, コクテン病, モリニア病に適用)		生産量 原体 344t('94)	
規制等	1949年に農薬登録, 国連番号 2771, IARC3			
【備考】				

参考文献

- 1) メルク・インデックス (第12版)
- 2) 農薬データブック (第3版, 1997年)(ソフトサイエンス社)
- 3) 農薬要覧 (日本植物防疫協会, 1995年版)
- 4) 13197の化学商品 (化学工業日報社, 1997年発行)
- 5) 環境化学物質要覧 (丸善)(環境庁環境化学物質研究会編, 昭和63年発行)
- 6) 農薬毒性の事典 (三省堂, 1988年発行)
- 7) 環境庁環境保健部環境安全課: 化学物質と環境
- 8) 環境庁保健調査室、ケミカルアセスメントポータル
- 9) 環境庁保健調査室: 化学物質分析法開発調査報告書
- 10) インターネット検索情報等

平成10年8月1日発行

平成10年度
登録第6号

内分泌かく乱化学物質データ集

編集・発行 東京都立衛生研究所
生活科学部 乳肉衛生研究科
〒169-0073 新宿区百人町3-24-1
電話 03(3363)3231 代表(4100)
FAX 03(3368)4060