

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21

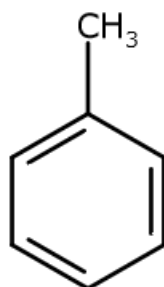
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

人健康影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

トルエン

優先評価化学物質通し番号 46



令和3年9月

経済産業省

22

目 次

23	1 評価対象物質の性状	1
24	1-1 評価対象物質の設定	1
25	1-2 物理化学的性状及び濃縮性	2
26	1-3 分解性	4
27	2 【付属資料】	7
28	2-1 物理化学的性状一覧	7
29	2-2 その他	7
30		

31 1 評価対象物質の性状

32 本章では、優先評価化学物質「トルエン」のリスク評価に用いる物理化学的性状データ、
33 環境中における分解性に係るデータを示す。

34

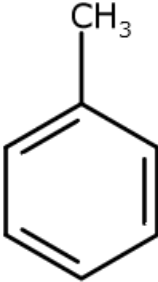
35 1-1 評価対象物質の設定

36 トルエンは分解度試験結果に基づき「分解性が良好と判断される物質」であり、評価対象
37 物質は、トルエンとする。

38

39

表 1-1 評価対象物質の構造等

評価対象物質構造	
評価対象物質名称	トルエン
分子式	C ₇ H ₈
優先評価化学物質通し番号	46
CAS 登録番号	108-88-3

40

41

42

43

44 1-2 物理化学的性状及び濃縮性

45 下表にモデル推計に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。なお、表中の下線
46 部は、評価Ⅱにおいて精査した結果、評価Ⅰから変更した値を示している。

47

48

表 1-2 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ*

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	—	92.13	—	92.13
融点	°C	-95 ¹⁻⁵⁾	測定値	-95 ¹⁾
沸点	°C	110.6 ^{1-3,6)}	101.3 kPa での測定値	110.6 ¹⁾
蒸気圧	Pa	3,000 ¹⁾	20°Cでの測定値	2,800 ¹⁾
水に対する溶解度	mg/L	520 ^{1,3,7)}	20°Cでの測定値	510 ¹⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	2.65 ^{1,7,8)}	測定値	2.65 ¹⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	570 ⁷⁾	複数の測定値 (n=4) の算術平均値	650 ⁷⁾
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	223 ^{6,7)}	複数の測定値 (n=37) の算術平均値	160 ⁶⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	90 ^{1,2,3,5,6,10)}	濃縮度試験における測定値	26 ⁹⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	1 ¹¹⁾	logPow と BCF から設定	1 ¹¹⁾
解離定数(pKa)	—	—	解離性の基を有さない物質	— ¹²⁾

49 ※ 令和元年度第1回化審法のリスク評価等に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議
50 (令和元年10月25日)で了承された値

51 1) OECD(2003)

7) Mackay(2006)

52 2) EHC

8) IUCLID

53 3) MOE(2004)

9) EPI Suite(2012)

54 4) NITE(2006)

10) ATSDR(2017)

55 5) ECHA

11) MHLW, METI, MOE(2014)

56 6) HSDB

12) 評価Ⅰにおいて解離定数は考慮しない

57

58 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

59 ① 融点

60 評価Ⅰで採用した値は、OECD(2003)に記載された測定値(-95°C)である。その他の信
61 頼のおける情報源においても、EHC、MOE(2004)、NITE(2006)等にこの値が記載されて
62 おり、ECHAにも同様の記載がある。評価Ⅱにおいてもこの値(-95°C)を用いる。

63

64 ② 沸点

65 評価Ⅰで採用した値は、OECD(2003)に記載された標準圧力(101.3kPa)における測定値
66 (110.6°C)である。その他の信頼のおける情報源においても、EHC、HSDB、MOE(2004)等
67 にこの値が記載されており、評価Ⅱにおいてもこの値(110.6°C)を用いる。

68

69 ③ 蒸気圧

70 評価Ⅰで採用した値は、OECD(2003)に記載された20°Cでの測定値と、25°Cにおける測
71 定値から20°Cに換算した値との平均値(2,800Pa)である。評価Ⅱにおいては20°Cにおける

72 測定値(3,000 Pa)を用いる。

73

74 ④ 水に対する溶解度

75 評価Ⅰで採用した値は、OECD (2003) に記載された 20℃における測定値と、25℃における測
76 定値から 20℃に換算した値との平均値 (510 mg/L) である。評価Ⅱにおいては、Mackay (2006)
77 や MOE (2004) 等にも記載されている 20℃における測定値 (520 mg/L) を用いる。

78

79 ⑤ logPow

80 評価Ⅰで採用した値は、OECD (2003) に記載された測定値 (2.65) である。IUCLID (2000)
81 や Mackay (2006) にもこの値が記載されており、評価Ⅱにおいてもこの値 (2.65) を用いる。

82

83 ⑥ ヘンリー係数

84 評価Ⅰで採用した値は、Mackay (2006) に掲載された 25℃における測定値 (650 Pa・
85 m³/mol) である。評価Ⅱにおいては Mackay (2006) に掲載された 20℃における複数の測定値
86 (n=4)の算術平均値 (570 Pa・m³/mol) を用いる。

87

88 ⑦ Koc

89 評価Ⅰで採用した値は、HSDB に記載された 2 種類の土壌 (silt loam , sandy loam) での測
90 定値 (160 L/kg) である。信頼性における情報源としては HSDB や Mackay (2006)から複数の
91 測定値が得られている。そのため、評価Ⅱにおいてはこれらの測定値 (n=37)」の算術平均
92 値 (223 L/kg) を用いる。

93

94 ⑧ BCF

95 評価Ⅰで採用した値は、EPI Suite の BCFBAF による推計値 (26 L/kg) である。OECD
96 (2003) にはキースタディとして測定値 (90 L/kg) の記載があり、その他の信頼における情
97 報源においても、ATSDR (2017) 、HSDB 、MOE (2004) 、NITE (2006) にこの値が記載され
98 ており、ECHA にも同様の値の記載がある。そのため、評価Ⅱにおいてはこの値 (90 L/kg)
99 を用いる。

100

101 ⑨ BMF

102 評価Ⅰで採用した値は、logPow (2.65) 及び BCF (26 L/kg) から化審法における優先評価化
103 学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。) に従って
104 設定したものである。その他の信頼における情報源においても、BMF の測定値は得られな
105 かったため、評価Ⅱにおいては logPow (2.65) 及び BCF (90 L/kg)から技術ガイダンスに従っ
106 て設定した値 (1) を用いる。

107

108 ⑩解離定数

109 トルエンは解離性の基を有していない。

110

111 1-3 分解性

112 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

113

114

表 1-3 分解に係るデータのまとめ*

項目		半減期 (日)	詳細	
大気	大気における総括分解半減期		NA	
	機序別の半減期	OHラジカルとの反応	2.8 ³⁾	室温での反応速度定数の測定値から、OHラジカル濃度を 5×10^5 molecule/cm ³ として算出
		オゾンとの反応	7.6×10^4 ⁴⁾	24°Cでの反応速度定数の測定値から、オゾン濃度を 7×10^{11} molecule/cm ³ として算出
		硝酸ラジカルとの反応	1,900 ⁴⁾	23°Cでの反応速度定数の測定値から、硝酸ラジカル濃度を 2.4×10^8 molecule/cm ³ として算出
水中	水中における総括分解半減期		NA	
	機序別の半減期	生分解	5 ^{2, 5)}	分解度試験からの換算値 ⁶⁾
		加水分解	-	加水分解を受けやすい基を有さない物質
		光分解	NA	
土壌	土壌における総括分解半減期		NA	
	機序別の半減期	生分解	12 ¹⁾	試験濃度 200 mg/kg、含水率 14 %での測定値
		加水分解	-	加水分解を受けやすい基を有さない物質
底質	底質における総括分解半減期		NA	
	機序別の半減期	生分解	20	水中生分解半減期の4倍と仮定 ⁶⁾
		加水分解	-	加水分解を受けやすい基を有さない物質

115 ※ 令和元年度第1回化審法のリスク評価等に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議
116 (令和元年10月25日)で了承された値

117 1) OECD(2003)

4) NIST

118 2) ATSDR(2017)

5) MITI(1980)

119 3) Mackay(2006)

6) MHLW, METI, MOE(2014)

120 NA:情報が得られなかったことを示す

121

122 上記分解項目について、精査概要を以下に示す。なお、「総括分解半減期」とは、分解の
123 機序を区別しない環境媒体ごとのトータルの半減期のことを示す。

124

125 ①大気

126 大気中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、機序別の半減期に関する

127 情報が得られた。

128 ① -1 OH ラジカルとの反応の半減期

129 大気中における OH ラジカルとの反応速度定数に関しては、 $5.78 \times 10^{-12} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ (室
130 温、閃光光分解-共鳴蛍光法) (Mackay (2006))を半減期算出に採用する。技術ガイダンスに
131 従って、反応速度定数から半減期への換算に用いる大気中 OH ラジカル濃度を 5×10^5
132 molecule/cm^3 とした場合、半減期は 2.8 日と算出される。そのため、評価Ⅱではこの値 (2.8
133 日) を用いる。

134 ① -2 オゾンとの反応の半減期

135 大気中におけるオゾンとの反応速度定数に関しては、 $1.5 \times 10^{-22} \pm 7.97 \times 10^{-23} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$
136 (24°C 、絶対法) (NIST) を半減期算出に採用する。技術ガイダンスに従って、反応速度定
137 数から半減期への換算に用いる大気中オゾン濃度を $7 \times 10^{11} \text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半減期
138 は 76,000 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (7.6×10^4 日) を用いる。

139 ① -3 硝酸ラジカルとの反応の半減期

140 大気中における硝酸ラジカルとの反応速度定数に関しては、 $1.79 \times 10^{-17} \pm 1.01 \times 10^{-17}$
141 $\text{cm}^3/\text{molecule/s}$ (23°C 、測定値) (NIST) を半減期算出に採用する。技術ガイダンスに従っ
142 て、反応速度定数から半減期への換算に用いる大気中硝酸ラジカル濃度を 2.4×10^8
143 molecule/cm^3 とした場合、半減期は 1,900 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (1,900 日) を
144 用いる。

145

146 ②水中

147 水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、機序別の生分解の半減期に
148 関する情報が得られた。

149 ② -1 生分解の半減期

150 OECD TG 301C に準じた試験 (被験物質濃度 100 mg/L、活性汚泥濃度 30 mg/L、試験期
151 間 14 日間) の結果は、BOD 分解率が 113%、127%、129%で GC が分解率 100%であった
152 (MITI (1980))。

153 また ATSDR (2017) に記載された OECD TG 301D 試験によると、BOD 分解率は 93%であ
154 る。

155 これらの試験結果を技術ガイダンスに従って生分解半減期に換算すると、いずれも 5 日
156 となる。よって評価Ⅱでは水中での生分解による半減期を 5 日とする。

157 ② -2 加水分解の半減期

158 トルエンは加水分解を受けやすい基を有していない。

159

160 ③土壌

161 土壌中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、機序別の生分解の半減期
162 に関する情報が得られた。

163 ③ -1 生分解の半減期

164 OECD (2003) には、83～92 日の土壌中生分解半減期が記載されているが古い文献からの
165 引用のため、試験の詳細は入手できなかった。一方、同じ OECD (2003) に記載されている
166 Davis and Madsen (1996)の試験では、砂土、砂壤土及び埴土中の ¹⁴C-トルエンの生分解につ
167 いて詳細に解析されており、1) 含水比が増すと生分解半減期が短くなる、2) 初期試験濃度
168 が増大すると分解開始までの時間は長くなるが、開始後の分解速度は速い、3) 有機炭素含
169 有率が増すと分解開始までの時間が短くなる、4) 砂壤土と埴土中での半減期は同程度で、
170 砂土よりも短いと報告されている。報告された見かけの分解半減期を分解開始までの時間
171 で補正した場合の半減期は、初期濃度が 5 mg/kg では、16 時間 (含水比 14%、開始までの時
172 間 59 時間)、11 時間 (同 100%、同 46 時間)で、初期濃度が 200 mg/kg では、169 時間 (含水
173 比 14%、開始までの時間 116 時間)、34 時間 (同 100%、同 186 時間) となる。

174 以上のように、トルエンの土壌中生分解には様々な要因が関与するため、評価Ⅱでは、初
175 濃度 200 mg/kg、含水比 14%、25℃の砂壤土の試験で得られた見かけの半減期の最大値 (169
176 時間+116 時間=285 時間=12 日)を安全側の値として採用する。

177 ③ -2 加水分解の半減期

178 トルエンは加水分解を受けやすい基を有していない。

179

180 ④底質

181 底質中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、機序別の生分解の半減期
182 に関する情報が得られた。

183 ④ -1 生分解の半減期

184 底質中での生分解半減期が得られなかったため、技術ガイダンスに従って、評価Ⅱでの底
185 質中生分解半減期は、水中の生分解半減期の 4 倍である 20 日とする。

186 なお、Mackay (2006) では、堆積物サンプルを用いた試験結果から底質中での嫌氣的生分
187 解の半減期を 56～210 日と算出している。

188

189 ④ -2 加水分解の半減期

190 トルエンは加水分解を受けやすい基を有していない。

191

192

193 **2 【付属資料】**

194 **2-1 物理化学的性状一覧**

195 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照

196

197 (出典)

198 ATSDR(2017): Agency for Toxic Substances and Disease Registry. “Toxicological Profile for
199 TOLUENE”, Toxicological Profiles. 2017.

200 ECHA: Information on Chemicals – Registered substances.

201 <http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>, (2019.07 閲覧).

202 EHC: ENVIRONMENTAL HEALTH CRITERIA 52

203 EPI Suite(2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11, 2012.

204 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. [http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB)

205 [bin/sis/htmlgen?HSDB](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB), (2019.07 閲覧).

206 IUCLID(2000): EU ECB. IUCLID Dataset, toluene. 2000.

207 Mackay(2006): Mackay, D., Shiu, W. Y., Ma, K. C., & Lee, S. C. Handbook of physical-chemical
208 properties and environmental fate for organic chemicals. 2nd ed., CRC press, 2006.

209 MHLW, METI, MOE(2014): 化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイ
210 ダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

211 MITI(1980) : トルエン (被験物質番号 K-549) の微生物による分解度試験. 既存化学物質点
212 検, 1980.

213 MOE(2004): 化学物質の環境リスク評価 第1巻, トルエン. 2004.

214 NIST: NIST Chemistry WebBook, <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=108-88-3>, (2019.07
215 閲覧)

216 NITE(2006): 化学物質の初期リスク評価書,トルエン. Ver. 1.0, No. 87, 2006.

217 OECD(2003): SIDS Initial Assessment Report, TOLUENE. 2003.

218

219 **2-2 その他**

220 特になし。

情報源略称	詳細等
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
ATSDR	ATSDR(米国毒性物質疾病登録局):「Toxicological Profile」
CCD	Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 16th, John Wiley & Sons
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics, 97th, CRC-Press
ECHA	Information on Chemicals – Registered substances.
EHC	WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
Howard FATE	Handbook of Environmental FATE & EXPOSURE
Howard Deg	Handbook of Environmental Degradation Rates
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUPAC	The IUPAC Solubility Data Series
Mackay	Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Second Edition
Merck	The Merck Index, 15th Ed, Merck & Co, RSC Publishing
MOE初期評価	環境省環境リスク評価室:「化学物質の環境リスク評価」
NIST	NIST Chemistry WebBook
NITE初期リスク評価書	(独)製品評価技術基盤機構:「化学物質の初期リスク評価書」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SIDS	OECD: SIDSレポート
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

分子量

収集データ

	情報源名	値	備考	文献	ページ番号等
1	Aldrich	92.14			p.2448
2	ATSDR	92.13		Fabri J, Graeser U, Simo TA. 2012. Toluene. In: Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry. Vol. 37. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag, 109-118.	p.299
3	CCD				
4	CRC	92.139			99th Physical Constants of Organic Compounds
5	EHC	92.13			2.1 Identity
6	HSDB	92.139		[Haynes, W.M. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 95th Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2014-2015, p. 3-514] **PEER REVIEWED**	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
7	IUCLID				
8	IUPAC				
9	Mackay	92.139			p.425
10	Merck	92.14			
11	MOE初期評価	92.13		化学工業日報社 (2001) 13901 の化学商品	p.1
12	NITE初期リスク評価書	92.14		U.S. NLM, U.S. National Library of Medicine (2003) HSDB, Hazardous Substances Data Bank, Bethesda, MD. (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB から引用)	p.1
13	PhysProp	92.142			
14	ECHA				
15	SIDS	92.15			p.9
16	既存点検事業	92.141			

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	融点	-93 °C	-93					-		2B	×	×			p.2448
2 ATSDR	融点	-94.991 °C	-94.991		-		-	-		2B	×	×		Fabri J, Graeser U, Simo TA. 2012. Toluene. In: Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry, Vol. 37. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag, 109-118.	p.299
3 CCD	凝固点	-94.5 °C	-94.5					-		2B	×	×			
4 CRC	融点	-95.0 °C[-95.0(2)]	-95					-		2B	×	×			99th Physical Constants of Organic Compounds
5	融点	-95.0 °C	-95					-		2B	×	×			99th Laboratory Solvents and Other Liquid Reagents
6	凝固点	-95.0 °C	-95					-		2B	×	×			99th Cryoscopic Constants for Calculation of Freezing Point Depression
7	融点	-95.0 °C	-95					-		2B	×	×			99th Enthalpy of Fusion
8 EHC	融点	-95 °C	-95		-	-	-	-		2B	×	×		WEAST, R.C. (1977) CRC handbook of chemistry and physics, 58th ed., Cleveland, Ohio, Chemical Rubber Co..	2.2 Physical and chemical properties Table 1
9 EPI Suite	融点	-59.17 °C	-59.17	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
10 HSDB	融点	-94.9 °C	-94.9					-		2B	×	×		[Haynes, W.M. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 95th Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2014-2015, p. 3-514] **PEER REVIEWED**	Melting Point:
11 IUCLID	融点	-95 °C	-95	その他, Method not known	no data					4A	×	×			p.44
12	融点	-95 °C	-95	その他, nicht bekannt	no data					4A	×	×			p.44
13	融点	-95 °C	-95			2: reliable with restrictions				4A	×	×			p.44
14	融点	-95.1 ~ -95 °C	-95.05							4A	×	×			p.44
15	融点	-95 °C	-95	no data	no data					4A	×	×			p.44
16 Mackay	融点	-94.95 °C	-94.95					-		2B	×	×		Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th CRC Press, Boca Raton, FL.	p.425

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
17 Merck	融点	-95 °C	-95					-		2B	×	×			
18 MOE初期評 価	融点	-95 °C	-95					-		2B	×	×		The Merck Index, 11th Ed. (1989) Merck & Co. Inc.	p.1
19 NITE初期リ スク評価書	融点	-95 °C	-95					-		2B	×	×		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.	p.2
20 PhysProp	融点	-94.9 °C	-94.9					-		2B	×	×			
21 ECHA	融点	-95 °C	-95	その他, data not reported	その 他, not specified	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		[Reference Type]:review article or handbook, [Title]:The Merck Index. An encyclopedia of chemicals, drugs and biologicals. Fourteenth Edition., [Author]:O'Neil MJ (Ed.), [Year]:2006, [Bibliographic source]:Merck & Co, Inc. Whitehouse Station, NJ, USA	001 Key Experimental result
22 SIDS	融点	-95 °C	-95				key study	-		2A	○	○		Merck Index (1989). 11th Ed. Merck Co Inc, Rahway New Jersey.	p.9
23 既存点検事 業	融点	-94.991 °C	-94.991					-		4A	×	×			

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	110~111 °C	110.5	110.5	760 mmHg					-		2B	×	×			p.2448
2 ATSDR	110.625 °C	110.625				-	-	-	-		4A	×	×		Fabri J, Graeser U, Simo TA. 2012. Toluene. In: Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry. Vol. 37. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag, 109-118.	p.299
3 CCD	110.7 °C	110.7	110.7	760 mmHg					-		2B	×	×			
4 CRC	110.60 °C	110.6	110.6	760 mmHg[Normal boiling pointの為760 mmHgとした。]					-		2B	×	×			99th Laboratory Solvents and Other Liquid Reagents
5	383.75 K[383.75(7)]	110.6	110.6	101.325 kPa[101.325 kPa (1 atmosphere)]					-		2B	×	×		Christou, G., Ph.D. Dissertation, Univ. Melbourne, 1988. Ambrose, D., and Grant, D. G., Trans. Faraday Soc. 53, 771, 1957. Altschul, M., Z. Phys. Chem., Stoechiom. Verwandtschaftsl. 11, 577, 1893. Teja, A. S., and Rosenthal, D. J., AIChE Symp. Ser. 86 (279), 133, 1990. Wilson, L. C., Wilding, W. V., Wilson, H. L., and Wilson, G. M., J. Chem. Eng. Data 40, 765, 1995. Nikitin, E. D., Popov, A. P., Bogatishcheva, N. S., and Yatluk, Y. G., J. Chem. Eng. Data 47, 1012, 2002. VonNiederhausen, D. M., Wilson, G. M., and Giles, N. F. J. Chem. Eng. Data 45, 157, 2000. Steele, W. V., Chirico, R. D., Knipmeyer, S. E., and Smith, N. K., Report, NIPPR-360, NTIS Order No. DE89000709, Dec. 1988. Abdulagatov, I. M., Polikhronidi, N. G., Bruno, T. J., Batyrova, R. G., and Stepanov, G. V., Fluid Phase Equilib. 263, 71, 2008. Polikhronidi, N. G., Abdulagatov, I. M., Magee, J. W., and Batyrova, R. G., J. Chem. Eng. Data 46, 1064, 2001. Goodwin, R. D., J. Phys. Chem. Ref. Data 18, 1565, 1989. Chirico, R. D., and Steele, W. V., Ind. Eng. Chem. Res. 33, 157, 1994. Akhundov, T. S., and Abdullaev, F. G., Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Neft Gaz 12, 44, 1969. Krase, N. W., and Goodman, J. B., Ind. Eng. Chem. 22, 13, 1930. Ambrose, D., f Chem. Thermodyn. 19, 1007, 1987. Powell, R. J., Swinton, F. L., and Young, C. L., J. Chem. Thermodyn. 2, 105, 1970. Kay, W. B., and Hissong, D. W., Proc. - Am. Pet. Inst., Div. Refin. 47, 653, 1967. Ambrose, D., Broderick, B. E., and Townsend, R., J. Chem. Soc. A 633, 1967. Partington, E. J., Rowlinson, J. S., and Weston, J. F., Trans. Faraday Soc. 56, 479, 1960. Ambrose, D., Cox, J. D., and Townsend, R., Trans. Faraday Soc. 56, 1452, 1960. Simon, M., Bull. Soc. Chim. Belg. 66, 375, 1957.	99th Critical Constants of Organic Compounds

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
6	110.60 °C	110.6	110.6	101.325 kPa[101.3 25 kPa (760					-		2B	×	×		Majer, V., and Svoboda, V., Enthalpies of Vaporization of Organic Compounds, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1985.	99th Enthalpy of Vaporization
7	110.60 °C	110.6	110.6	101.325 kPa					-		2B	×	×		Lemmon, E.W., Huber, M.L., and McLinden, M.O., NIST Standard Reference Database 23: Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties-REFPROP, Version 9.1, National Institute of Standards and Technology, Standard Reference Data Program, Gaithersburg, MD, 2013.	99th Dependence of Boiling Point on Pressure
8	110.60 °C	110.6	110.6	101.325 kPa					-		2B	×	×			99th Flammability of Chemical Substances
9	110.60 °C[110.60(7)]	110.6	110.6	101.325 kPa[760m mHg (101.325 kPa)]					-		2B	×	×			99th Physical Constants of Organic Compounds
10	110.60 °C	110.6							-		4A	×	×			99th Ebullioscopic Constants for Calculation of Boiling Point Elevation
11	EHC 110.6 °C	110.6	110.6	760 mmHg		-	-	-	-		2B	×	×		WEAST, R.C. (1977) CRC handbook of chemistry and physics, 58th ed., Cleveland, Ohio, Chemical Rubber Co..	2.2 Physical and chemical properties Table 1
12	EPI Suite 125.72 °C	125.72			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
13	HSDB 110.6 °C	110.6							-		4A	×	×		Lide, D.R. (ed.), CRC Handbook of Chemistry and Physics. 79th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 1998-1999., p. 3-55	Boiling Point:
14	IUCLID -110.6 °C	-110.6	-110.5963	1013 hPa	その他,nicht bekannt	no data					4A	×	×			p.44
15	110 °C	110	110.4569	1000 hPa	no data	no data					4A	×	×			p.44
16	110.4~110.8 °C	110.6	110.6086	1013 hPa	その他,Method not known	no data					4A	×	×			p.45
17	110.6 °C	110.6					2: reliable with restrictions				4A	×	×			p.45
18	110.4~111 °C	110.7	110.7059	1013.08 hPa	その他	no data					4A	×	×			p.45

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
19 Mackay	110.63 °C	110.63							-		4A	×	×		Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th CRC Press, Boca Raton, FL.	p.425
20 Merck	110.6 °C	110.6							-		4A	×	×			
21 MOE初期評 価	110.6 °C	110.6							-		4A	×	×		The Merck Index, 11th Ed. (1989) Merck & Co. Inc.	p.1
22 NITE初期リ スク評価書	110.6 °C	110.6	110.6086	1.013E+5 Pa					-		2B	×	×		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ..	p.2
23 PhysProp	110.6 °C	110.6							-		4A	×	×			
24 ECHA	110.6 °C	110.6	110.6086	1013 hPa	その他,data not reported	その 他,not specife d	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		[Reference Type]:review article or handbook, [Title]:The Merck Index. An encyclopedia of chemicals, drugs and biologicals. Fourteenth Edition., [Author]:O'Neil MJ (Ed.), [Year]:2006, [Bibliographic source]:Merck & Co, Inc. Whitehouse Station, NJ, USA	001 Key Experimental result
25 SIDS	110.6 °C	110.6	110.6086	1013 hPa				key study	-		2A	○	○		Merck Index (1989). 11th Ed. Merck Co Inc, Rahway New Jersey.	p.9
26 既存点検事 業	110.626 °C	110.626							-		4A	×	×			

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA_IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	26 mmHg	3466.382	2457.327	25 °C					-		2B	×	×			p.2448
2	22 mmHg	2933.092	2933.092	20 °C					-		2B	×	×			p.2448
3 ATSDR	28.4 mmHg	3786.355	2684.157	25 °C					-		2B	×	×	HSDB. 2010. Toluene. Hazardous Substances Data Bank, National Library of Medicine. http://toxnet.nlm.nih.gov . April 24, 2014.		p.299
4 CRC	3.79 kPa	3790	2686.741	25 °C					-		2B	×	×			99th Flammability of Chemical Substances
5	3.79 kPa	3790	2686.741	25 °C					-		2B	×	×			99th Laboratory Solvents and Other Liquid Reagents
6 EHC	28.7 mmHg	3826.352	2712.511	25 °C					-		2B	×	×	WEAST, R.C. (1977) CRC handbook of chemistry and physics, 58th ed., Cleveland, Ohio, Chemical Rubber Co..		2.2 Physical and chemical properties Table 1
7 EPI Suite	3150 Pa[2B以上の値を用いて推定(2C)1]	3150	2233.043	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
8 HSDB	28.4 mmHg	3786.355	2684.157	25 °C					-		2B	×	×	[Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989.] **PEER REVIEWED**		Vapor Pressure:
9 IUCLID	30 hPa	3000	3000	20 °C			2: reliable with restrictions				4A	×	×			p.46
10	30 hPa	3000	3000	20 °C	その他, Method not known	no data			experimental result		4A	×	×			p.46
11	120 hPa	12000	1786.716	50 °C			2: reliable with restrictions				4A	×	×			p.46
12	29.3 hPa	2930	2930	20 °C			1: reliable without restriction				4A	×	×			p.46
13	28.9 hPa	2890	2890	20 °C	その他	no data			estimated by calculation		4C	×	×			p.46
14	29.3 hPa	2930	2930	20 °C		no data					4A	×	×			p.46
15	0.8 atm	81060	57463.65	25 °C							4A	×	×			p.46

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA_IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ)	キースタディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
16 Mackay	2666 Pa	2666	2983.698	18.4 °C(summary of literature data, temp					-		2B	×	×		Stull, D.R. (1947) Vapor pressure of pure substances. Organic compounds. Ind. Eng. Chem. 39, 517-540.	p.425
17	48898 Pa	48898	1083.534	86.85 °C					-		4A	×	×		Ambrose, D., Counsell, J.F., Davenport, A.J. (1970) The use of Chebyshev polynomials for the representation of vapour pressures between the triple point and the critical point. J. Chem. Thermodyn. 2, 283-294.	p.425
18	3786 Pa	3786	2683.905	25 °C					-		2B	×	×		Daubert, T.E., Danner, R.P. (1985) Data Compilation Tables of Properties of Pure Compounds. Am. Institute of Chem. Engineers. pp. 450.	p.425
19	3560 Pa	3560	2523.693	25 °C	その他, gas saturation-GC				experimental result		2B	×	×		Politzki, G.R., Bieniek, D., Lahaniatis, E.S., Sheunert, I., Klein, W., Korte, F. (1982) Determination of vapour pressures of nine organic chemicals on silicagel. Chemosphere 11, 1217-1229. Chao, J., Lin, C.T., Chung, T.H. (1983) Vapor pressure of coal chemicals. J. Phys. Chem. Ref. Data 12, 1033-1063. Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1984) The Vapour Pressures of Pure Substances (revised second edition), Elsevier, Amsterdam.	p.425
20	2904 Pa	2904	2906.033	19.99 °C	その他, differential capacitance gauge, measured range 0-49.26°C				experimental result		2B	×	×		Munday, E.B., Mullins, J.C., Edie, D.D. (1980) Vapor pressure for toluene, 1-pentanol, 1-butanol, water, and 1-propanol and for the water and 1-propanol system from 273.15 to 323.15 K. J. Chem. Eng. Data 25, 191-194.	p.425

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA_IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ)	キースタディ該非 (評価Ⅰ)	キースタディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
21	3792 Pa	3792	2688.159	25 °C	その他,interpolated, Antoine eq				内挿 (補間)		4C	×	×		Zwolinski, B.J., Wilhoit, R.C. (1971) Handbook of Vapor Pressures and Heats of Vaporization of Hydrocarbons and Related Compounds. API-44 TRC Publication No. 101, Texas A & M University, Evans Press, Fort Worth, TX. Weast, R.C., Ed. (1972-73) Handbook of Chemistry and Physics, 53rd ed. CRC Press, Cleveland.	p.425
22	3790 Pa	3790	2686.741	25 °C	その他,interpolated-Antoine eq				内挿 (補間)		4C	×	×		Dean, J.D., Ed. (1985) Lange's Handbook of Chemistry. 13th ed. McGraw-Hill, New York. Dean, J.D., Ed. (1992) Lange's Handbook of Chemistry. 14th ed. McGraw-Hill, New York.	p.425
23	256200 Pa	256200	522.0251	146.85 °C	その他,ebulliometry, measured range 146.85-306.85°C				experimental result		4A	×	×		Ambrose, D., Broderick, B.E., Townsend, R. (1967) The vapour pressures above the normal boiling point and the critical pressures of some aromatic hydrocarbons. J. Chem. Soc. A, 633-641.	p.425
24	1333 Pa	1333	3623.352	6.375 °C					-		4A	×	×		Bond, D.L., Thodos, G. (1960) Vapor pressures of alkyl aromatic hydrocarbons. J. Chem. Eng. Data 5, 289-292.	p.425
25	6386 Pa	6386	2278.74	35.504 °C	その他,ebulliometry, measured range 35.504-111.545°C				experimental result		4A	×	×		Forziati, A.F., Norris, W.R., Rossini, F.D. (1949) Vapor pressures and boiling points of sixty API-NBS hydrocarbons. J. Res. Natl. Bur. Std. 43, 555-563.	p.425
26	3090 Pa	3090	2885.846	20.98 °C	その他,static method, measured range 199.22-402.21 K				experimental result		2B	×	×		Mokbel, I., Rauzy, E., Meille, J.P., Jose, J. (1998) Low vapor pressures of 12 aromatic hydrocarbons. Experimental and calculated data using a group contribution method. Fluid Phase Equil. 147, 271-284.	p.425
27	6357 Pa	6357	2288.248	35.366 °C	その他,ebulliometry, measured range 35.366-111.509°C				experimental result		4A	×	×		Willingham, C.B., Taylor, W.J., Pignocco, J.M., Rossini, F.D. (1945) Vapor pressure and boiling points of some paraffin, alkylcyclopentane, alkylcyclohexane, and alkylbenzene hydrocarbons. J. Res. Natl. Bur. Std. 34, 219-244.	p.425

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ)	キースタディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
28	3786 Pa	3786	2683.905	25 °C	その他,Hg manometer measurements				experimental result		2B	×	×		Pitzer, K.S., Scott, D.W. (1943) The thermodynamics and molecular structure of benzene and its methyl derivatives. J. Am. Soc. Chem. 65, 803-829.	p.425
29	920 Pa	920	4131.822	0 °C	その他,mercury manometer, measured range -9.70 to				experimental result		4A	×	×		Linder, E.G. (1931) Vapor pressures of some hydrocarbons. J. Phys. Chem. 35, 531-535..	p.425
30	3792 Pa	3792	2688.159	25 °C					estimated by calculation	calculated from det. Data	4C	×	×		Dreisbach, R.R. (1955) Physical Properties of Chemical Compounds. Adv. Chem. Ser. 15, 134.	p.425
31	3790 Pa	3790	2686.741	25 °C	その他,headspace-GC				experimental result		2B	×	×		Hussam, A., Carr, P.W. (1985) A study of a rapid and precise methodology for the measurement of vapor liquid equilibria by headspace gas chromatography. Anal. Chem. 57, 793-801. Riddick, J.A., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents. Physical Properties and Methods of Purification. Fourth edition. Wiley Interscience, New York.	p.425
32	3800 Pa	3800	2693.83	25 °C	その他,extrapolate d-Antoine eq				外挿 (補外)		4C	×	×		Stephenson, R.M., Malanowski, S. (1987) Handbook of the Thermodynamic of Organic Compounds. Elsevier Science Publishing Co. New York, NY.	p.425
33	MOE初期評価	2.93 kPa[2.93 kPa (22 mmHg) (20 °C)]	2930	20 °C					-		2B	×	×		Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd Ed. (1983) Van Nostrand Reinhold Co..	p.1
34		5.33 kPa[5.33 kPa (40 mmHg) (31.8 °C)]	5330	31.8 °C					-		4A	×	×		Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd Ed. (1983) Van Nostrand Reinhold Co..	p.1
35	NITE初期リスク評価書	5.3 kPa	5300	2523.776	31 °C				-		4A	×	×		Verschuereen, 2001.	p.2
36		2.9 kPa	2900	2900	20 °C				-		2B	×	×		Verschuereen, 2001.	p.2
37		1.3 kPa	1300	3526.86	6.4 °C				-		4A	×	×		Verschuereen, 2001.	p.2

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA_IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
38 PhysProp	28.4 mmHg	3786.355	2684.157	25 °C					experimental result		2B	×	×		DAUBERT,TE & DANNER,RP (1985)	
39 ECHA	4130.0 Pa[0.599 PSI (4130.0Pa)]	4130	2628.918	26.6 °C[80°F (26.6°C)]	その他,data not reported	その他,not specified	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		[Reference Type]:review article or handbook, [Title]:Handbook of vapor pressures and heats of vaporisation of hydrocarbons and related compounds. , [Author]:Zwolinski, B.J. and Wilhoit, R.C. , [Year]:1971, [Bibliographic source]:API 44-TRC Publications in Science and Engineering	001 Key Experimental result
40	3088.9 Pa[0.448 PSI (3088.9Pa)]	3088.9	2860.864	21.1 °C[70°F (21.1°C)]	その他,data not reported	その他,not specified	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		[Reference Type]:review article or handbook, [Title]:Handbook of vapor pressures and heats of vaporisation of hydrocarbons and related compounds. , [Author]:Zwolinski, B.J. and Wilhoit, R.C. , [Year]:1971, [Bibliographic source]:API 44-TRC Publications in Science and Engineering	001 Key Experimental result
41 SIDS	3000 Pa	3000	3000	20 °C				key study	experimental result		2A	○	○		IUCLID (1994). IUCLID data sheet, Toluene. Deutsche SHELL Chemie, 30-Jun-1994.	p.9-10
42	3800 Pa	3800	2693.83	25 °C				key study	-		2A	○	×		Mackay D, Shiu WY, Ma KC (1992). Illustrated Handbook of Physical-chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals. Vol 1. Monoaromatic Hydrocarbons, Chlorobenzenes and PCB. Lewis Publ., 66-73.	p.9-10

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	526 mg/L	5.3E+02	491.024386	25 °C								2B	×	×		HSDB. 2010. Toluene. Hazardous Substances Data Bank, National Library of Medicine. http://toxnet.nlm.nih.gov . April 24, 2014.	p.299
2 CCD	[insoluble in water.]	単位換算不可										3	×	×			
3 CRC	0.0519 mass %	5.2E+02	484.741422	25 °C								2B	×	×		Ma, J. H. Y., Hung, H., Shiu, W.-Y., and Mackay, D., J. Chem. Eng. Data 46,619, 2001. Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C, J. Phys. Chem. Ref Data 29, 41, 2000.	99th Solubility of Organic Compounds in Pressurized Hot Water
4	1.2 g/Kg[0.12 mass %]	1.2E+03	544.133239	90 °C								4A	×	×		Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C. J. Phys. Chem. Ref Data, 29, 41, 2000.	99th Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
5	0.519 g/Kg[0.0519 mass %]	5.2E+02	484.489841	25 °C								2B	×	×		Ma, J. H. Y., Hung, H., Shiu, W.-Y., and Mackay, D., f. Chem. Eng. Data 46, 619, 2001. Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C, J. Phys. Chem. Ref Data, 29, 41, 2000.	99th Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
6	0.54 g/Kg[0.054 mass %]	5.4E+02	673.733015	5 °C								4A	×	×		Ma, J. H. Y., Hung, H., Shiu, W.-Y., and Mackay, D., f. Chem. Eng. Data 46, 619, 2001.	99th Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
7	0.96 mass %	9.7E+03	2035.03758	200 °C								4A	×	×		Miller, D. J., and Hawthorne, S. B., J. Chem. Eng. Data 45, 78, 2000.	99th Solubility of Organic Compounds in Pressurized Hot Water
8	[insoluble]	単位換算不可										3	×	×			99th Physical Constants of Organic Compounds
9	0.064 mass %	6.4E+02	437.555231	50 °C								4A	×	×		Miller, D. J., and Hawthorne, S. B., J. Chem. Eng. Data 45, 78, 2000.	99th Solubility of Organic Compounds in Pressurized Hot Water
10	0.138 mass %	1.4E+03	573.395889	100 °C								4A	×	×		Miller, D. J., and Hawthorne, S. B., J. Chem. Eng. Data 45, 78, 2000.	99th Solubility of Organic Compounds in Pressurized Hot Water
11	0.63 g/Kg[0.063 mass %]	6.3E+02	456.372824	45 °C								4A	×	×		Ma, J. H. Y., Hung, H., Shiu, W.-Y., and Mackay, D., f. Chem. Eng. Data 46, 619, 2001.	99th Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
12	0.337 mass %	3.4E+03	958.649581	150 °C								4A	×	×		Miller, D. J., and Hawthorne, S. B., J. Chem. Eng. Data 45, 78, 2000.	99th Solubility of Organic Compounds in Pressurized Hot Water
13 EHC	535 mg/L	5.4E+02	499.425944	25 °C								2B	×	×		SUTTON, C. & CALDER, J.A. (1975) Solubility of alkylbenzenes in distilled water and seawater at 25 °C. J. Chem. Eng. Data, 20: 320-322.	2.2 Physical and chemical properties Table 1

PACS_F等	46000
PACS_Name等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA_IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
14 EPI Suite	667 mg/L[2B 以上の値を 用いて推定 (2C) 1	6.7E+02	622.648794	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
15 HSDB	526 mg/L	5.3E+02	491.024386	25 °C								2B	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
16	[insoluble in water.]	単位換算不 可										3	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
17	526 mg/L	5.3E+02	491.024386	25 °C								2B	×	×		[Sanemasa I et al; Bull Chem Soc Japan 55: 1054-62 (1982)] **PEER REVIEWED**	Solubilities:
18 IUCLID	515 mg/L	5.2E+02	515	20 °C		その他,Method not known	no data					4A	×	×			p.47
19	0.05 vol%[of very low solubility]	単位換算不 可										3	×	×			p.47
20	0.50%	5.0E+03	5000	20 °C				2: reliable with restrictions				4A	×	×			p.47
21	0.55 g/L[of very low solubility]	5.5E+02	513.428541	25 °C		その 他,Literaturanga be	no data					4A	×	×			p.47
22	≤0.005 vol%	単位換算不 可		20 °C	0							3	×	×			p.47
23 IUPAC	0.0518 g(1)/100g sln	5.2E+02	519.089205	293 K						experimental result (corrected)	graphical interpolation or extrapolation	2B	×	×		Sanemasa, I.; Araki, M.; Deguchi, T.; Nagai, H., Bull. Chem. Soc. Jpn. 1982, 55, 1054-62..	Table 2. Recommended (R) and Tentative Values of the Solubility of Toluene (1) in Water (2)
24	0.0567 g(1)/100g sln	5.7E+02	568.192238	293 K								2B	×	×		Brown, R.L.; Wasik, S.P., J. Res. Natl. Bur. Stds. A. 1974, 78, 453-60..	Table 2. Recommended (R) and Tentative Values of the Solubility of Toluene (1) in Water (2)
25	0.0618 g(1)/100g sln	6.2E+02	619.299476	293 K						experimental result (corrected)	graphical interpolation or extrapolation	2B	×	×		Bohon, R.L.; Claussen, W.F., J. Am. Chem. Soc. 1951, 73, 1571-8..	Table 2. Recommended (R) and Tentative Values of the Solubility of Toluene (1) in Water (2)
26	0.0545 g(1)/100g sln	5.5E+02	546.145978	293 K								2B	×	×		Sanemasa, I.; Araki, M.; Deguchi, T.; Nagai, H., Chem. Lett. 1981, 225-8..	Table 2. Recommended (R) and Tentative Values of the Solubility of Toluene (1) in Water (2)

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
27	0.057 g(1)/100g soln	5.7E+02	571.198546	293 K								2B	×	×		Korenman, I.M.; Arefeva, R.P., Patent USSR, 553 524, 1977.04.05 C.A. 87:87654..	Table 2. Recommended (R) and Tentative Values of the Solubility of Toluene (1) in Water (2)
28	0.0606 g(1)/100g soln	6.1E+02	607.274244	293 K								2B	×	×		Pierotti, R.A.; Liabastre, A.A., U.S. Nat. Tech. Inform. Serv., PB Rep., 1972, No. 21163, 113 p..	Table 2. Recommended (R) and Tentative Values of the Solubility of Toluene (1) in Water (2)
29	Mackay 563 mg/L	5.6E+02	525.564124	25 °C		その他,shake flask-cloud point				experimental result		2B	×	×		Sada, E., Kito, S., Ito, Y. (1975) Solubility of toluene in aqueous salt solutions. J. Chem. Eng. Data 20(4), 373-375.	p.425
30	534 mg/L	5.3E+02	498.492438	25 °C		その他,shake flask- fluorescence				experimental result		2B	×	×		Schwarz, F.P. (1977) Determination of temperature dependence of solubilities of polycyclic aromatic hydrocarbons in aqueous solutions by a fluorescence method. J. Chem. Eng. Data 22, 273-277.	p.426
31	572 mg/L	5.7E+02	661.19185	10 °C		その他,shake flask-UV				experimental result		2B	×	×		Ben-Naim, A., Wiff, J. (1979) A direct measurement of intramolecular hydrophobic interactions. J. Chem. Phys. 70, 771-777.	p.426
32	554 mg/L	5.5E+02	517.162566	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×	×		Krzyzanowska, T., Szeliga, J. (1978) A method for the solubility of individual hydrocarbons determining in water. Nafta (Katowice) 34(12), 413-417. Ueda, M., Katayama, A., Kuroki, N., Uranhata, T. (1978) Effect of urea on the solubility of benzene and toluene in water. Prog. Colloid Polym. Sci. 63, 116-119.	p.426
33	587 mg/L	5.9E+02	587	20 °C		その他,shake flask-UV				experimental result		2B	×	×		Ben-Naim, A., Wiff, J. (1979) A direct measurement of intramolecular hydrophobic interactions. J. Chem. Phys. 70, 771-777.	p.426
34	660 mg/L	6.6E+02	616.114249	25 °C		その他,elution chromatograph y				experimental result		2B	×	×		Schwarz, F.P. (1980) Measurement of the solubilities of slightly soluble organic liquids in water by elution chromatography. Anal. Chem. 52, 10 -15.	p.426

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
35	732 mg/L	7.3E+02	732	20 °C		その他,exptl.- elution chromatography				experimental result		2B	×	×		Schwarz, F.P., Miller, J. (1980) Measurement of the solubilities of slightly soluble organic liquids in water by elution chromatography. Anal. Chem. 52, 2161-2164.	p.426
36	739 mg/L	7.4E+02	739	20 °C		その他,shake flask-UV				experimental result		2B	×	×		Schwarz, F.P., Miller, J. (1980) Measurement of the solubilities of slightly soluble organic liquids in water by elution chromatography. Anal. Chem. 52, 2161-2164.	p.426
37	488 mg/L	4.9E+02	455.551142	25 °C		その他,shake flask-titration				experimental result		2B	×	×		Sada, E., Kito, S., Ito, Y. (1975) Solubility of toluene in aqueous salt solutions. J. Chem. Eng. Data 20(4), 373-375.	p.425
38	507 mg/L	5.1E+02	473.287764	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×	×		Rossi, S.S., Thomas, W.H. (1981) Solubility behavior of three aromatic hydrocarbons in distilled water and natural seawater. Environ. Sci. Technol. 15, 715-716.	p.426
39	557 mg/L	5.6E+02	519.963086	25 °C		その他,vapor saturation-UV spec., measured range 15-45°C				experimental result		2B	×	×		Sanemasa, I., Araki, M., Deguchi, T., Nagai, H. (1981) Solubilities of benzene and alkylbenzenes in water. Methods for obtaining aqueous solutions saturated with vapors in equilibrium with organic liquids. Chem. Lett. 2, 255-258.	p.426
40	155 mg/L	1.6E+02	144.693498	25 °C		その他,shake flask-LSC				experimental result		2B	×	×		Banerjee, S., Yalkowsky, S.H., Valvani, S.C. (1980) Water solubility and octanol/water partition coefficient of organics. Limitations of solubility- partition coefficient correlation. Environ. Sci. Technol. 14, 1227-1229.	p.426
41	554 mg/L	5.5E+02	517.162566	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×	×		Price, L.C. (1976) Aqueous solubility of petroleum as applied to its origin and primary migration. Am. Assoc. Petrol. Geol. Bull. 60, 213-244.	p.425
42	534.8 mg/L	5.3E+02	499.239243	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×	×		Sutton, C., Calder, J.A. (1975) Solubility of alkylbenzenes in distilled water and seawater at 25°C. J. Chem Eng. Data 20, 320-322.	p.425

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
43	520 mg/L	5.2E+02	485.423348	25 °C		その他,shake flask-GC				experimenta l result		2B	×	×		Mackay, D., Shiu, W.Y. (1975) The aqueous solubility and air-water exchange characteristics of hydrocarbons under environmental conditions. In: Chemistry and Physics of Aqueous Gas Solutions. Adams, W.A., Greer, G., Desnoyers, J.E., Atkinson, G., Kell, K.B., Oldham, K.B., Walkey, J., Eds., pp. 93-110, Electrochem. Soc., Princeton, NJ.	p.425
44	627 mg/L	6.3E+02	585.308536	25 °C		その他,shake flask-UV				experimenta l result		2B	×	×		Vesala, A. (1974) Thermodynamics of transfer nonelectrolytes from light and heavy water. I. Linear free energy correlations of free energy of transfer with solubility and heat of melting of nonelectrolyte. Acta Chem. Scand. 28A(8), 839-845.	p.425
45	573 mg/L	5.7E+02	534.899189	25 °C		その他,shake flask-GC				experimenta l result		2B	×	×		Brown, R.L., Wasik, S.P. (1974) A method of measuring the solubilities of hydrocarbons in aqueous solutions. J. Res. Nat. Bur. Std. 78A, 453-460.	p.425
46	517 mg/L	5.2E+02	482.622828	25 °C		その他,shake flask-GC				experimenta l result		2B	×	×		Mackay, D., Wolkoff, A.W. (1973) Rate of evaporation of low-solubility contaminants from water bodies to atmosphere. Environ. Sci. Technol. 7, 611-614.	p.425
47	573 mg/L	5.7E+02	534.899189	25 °C		その他,shake flask-GC				experimenta l result		2B	×	×		Polak, J., Lu, B.C.Y. (1973) Mutual solubilities of hydrocarbons and water at 0° and 25°C. Can. J. Chem. 51, 4018-4023.	p.425
48	530 mg/L	5.3E+02	494.758412	25 °C		その他,shake flask-GC, measured range 5-45°C				experimenta l result		2B	×	×		Pierotti, R.A., Liabastre, A.A. (1972) Structure and properties of water solutions. (U.S. Nat. Tech. Inform. Serv. PN Rep. 1972, No. 21163, 113pp.	p.425
49	479 mg/L	4.8E+02	472.364993	21 °C		その他,shake flask-GC				experimenta l result		2B	×	×		Chey, W., Calder, G.V. (1972) Method for determining solubility of slightly soluble organic compounds. J. Chem. Eng. Data 17(2), 199-200.	p.425
50	515 mg/L	5.2E+02	480.755815	25 °C		その他,shake flask-GC				experimenta l result		2B	×	×		McAuliffe, C. (1966) Solubility in water of paraffin, cycloparaffin, olefin, acetylene, cycloolefin and aromatic hydrocarbons. J. Phys. Chem. 76, 1267-1275..	p.425

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価 I)	キースタ ディ-該非 (評価 I)	キースタ ディ-該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
51	538 mg/L	5.4E+02	502.226463	25 °C		その他,shake flask-GC				experimenta l result		2B	×	×		McAuliffe, C. (1963) Solubility in water of C1 - C9 hydrocarbons. Nature (London) 200, 1092-1093.	p.425
52	526 mg/L	5.3E+02	491.024386	25 °C		その他,vapor saturation-UV spec., measured range 15-45°C				experimenta l result		2B	×	×		Sanemasa, I., Araki, M., Deguchi, T., Nagai, H. (1982) Solubility measurement of benzene and the alkylbenzenes in water by making the use of solute vapor. Bull. Chem. Soc. Jpn. 53, 1054-1062.	p.426
53	547 mg/L	5.5E+02	510.628021	25 °C		その他,shake flask-UV, measured 25- 55°C				experimenta l result		2B	×	×		Bradley, R.S., Dew, M.J., Munro, D.C. (1973) Solubility of benzene and toluene in water and aqueous salt solutions under pressure. High Temp. High Press. 5, 169-176.	p.425
54	556 mg/L	5.6E+02	519.029579	25 °C		その他,vapor absorption technique- HPLC/UV, measured range 0.5-55°C				experimenta l result		2B	×	×		Dohányosová, P., Fenclová, D., Vrbka, P., Dohnal, V. (2001) Measurement of aqueous solubility of hydrophobic volatile organic compounds by solute vapor absorption technique: toluene, ethylbenzene, propylbenzene, and butylbenzene at temperatures from 273 K to 328 K. J. Chem. Eng. Data 46, 1533-1539.	p.426
55	595 mg/L	6.0E+02	555.43633	25 °C						-		2B	×	×		Deno, N.C., Berkheimer, H.E. (1960) Phase equilibria molecular transport thermodynamics: activity coefficients as a function of structure and media. J. Chem. Eng. Data 5, 1-5.	p.425
56	470 mg/L	4.7E+02	497.448471	16 °C		その他,shake flask				experimenta l result		2B	×	×		Fuhner, H. (1924) Die Wasserlöslichkeit in homologen Reihen. Chem. Ber. 57, 510-515.	p.425
57	347 mg/L	3.5E+02	323.926734	25 °C		その他,residue- volume method				experimenta l result		2B	×	×		Booth, H.S., Everson, H.E. (1948) Hydrotropic solubilities: solubilities in 40 per cent sodium xylenesulfonate. Ind. Eng. Chem. 40(8), 1491-1493.	p.425
58	530 mg/L	5.3E+02	494.758412	25 °C		その他,shake flask-UV				experimenta l result		2B	×	×		Andrews L.J., Keefer, R.M. (1949) Cation complexes of compounds containing carbon-carbon double bonds. IV. The argentation of aromatic hydrocarbons. J. Am. Chem. Soc. 71, 3644-3647.	p.425

PACS_F等	46000
PACS_Name等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA_IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
59	500 mg/L	5.0E+02	466.753219	25 °C		その他,flask flask-UV				experimenta l result		2B	x	x		Klevens, H.B. (1950) Solubilization of polycyclic hydrocarbons. J. Phys. Colloid Chem. 54, 283-298.	p.425
60	627 mg/L	6.3E+02	585.308536	25 °C		その他,shake flask-UV, measured range 0.4-45.3° C				experimenta l result		2B	x	x		Bohon, R.L., Clausen, W.F. (1951) The solubility of aromatic hydrocarbons in water. J. Am. Chem. Soc. 72, 1571-1576.	p.425
61	546 mg/L	5.5E+02	509.694515	25 °C		その他,shake flask-UV				experimenta l result		2B	x	x		Morrison, T.J., Billett, F. (1952) The salting out of non-electrolytes. Part II. The effect of variation in non-electrolyte. J. Chem. Soc. 3819-3822..	p.425
62	570 mg/L	5.7E+02	497.846238	30 °C		その他,shake flask- interferometer				experimenta l result		2B	x	x		Gross, P.M., Saylor, J.H. (1931) The solubilities of certain slightly soluble organic compounds in water. J. Am. Chem. Soc. 53, 1744-1751.	p.425
63	558 mg/L	5.6E+02	520.896592	25 °C		その他,shake flask-UV, measured range 0-50°C				experimenta l result		2B	x	x		Sawamura, S., Nagaoka, K., Machikawa, T. (2001) Effects of pressure and temperature on the solubility of alkylbenzenes in water: Volumetric property of hydrophobic hydration. J. Phys. Chem. B, 105, 2429-2436.	p.426
64	585 mg/L	5.9E+02	546.101266	25 °C		その 他,generator column- HPLC/UV				experimenta l result		2B	x	x		Tewari, Y.B., Miller, M.M., Wasik, S.P. (1982b) Calculation of aqueous solubilities of organic compounds. NBS J. Res. 87, 155-158.	p.426
65	519 mg/L	5.2E+02	484.489841	25 °C		その他,shake flask-GC/FID, measured range 5-45°C				experimenta l result		2B	x	x		Ma, J.H.Y., Hung, H., Shiu, W.Y., Mackay, D. (2001) Temperature dependence of the aqueous solubility of selected chlorobenzenes and chlorotoluenes. J. Chem. Eng. Data 46, 619-622.	p.426
66	562.9 mg/L	5.6E+02	525.470774	25 °C		その他,shake flask-UV spectrophotome try				experimenta l result		2B	x	x		Poulson, S.R., Harrington, R.R., Drever, J.I. (1999) The solubility of toluene in aqueous salt solutions. Talanta 48, 533-641.	p.426

PACS_F等	46000
PACS_Name等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA_IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
67	599 mg/L	6.0E+02	523.175257	30 °C		その他, equilibrium flow cell-GC; measured range 30-100° C				experimental result		2B	×	×		Chen, H., Wagner, J. (1994b) An efficient and reliable gas chromatographic method for measuring liquid-liquid mutual solubilities in alkylbenzene + water mixtures: Toluene + water from 303 to 373 K. J. Chem. Eng. Data 39, 474-479.	p.426
68	530 mg/L [IUPAC recommended value, temp range 5-55°C]	5.3E+02	494.758412	25 °C						-		2B	×	×		Shaw, D.G., Ed. (1989a) IUPAC Solubility Data Series Vol. 37: Hydrocarbons (C5-C7) with Water and Seawater. Pergamon Press, Oxford, England.	p.426
69	538 mg/L	5.4E+02	502.226463	25 °C		その他, shake flask-GC				experimental result		2B	×	×		Coutant, R.W., Keigley, G.W. (1988) An alternative method for gas chromatographic determination of volatile organic compounds in water. Anal. Chem. 60, 2436-2537.	p.426
70	580 mg/L	5.8E+02	541.433734	25 °C		その他, shake flask-GC				experimental result		2B	×	×		Keeley, D.F., Hoffpauir, M.A., Meriweather, J.R. (1988) Solubility of aromatic hydrocarbons in water and sodium chloride solutions of different ionic strengths: Benzene and Toluene. J. Chem. Eng. Data 33, 87-89.	p.426
71	520 mg/L	5.2E+02	485.423348	25 °C		その他, shake flask-radiometry				experimental result		2B	×	×		Lo, J.M., Tseng, C.L., Yang, J.Y. (1986) Radiometric method for determining solubility of organic solvents in water. Anal. Chem. 58, 1896-1897.	p.426
72	521 mg/L	5.2E+02	486.356854	25 °C		その他, vapor saturation-UV spec.				experimental result		2B	×	×		Sanemasa, I., Arakawa, S., Araki, M., Deguchi, T. (1984) The effects of salts on the solubility of benzene, toluene, ethylbenzene and propylbenzene in water. Bull. Chem. Soc. Jpn. 57, 1359-1544. Heidman, J.L., Tsionopoulos, C., Brady, C.J., Wilson, G.M. (1985) High-temperature mutual solubilities of hydrocarbons and water. AIChE J. 31, 376-384.	p.426
73	524 mg/L	5.2E+02	489.157373	25 °C		その他, shake flask-HPLC/UV				experimental result		2B	×	×		Banerjee, S. (1984) Solubility of organic mixture in water. Environ. Sci. Technol. 18, 587-591.	p.426

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
74	580 mg/L	5.8E+02	541.433734	25 °C		その他.generator column- HPLC/UV				experimental result		2B	×	×		Wasik, S.P., Miller, M.M., Tewari, Y.B., May, W.E., Sonnefeld, W.J., DeVoe, H., Zoller, W.H. (1983) Determination of the vapor pressure, aqueous solubility, and octanol/water partition coefficient of hydrophobic substances by coupled generator column/ liquid chromatographic methods. Res. Rev. 85, 29-42.	p.426
75	578 mg/L	5.8E+02	539.566721	25 °C		その他.generator column- HPLC/UV				experimental result		2B	×	×		Tewari, Y.B., Miller, M.M., Wasik, S.P., Martire, D.E. (1982c) Aqueous solubility and octanol/water partition coefficient of organic compounds at 25.0°C. J. Chem. Eng. Data 27, 451- 454.	p.426
76	550 mg/L	5.5E+02	513.428541	25 °C						-		2B	×	×		Dreisbach, R.R. (1955) Physical Properties of Chemical Compounds. Adv. Chem. Ser. 15, 134.	p.425
77	Merck [Very slightly sol in water]	単位換算不 可								-		3	×	×		F. P. Schwarz, Anal. Chem. 52, 10 (1980).	
78	0.067 wt%	6.7E+02	638.766644	23.5 °C						-		2B	×	×		F. P. Schwarz, Anal. Chem. 52, 10 (1980).	
79	MOE初期評 価	470 mg/L	4.7E+02	497.448471	16 °C					-		2B	×	×		Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd Ed. (1983) Van Nostrand Reinhold Co..	p.1
80		515 mg/L	5.2E+02	515	20 °C					-		2B	×	×		Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd Ed. (1983) Van Nostrand Reinhold Co..	p.1
81		0.067 wt%[0.067 % (w/w)]	6.7E+02	638.766644	23.5 °C					-		2B	×	×		The Merck Index, 11th Ed. (1989) Merck & Co. Inc.. Richardson, M. L. et al. (1993) The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry.	p.1
82	NITE初期リ スク評価書	526 mg/L	5.3E+02	491.024386	25 °C					-		2B	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY. (http://esc.syrres.com./interkow/physd emo.htm から引用).	p.2
83	PhysProp	526 mg/L	5.3E+02	491.024386	25 °C					experimental result		2B	×	×		SANEMASA, I ET AL. (1982)	

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
84 ECHA	579 mg/L	5.8E+02	540.500227	25 °C	7[pH are assumed]	その他,data not reported	その他,not specified	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		[Reference Type]:review article or handbook, [Title]:Handbook of aqueous solubility data, [Author]:Yalkowsky, S.H and He, Y. , [Year]:2003, [Bibliographic source]:CRC Press, Boca Raton	001 Key Experimental result
85	587 mg/L	5.9E+02	547.968279	25 °C	7[pH are assumed]	その他,data not reported	その他,not specified	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		[Reference Type]:review article or handbook, [Title]:Handbook of aqueous solubility data, [Author]:Yalkowsky, S.H and He, Y. , [Year]:2003, [Bibliographic source]:CRC Press, Boca Raton	001 Key Experimental result
86	580 mg/L	5.8E+02	541.433734	25 °C	7[pH are assumed]	その他,data not reported	その他,not specified	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		[Reference Type]:review article or handbook, [Title]:Handbook of aqueous solubility data, [Author]:Yalkowsky, S.H and He, Y. , [Year]:2003, [Bibliographic source]:CRC Press, Boca Raton	001 Key Experimental result
87	573 mg/L	5.7E+02	534.899189	25 °C	7[pH are assumed]	その他,data not reported	その他,not specified	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		[Reference Type]:review article or handbook, [Title]:Handbook of aqueous solubility data, [Author]:Yalkowsky, S.H and He, Y. , [Year]:2003, [Bibliographic source]:CRC Press, Boca Raton	001 Key Experimental result
88 SIDS	534.8 mg/L	5.3E+02	499.239243	25 °C					key study	experimental result		2A	○	×		Hansch C, Leo A (1979). Substitute Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. John Wiley and Sons, New York.	p.9-10
89 SIDS	515 mg/L	5.2E+02	515	20 °C					key study	experimental result		2A	○	○		IUCLID (1994). IUCLID data sheet, Toluene. Deutsche SHELL Chemie, 30-Jun-1994.	p.9-10
90 既存点検事業	100 ppm[100ppmまで溶解性を確認]	1.0E+02										4A	×	×			

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	2.73	2.73				-	-	-	-		2B	×	×		HSDB, 2010. Toluene. Hazardous Substances Data Bank, National Library of Medicine. http://toxnet.nlm.nih.gov . April 24, 2014.	p.299
2 CRC	2.73	2.73							-		2B	×	×		Sangster, J., J. Phys. Chem. Ref. Data, 18, 1111, 1989.	99th Octanol-Water Partition Coefficients
3 EHC	2.69	2.69				-	-	-	-		2B	×	×		TUTE, M.S. (1971) Principles and practice of Hansch analysis a guide to structure-activity correlations for the medical chemist. Adv. Drug Res., 5: 1-77..	2.2 Physical and chemical properties Table 1
4 EPI Suite	2.54	2.54			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
5 HSDB	2.73	2.73							-		2B	×	×		[Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995., p. 31] **PEER REVIEWED**	Octanol/Water Partition Coefficient:
6 IUCLID	2.66	2.66			その他, Mittelwert aus vier Literarurangaben	no data			estimated by calculation		4C	×	×			p.47
7	2.69	2.69	20 °C		その他	no data			estimated by calculation		4C	×	×			p.47
8	2.7	2.7					2: reliable with restrictions				4A	×	×			p.47
9	5	5				no data					4A	×	×			p.47
10	2.65	2.65			その他, Method not known	no data			experimental result		4A	×	×			p.46
11 Mackay	2.73[recommended]	2.73	25 °C						-		2B	×	×		Sangster, J. (1989) Octanol-water partition coefficients of simple organic compounds. J. Phys. Chem. Ref. Data 18, 1111-1230. Sangster, J. (1993) LOGKOW databank. Sangster Research Laboratory, Montreal, Q.C.	p.429
12	2.88[mean]	2.88	25 °C		その他, HPLC method				experimental result		2B	×	×		Eadsforth, C.V., Moser, P. (1983) Assessments of reversed phase chromatographic methods for determining partition coefficients. Chemosphere 12, 1459-1475.	p.428

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA_IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
13	2.73[recom mended]	2.73	25 °C						-		2B	×	×		Hansch, C., Leo, A.J., Hoekman, D. (1995) Exploring QSAR, Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. ACS Professional Reference Book, American Chemical Society, Washington, DC.	p.429
14	2.786± 0.005	2.786	25 °C		その他,interlabora tory studies				experimental result		2B	×	×		Brooke et al. 1990	p.429
15	2.63±0.05	2.63	25 °C		その他,shake flask/slow stirring				experimental result		2B	×	×		Brooke et al. 1990	p.429
16	2.786	2.786	25 °C		その他,shake flask/slow stirring-GC				experimental result		2B	×	×		De Bruijn, J., Busser, F., Seinen, W., Hermens, J. (1989) Determination of octanol/water partition coefficient for hydrophobic organic chemicals with the "slow-stirring" method. Environ. Toxicol. Chem. 8, 499-512.	p.429
17	2.69	2.69	25 °C		その他,RP- HPLC capacity factor correlations				experimental result		2B	×	×		Sherblom, P.M., Eganhouse, R.P. (1988) Correlations between octanol-water partition coefficients and reversed-phase highperformance liquid chromatography capacity factors. J. Chromogr. 454, 37-50.	p.429
18	2.66	2.66	25 °C		その他,RP- HPLC capacity factor correlations				experimental result		2B	×	×		Sherblom, P.M., Eganhouse, R.P. (1988) Correlations between octanol-water partition coefficients and reversed-phase highperformance liquid chromatography capacity factors. J. Chromogr. 454, 37-50.	p.429
19	2.76	2.76	25 °C		その他,normal phase HPLC- k' correlation				experimental result		2B	×	×		Govers, H.A.J., Evers, E.H.G. (1992) Prediction of distribution properties by solubility parameters: description of the method and application to methylbenzenes. Chemosphere 24, 453-464.	p.429

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
20	2.62	2.62	25 °C		その他,RP- HPLC-RT correlation, ODS column with masking agent				experimental result		2B	×	×		Bechalany, A. Rothlisberger, T., El Tayar, N., Testa, B. (1989) Comparison of various non-polar stationary phases used for assessing lipophilicity. J. Chromatogr. 473, 115 -124.	p.429
21	2.65	2.65	25 °C		その他,generator column-RP- LC				experimental result		2B	×	×		Schantz, M.M., Martire, D.E. (1987) Determination of hydrocarbon-water partition coefficients from chromatographic data and based on solution thermodynamics and theory. J. Chromatogr. 391, 35-41.	p.428
22	3	3	25 °C		その他,HPLC- k' correlation				experimental result		2B	×	×		De Kock, A.C., Lord, D.A. (1987) A simple procedure for determining octanol-water partition coefficients using reversed phase high performance liquid chromatography (RPHPLC). Chemosphere 16(1), 133 -142.	p.428
23	2.78	2.78	25 °C		その他,HPLC/MS correlation				experimental result		2B	×	×		Burkhard et al. 1985	p.428
24	2.89	2.89	25 °C		その他,HPLC- RT correlation				experimental result		2B	×	×		Rapaport, R.A., Eisenreich, S. (1984) Chromatographic determination of octanol-water partition coefficients (KOW's) for 58 PCB congeners. Environ. Sci. Technol. 18, 163-170.	p.428
25	2.77±0.02	2.77	25 °C		その他,HPLC- k' correlation				experimental result		2B	×	×		Poulson, S.R., Drever, J.I., Colberg, P.J.S. (1997) Estimation of KOC values for deuterated benzene, toluene, and ethylbenzene, and application to ground water contamination studies. Chemosphere 35, 2215-2224.	p.429
26	2.1	2.1	25 °C		その他,shake flask				experimental result		2B	×	×		Platford, R.F. (1979) Glyceryl trioleate-water partition coefficients for three simple organic compounds. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 21, 68-73. Platford, R.F. (1983) The octanol-water partitioning of some hydrophobic and hydrophilic compounds. Chemosphere 12, 1107 -1111.	p.428

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
27	2.21	2.21	25 °C		その他,shake flask-LSC				experimental result		2B	×	×		Banerjee, S., Yalkowsky, S.H., Valvani, S.C. (1980) Water solubility and octanol/water partition coefficient of organics. Limitations of solubility-partition coefficient correlation. Environ. Sci. Technol. 14, 1227-1229.	p.428
28	2.51~ 3.06[range]	2.785	25 °C		その他,HPLC method				experimental result		2B	×	×		Eadsforth, C.V., Moser, P. (1983) Assessments of reversed phase chromatographic methods for determining partition coefficients. Chemosphere 12, 1459-1475.	p.428
29	2.65[mean]	2.65	25 °C		その他,shake flask method				experimental result		2B	×	×		Eadsforth, C.V., Moser, P. (1983) Assessments of reversed phase chromatographic methods for determining partition coefficients. Chemosphere 12, 1459-1475.	p.428
30	2.11~ 2.80[range]	2.455	25 °C		その他,shake flask method				experimental result		2B	×	×		Eadsforth, C.V., Moser, P. (1983) Assessments of reversed phase chromatographic methods for determining partition coefficients. Chemosphere 12, 1459-1475.	p.428
31	2.72	2.72	25 °C		その他,HPLC- RV correlation				experimental result		2B	×	×		Garst, J.E., Wilson, W.C. (1984) Accurate, wide range, automated, high performance liquid chromatographic method for the estimation of octanol/water partition coefficients. II: Effects of chromatographic method and procedure variables on accuracy and reproducibility of the method. J. Pharm. Sci. 73(11), 1616-1623.	p.428
32	2.69	2.69	25 °C						-		2B	×	×		Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, New York.	p.428
33	2.68	2.68	25 °C		その他,shake flask-HPLC				experimental result		2B	×	×		Nahum, A., Horvath, C. (1980) Evaluation of octanol-water partition coefficients by using high- performance liquid chromatography. J. Chromatogr. 192, 315-322.	p.428

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
34	2.59	2.59	25 °C		その他,HPLC- k' correlation				experimental result		2B	×	×		Hanai, T., Tran, C., Hubert, J. (1981) An approach to the prediction of retention times in liquid chromatography. J. HRC & CC 4, 454-460.	p.428
35	2.97	2.97	25 °C		その他,HPLC- k' correlation				experimental result		2B	×	×		McDuffie, B. (1981) Estimation of octanol/water partition coefficients for organic pollutants using reversed phase HPLC. Chemosphere 10, 73- 83.	p.428
36	2.78	2.78	25 °C		その他,HPLC- k' correlation				experimental result		2B	×	×		Hammers, W.E., Meurs, G.J., De Ligny, C.L. (1982) Correlations between liquid chromatographic capacity ratio data on Lichrosorb RP- 18 and partition coefficients in the octanol-water system. J. Chromatogr. 247, 1-13.	p.428
37	2.59	2.59	25 °C		その他,HPLC- k' correlation				experimental result		2B	×	×		D'Amboise, M., Hanai, T. (1982) Hydrophobicity and retention in reverse phase liquid chromatography. J. Liq. Chromatogr. 5, 229-244.	p.428
38	2.69	2.69	25 °C		その他,shake flask-UV				experimental result		2B	×	×		Fujita, T., Iwasa, Hansch, C. (1964). A new substituent constant, "pi" derived from partition coefficients. J. Am. Chem. Soc. 86, 5175-5180. Hansch, C., Quinlan, J.E., Lawrence, G.L. (1968) The linear free-energy relationship between partition coefficients and the aqueous solubility of organic liquids. J. Org. Chem. 33, 347-350. Hansch, C., Leo, A., Nickaitani, D. (1972) On the additive - constitutive character of partition coefficients. J. Org. Chem. 37, 3090-3092.	p.428
39	2.62	2.62	25 °C		その他,HPLC- k' correlation				experimental result		2B	×	×		Miyake, K., Terada, H. (1982) Determination of partition coefficients of very hydrophobic compounds by high performance liquid chromatography on glyceryl- coated controlled-pore glass. J. Chromatogr. 240, 9-20.	p.428

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA_IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
40	2.73	2.73	25 °C						-		2B	×	×		Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, New York.	p.428
41	2.32	2.32	24.8 °C		その他,EPICS- GC, measured range 2.2- 24.8°C				experimental result		2B	×	×		Dewulf, J., van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: temperature dependence in the 2- 25°C range. Water Res. 33, 2424- 2436.	p.429
42	2.11	2.11	25 °C						-		2B	×	×		Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, New York.	p.428
43	2.8	2.8	25 °C						-		2B	×	×		Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, New York.	p.428
44	2.65	2.65	25 °C		その他,generator column- HPLC/UV				experimental result		2B	×	×		Tewari, Y.B., Miller, M.M., Wasik, S.P. (1982b) Calculation of aqueous solubilities of organic compounds. NBS J. Res. 87, 155-158. Tewari, Y.B., Miller, M.M., Wasik, S.P., Martire, D.E. (1982c) Aqueous solubility and octanol/water partition coefficient of organic compounds at 25.0°C. J. Chem. Eng. Data 27, 451 -454.	p.428
45	2.74	2.74	25 °C		その他,HPLC- k' correlation				experimental result		2B	×	×		Hafkenschied, T.L., Tomlinson, E. (1983b) Correlations between alkane/water and octan-1-ol/water distribution coefficients and isocratic reversed-phase liquid chromatographic capacity factor of acids, bases and neutrals. Intl. J. Pharm. 16, 225-240.	p.428

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
46	2.65	2.65	25 °C		その他,generator column- HPLC/UV				experimental result		2B	×	×		Wasik, S.P., Miller, M.M., Tewari, Y.B., May, W.E., Sonnefeld, W.J., DeVoe, H., Zoller, W.H. (1983) Determination of the vapor pressure, aqueous solubility, and octanol/water partition coefficient of hydrophobic substances by coupled generator column/ liquid chromatographic methods. Res. Rev. 85, 29-42.	p.428
47	2.11	2.11	25 °C		その他,shake flask-UV				experimental result		2B	×	×		Rogers, K.S., Cammarata, A. (1969) Superdelocalizability and charge density. A correlation with partition coefficients. J. Med. Chem. 12, 692- 693.	p.428
48 MOE初期評 価	2.69	算出不可							experimental result		3	×	×		Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd Ed. (1983) Van Nostrand Reinhold Co..	p.1
49 NITE初期リ スク評価書	2.54	2.54							estimated by calculation		4C	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY..	p.2
50	2.73	2.73							experimental result		2B	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY..	p.2
51 PhysProp	2.73	2.73							experimental result		2B	×	×		HANSCH,C ET AL. (1995)	
52 ECHA	2.73	2.73	20 ° C[Temper ature and pH are assumed]	7[Temper ature and pH are assumed]	その他,data not reported	その他,not specified	2: reliable with restriction s	key study	experimental result		4A	×	×		[Reference Type]:review article or handbook, [Title]:Exploring QSAR: Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. , [Author]:Hansch C, Leo A and Hoekman D, [Year]:1995, [Bibliographic source]:American Chemical Society, Washington DC.	001 Key Experimental result
53 SIDS	2.65	2.65						key study	experimental result		2A	○	○		IUCLID (1994). IUCLID data sheet, Toluene. Deutsche SHELL Chemie, 30-Jun-1994.	p.9-10

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA-IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	logKoc	1.57~2.25	81.28305162										2B	×	×		HSDB, 2010. Toluene. Hazardous Substances Data Bank, National Library of Medicine. http://toxnet.nlm.nih.gov . April 24, 2014.	p.299
2 EPI Suite	Koc	199.3 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定 (2C)]	199.3				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
3 HSDB	Koc	178	178			sandy soil					-		2B	×	○		Wilson JT et al; J Environ Qual 10: 501-6 (1981)	Soil Adsorption/Mobility:
4	Koc	160	160			Grimsby silt loam					experimental result		2B	○	○		Nathwani JS, Phillips CR; Chemosphere 6: 157-62 (1977)	Soil Adsorption/Mobility:
5	Koc	160	160			Vaudreil sandy loam					experimental result		2B	○	○		Nathwani JS, Phillips CR; Chemosphere 6: 157-62 (1977)	Soil Adsorption/Mobility:
6	Koc	46	46			sandy soil					-		2B	×	○		Nathwani JS, Phillips CR; Chemosphere 6: 157-62 (1977)	Soil Adsorption/Mobility:
7	Koc	166	166			lake sediment					experimental result		2B	×	○		Kan AT et al; Environ Sci Technol 32: 892-902 (1998)	Soil Adsorption/Mobility:
8	Koc	37	37			Wendover silty loam					experimental result		2B	×	○		Nathwani JS, Phillips CR; Chemosphere 6: 157-62 (1977)	Soil Adsorption/Mobility:
9 Mackay	logKoc	1.7	50.11872336	25 °C		untreated Marlette soil A horizon	その他, batch equilibrium- adsorption isotherm				experimental result		2B	×	○		Lee, J.F., Crum, J.R., Boyd, S.A. (1989) Enhanced retention of organic contaminants by soils exchanged with organic cations. Environ. Sci. Technol. 23, 1365-1372.	p.429
10	logKoc	1.98	95.4992586	25 °C	7.4	agricultura l soil					experimental result		2B	×	○		Seip, H.M., Alstad, J., Carlberg, G.E., Martinsen, K., Skaane, P. (1986) Measurement of mobility of organic compounds in soils. Sci. Total Environ. 50, 87-101.	p.429
11	logKoc	2	100	25 °C		sediment 4.02% OC from Tamar estuary	その他, batch equilibrium- GC				experimental result		2B	×	○		Vowles, P.D., Mantoura, R.F.C. (1987) Sediment-water partition coefficients and HPLC retention factors of aromatic hydrocarbons. Chemosphere 16, 109-116.	p.429
12	logKoc	2.13	134.8962883	25 °C	4.2	forest soil					experimental result		2B	×	○		Seip, H.M., Alstad, J., Carlberg, G.E., Martinsen, K., Skaane, P. (1986) Measurement of mobility of organic compounds in soils. Sci. Total Environ. 50, 87-101.	p.429

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA-IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
13	logKoc	2.5	316.227766	25 °C		organic cations treated Marlette soil A horizon: HDTMA treated OC 6.48%	その他, batch equilibrium-adsorption isotherm				experimental result		2B	x	○		Lee, J.F., Crum, J.R., Boyd, S.A. (1989) Enhanced retention of organic contaminants by soils exchanged with organic cations. Environ. Sci. Technol. 23, 1365-1372.	p.429
14	logKoc	2.39	245.4708916	25 °C		organic cations treated Marlette soil A horizon: DDTMA treated, OC 4.37%	その他, batch equilibrium-adsorption isotherm				experimental result		2B	x	○		Lee, J.F., Crum, J.R., Boyd, S.A. (1989) Enhanced retention of organic contaminants by soils exchanged with organic cations. Environ. Sci. Technol. 23, 1365-1372.	p.429
15	logKoc	2.86	724.4359601	25 °C		organic cations treated Marlette soil B_1 horizon: HDTMA treated OC 3.72%	その他, batch equilibrium-adsorption isotherm				experimental result		2B	x	○		Lee, J.F., Crum, J.R., Boyd, S.A. (1989) Enhanced retention of organic contaminants by soils exchanged with organic cations. Environ. Sci. Technol. 23, 1365-1372.	p.429
16	logKoc	2.86	724.4359601	25 °C		organic cations treated Marlette soil B_1 horizon: DDTMA treated OC 1.98%	その他, batch equilibrium-adsorption isotherm				experimental result		2B	x	○		Lee, J.F., Crum, J.R., Boyd, S.A. (1989) Enhanced retention of organic contaminants by soils exchanged with organic cations. Environ. Sci. Technol. 23, 1365-1372.	p.429
17	logKoc	1.59	38.9045145	25 °C		untreated St Clair soil B_t horizon	その他, batch equilibrium				experimental result		2B	x	○		Lee, J.F., Crum, J.R., Boyd, S.A. (1989) Enhanced retention of organic contaminants by soils exchanged with organic cations. Environ. Sci. Technol. 23, 1365-1372.	p.429

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA-IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
18	logKoc	3.03	1071.519305	25 °C		organic cations treated soils: St. Clair soil B_t horizon OC 3.25%	その他, batch equilibrium-adsorption isotherm				experimental result		2B	×	○		Lee, J.F., Crum, J.R., Boyd, S.A. (1989) Enhanced retention of organic contaminants by soils exchanged with organic cations. Environ. Sci. Technol. 23, 1365-1372.	p.429
19	logKoc	1.74	54.95408739	25 °C	5.6	forest soil					experimental result		2B	×	○		Seip, H.M., Aistad, J., Carlberg, G.E., Marlinsen, K., Skaane, P. (1986) Measurement of mobility of organic compounds in soils. Sci. Total Environ. 50, 87-101.	p.429
20	logKoc	2.43	269.1534804	25 °C		organic cations treated Marlette soil B_t horizon; NTMA treated. OC 1.18%	その他, batch equilibrium-adsorption isotherm				experimental result		2B	×	○		Lee, J.F., Crum, J.R., Boyd, S.A. (1989) Enhanced retention of organic contaminants by soils exchanged with organic cations. Environ. Sci. Technol. 23, 1365-1372.	p.429
21	logKoc	2.18	151.3561248	25 °C		lignin	その他, headspace equilibrium				experimental result		2B	×	×		Garbarnini & Lion 1986	p.429
22	logKoc	1.89	77.62471166	25 °C		ICN HA coated Al_2O_3	その他, headspace equilibrium				experimental result		2B	×	×		Garbarnini, D.R., Lion, L.W. (1985) Evaluation of sorptive partitioning of nonionic pollutants in closed systems by headspace analysis. Environ. Sci. Technol. 19, 1122-1128.	p.429
23	logKoc	2.28	190.5460718	25 °C		Offutt AFB soil	その他, headspace equilibrium				experimental result		2B	×	○		Garbarnini, D.R., Lion, L.W. (1985) Evaluation of sorptive partitioning of nonionic pollutants in closed systems by headspace analysis. Environ. Sci. Technol. 19, 1122-1128.	p.429
24	logKoc	2.31	204.1737945	3.8 °C		natural sediment from River Leie	その他, EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×	○		Dewulf, J., van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: temperature dependence in the 2-25°C range. Water Res. 33, 2424-2436.	p.429

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA-IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
25	logKoc	1.89	77.62471166	25 °C		Whitean AFB soil	その他,headspace equilibrium				experimental result		2B	×	○		Garbarnini, D.R., Lion, L.W. (1985) Evaluation of sorptive partitioning of nonionic pollutants in closed systems by headspace analysis. Environ. Sci. Technol. 19, 1122-1128.	p.429
26	logKoc	2.9	794.3282347	25 °C		organic cations HDTMA treated soils; Oshimo soil B_t horizon OC 0.83%	その他,batch equilibrium- adsorption isotherm				experimental result		2B	×	○		Lee, J.F., Crum, J.R., Boyd, S.A. (1989) Enhanced retention of organic contaminants by soils exchanged with organic cations. Environ. Sci. Technol. 23, 1365-1372.	p.429
27	logKoc	1.91	81.28305162	25 °C		Sapsucker Woods humic acid	その他,headspace equilibrium				experimental result		2B	×	×		Garbarnini & Lion 1986	p.429
28	logKoc	1.19	15.48816619	25 °C		tannic acid	その他,headspace equilibrium				experimental result		2B	×	×		Garbarnini & Lion 1986	p.429
29	logKoc	2.54	346.7368505	25 °C		oxidized humic	その他,headspace equilibrium				experimental result		2B	×	×		Garbarnini & Lion 1986	p.429
30	logKoc	2.09	123.0268771	25 °C		zein	その他,headspace equilibrium				experimental result		2B	×	×		Garbarnini & Lion 1986	p.429
31	logKoc	-1.3	5.01E-02	25 °C		cellulose	その他,headspace equilibrium				experimental result		2B	×	×		Garbarnini & Lion 1986	p.429
32	logKoc	1.94	87.096359	25 °C		Aldrich humic acid	その他,headspace equilibrium				experimental result		2B	×	×		Garbarnini & Lion 1986	p.429
33	logKoc	2.18	151.3561248	25 °C		Sapsucker Woods S.W. soil	その他,headspace equilibrium				experimental result		2B	×	○		Garbarnini & Lion 1986	p.429
34	logKoc	2.21	162.1810097	25 °C		S.W. ethyl ether extracted soil	その他,headspace equilibrium				experimental result		2B	×	○		Garbarnini & Lion 1986	p.429
35	logKoc	2.43	269.1534804	25 °C		humic	その他,headspace equilibrium				experimental result		2B	×	×		Garbarnini & Lion 1986	p.429
36	logKoc	1.13	13.48962883	25 °C		Sapsucker Woods fulvic acid	その他,headspace equilibrium				experimental result		2B	×	×		Garbarnini & Lion 1986	p.429

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA-IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
37	logKoc	234[数字は情報源のまま。2.34の可能性]	1.00E+234	8.0 °C		natural sediment from River Leie	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	x	x		Dewulf, J., van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: temperature dependence in the 2–25°C range. Water Res. 33, 2424–2436.	p.429
38	logKoc	2.39	245.4708916	25 °C		average 5 soils and 3 sediments	その他,sorption isotherms by batch equilibrium and column experiments				experimental result		2B	x	○		Schwarzenbach, R.P., Westall, J. (1981) Transport of nonpolar compounds from surface water to groundwater. Laboratory sorption studies. Environ. Sci. Technol. 11, 1360–1367.	p.429
39	logKoc	2.27	186.2087137	25 °C		ICN humic acid	その他,headspace equilibrium				experimental result		2B	x	x		Garbarnini, D.R., Lion, L.W. (1985) Evaluation of sorptive partitioning of nonionic pollutants in closed systems by headspace analysis. Environ. Sci. Technol. 19, 1122–1128.	p.429
40	logKoc	1.79[average]	61.65950019	25 °C		soils					experimental result		2B	x	○		Delle Site, A. (2001) Factors affecting sorption of organic compounds in natural sorbent/water systems and sorption coefficients for selected pollutants. A review. J. Phys. Chem. Ref. Data 30, 187–439.	p.429
41	logKoc	2.00[average]	100	25 °C		soils					experimental result		2B	x	○		Delle Site, A. (2001) Factors affecting sorption of organic compounds in natural sorbent/water systems and sorption coefficients for selected pollutants. A review. J. Phys. Chem. Ref. Data 30, 187–439.	p.429
42	logKoc	1.89[average]	77.62471166	25 °C		soils					experimental result		2B	x	○		Delle Site, A. (2001) Factors affecting sorption of organic compounds in natural sorbent/water systems and sorption coefficients for selected pollutants. A review. J. Phys. Chem. Ref. Data 30, 187–439..	p.429

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA-IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
43	logKoc	2.34	218.7761624	25 °C		natural sediment from River Leie	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×	○		Dewulf, J., van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: temperature dependence in the 2–25°C range. Water Res. 33, 2424–2436.	p.429
44	logKoc	2.12	131.8256739	25 °C			その他,HPLC-screening method				experimental result		2B	×	×		Muller, M., Kordel, W. (1996) Comparison of screening methods for the estimation of adsorption coefficients on soil. Chemosphere 32, 2493–2504..	p.429
45	logKoc	2.4	251.1886432	13.5 °C		natural sediment from River Leie	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×	○		Dewulf, J., van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: temperature dependence in the 2–25°C range. Water Res. 33, 2424–2436.	p.429
46	logKoc	2.01	102.3292992	25 °C		aquifer material with f_OC = 0.006	その他,measured partition coeff. K_P = 0.61 mL/g				experimental result		2B	×	○		Abdul, A.S., Gibson, T.L., Rai, D.N. (1990) Use of humic acid solution to remove organic contaminants from hydrogeologic systems. Environ. Sci. Technol. 24(3), 328–333.	p.429
47	logKoc	2.33	213.796209	5.2 °C		natural sediment from River Leie	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×	○		Dewulf, J., van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: temperature dependence in the 2–25°C range. Water Res. 33, 2424–2436.	p.429
48	logKoc	2.22	165.9586907	25 °C		Captina silt loam	その他,batch equilibrium				experimental result		2B	×	○		Walton, B.T., Hendricks, M.S., Anderson, T.A., Griest, W.H., Merriweather, R., Beauchamp, J.J., Francis, C.W. (1992) Soil sorption of volatile and semivolatile organic compounds in a mixture. J. Environ. Qual. 21, 552–558..	p.429

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA-IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
49	logKoc	2.18	151.3561248	25 °C			その他,RP- HPLC-k' correlation including hydrogen- bonding indicator variable				experimental result		2B	×	×		Hong, H., Wang, L., Han, S., Zou, G. (1996) Prediction adsorption coefficients (KOC) for aromatic compounds by HPLC retention factors (k'). Chemosphere 32, 343-351.	p.429
50	logKoc	2.17	147.9108388	25 °C			その他,RP- HPLC-k' correlation including MCI related to non- dispersive intermolecular interactions				experimental result		2B	×	×		Hong, H., Wang, L., Han, S., Zou, G. (1996) Prediction adsorption coefficients (KOC) for aromatic compounds by HPLC retention factors (k'). Chemosphere 32, 343-351.	p.429
51	logKoc	2.21	162.1810097	25 °C			その他,RP- HPLC-k' correlation on 3 different stationary phases				experimental result		2B	×	×		Szabo, G., Gucci, J., Bulman, R.A. (1995) Examination of silica-salicylic acid and silica-8- hydroxyquinoline HPLC stationary phases for estimation of the adsorption coefficient of soil for some aromatic hydrocarbons. Chemosphere 30, 1717-1727.	p.429
52	logKoc	2.31	204.1737945	25 °C			その他,RP- HPLC-k' correlation on 3 different stationary phases				experimental result		2B	×	×		Szabo, G., Gucci, J., Bulman, R.A. (1995) Examination of silica-salicylic acid and silica-8- hydroxyquinoline HPLC stationary phases for estimation of the adsorption coefficient of soil for some aromatic hydrocarbons. Chemosphere 30, 1717-1727.	p.429
53	logKoc	2.21	162.1810097	25 °C			その他,RP- HPLC-k' correlation on 3 different stationary phases				experimental result		2B	×	×		Szabo, G., Gucci, J., Bulman, R.A. (1995) Examination of silica-salicylic acid and silica-8- hydroxyquinoline HPLC stationary phases for estimation of the adsorption coefficient of soil for some aromatic hydrocarbons. Chemosphere 30, 1717-1727..	p.429
54	logKoc	2.1	125.8925412	25 °C		average of 5 soils	その他,sorption isotherms by batch equilibrium method-GC				experimental result		2B	×	○		Xing, B., McGill, W.B., Dudas, M.J. (1994) Cross-correlation of polarity curves to predict partition coefficients of nonionic organic contaminants. Environ. Sci. Technol. 28, 1929-1933.	p.429

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA-IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
55	logKoc	2.16	144.5439771	25 °C		Mclaurin sandy loam	その他, batch equilibrium				experimental result		2B	×	○		Walton, B.T., Hendricks, M.S., Anderson, T.A., Griest, W.H., Merriweather, R., Beauchamp, J.J., Francis, C.W. (1992) Soil sorption of volatile and semivolatile organic compounds in a mixture. J. Environ. Qual. 21, 552-558..	p.429
56	logKoc	2.23	169.8243652	2.3 °C		natural sediment from River Leie	その他, EPICS- GC/FID				experimental result		2B	×	○		Dewulf, J., van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: temperature dependence in the 2-25°C range. Water Res. 33, 2424- 2436.	p.429
57	logKoc	2.1	125.8925412	25 °C			その他, HPLC- K' correlation				experimental result		2B	×	×		Szabo, G., Prosser, S.L., Bulman, R.A. (1990a) Prediction of the adsorption coefficient (K_OC) for soil by a chemically immobilized humic acid column using RP-HPLC. Chemosphere 21, 729-740. Szabo, G., Prosser, S.L., Bulman, R.A. (1990b) Determination of the adsorption coefficient (K_OC) of some aromatics for soil by RPHPLC on two immobilized humic acid phases. Chemosphere 21, 777-788..	p.429
58	logKoc	2.31	204.1737945	18.6 °C		natural sediment from River Leie	その他, EPICS- GC/FID				experimental result		2B	×	○		Dewulf, J., van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: temperature dependence in the 2-25°C range. Water Res. 33, 2424- 2436.	p.429

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA-IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
59	logKoc	2.26	181.9700859	25 °C			その他,humic acid-silica column				experimental result		2B	x	x		Szabo, G., Prosser, S.L., Bulman, R.A. (1990a) Prediction of the adsorption coefficient (K_OC) for soil by a chemically immobilized humic acid column using RP-HPLC. Chemosphere 21, 729-740.. Szabo, G., Prosser, S.L., Bulman, R.A. (1990b) Determination of the adsorption coefficient (K_OC) of some aromatics for soil by RPHPLC on two immobilized humic acid phases. Chemosphere 21, 777-788..	p.429
60	NITE初期リス ク評価書	Koc	270	270							estimated by calculation		4C	x	x		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) PckocWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY..	p.2
61	ECHA	Koc	205	205			その他,Calculation following the Sabljic et al. (1995) method as set out in the Technical Guidance Document (ECB 2003).	no	2: reliable with restrictions	supporting study	estimated by calculation	The calculated Koc of toluene is 205 based on a measured log Kow of 2.73.	4C	x	x		[Reference Type]:grey literature, [Title]:Technical Guidance Document on Risk Assessment - Part III, [Author]:European Chemicals Bureau, [Year]:2003, [Bibliographic source]:European Commission - Joint Research Centre. EUR 20418 EN/3 [Reference Type]:publication, [Title]:QSAR modelling of soil sorption. Improvements and systematics of log Koc vs. log Kow correlations, [Author]:Sabljic A, Gusteb H, Verhaar H, Hermens J, [Year]:1995, [Bibliographic source]:Chemosphere. 31: 4489-4514	002 Supporting Calculation
62	SIDS	Koc	176.4	176.4						key study	estimated by calculation	TGD (1996): log Koc = 0.81 log Kow + 0.1 = 2.24	4C	x	x			p.38

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	6.64E-3 atm・m ³ /mol	672.798			-	-	-		2B	×	×		HSDB. 2010. Toluene. Hazardous Substances Data Bank, National Library of Medicine. http://toxnet.nlm.nih.gov . April 24, 2014.	p.299
2 CRC	0.66 kPa m ³ /mol	660	25 °C				-		2B	×	×		Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C, J. Phys. Chem. Ref Data, 29, 41, 2000.	99th Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
3 EPI Suite	526 Pa・m ³ /mol	526	20 °C				(Q)SAR		2C	×	×			
4 HSDB	6.64E-3 atm・m ³ /mol	672.798	25 °C				-		2B	×	×		[Mackay D et al: Environ Sci Technol 13: 333-6 (1979)] **PEER REVIEWED**	Other Chemical/Physical Properties:
5 Mackay	541 Pa・m ³ /mol	541	20 °C				experimental result		2B	×	○		Staudinger, J., Roberts, P.V. (1996) A critical review of Henry's law constant for environmental applications. Crit. Rev. Environ. Sci. Technol. 26, 205–297.	p.428
6	660 Pa・m ³ /mol	660	25 °C				experimental result		2B	×	×		Perlinger, J.A., Eisenreich, S.J., Capel, P.D. (1993) Application of headspace analysis to the study of sorption of hydrophobic organic chemicals to α-Al ₂ O ₃ . Environ. Sci. Technol. 27, 928–937.	p.428
7	652 Pa・m ³ /mol	652	25 °C				experimental result		2B	×	×		Robbins, G.A., Wang, S., Stuart, J.D. (1993) Using the static headspace method to determine Henry's law constants. Anal. Chem. 65, 3113–3118.	p.428
8	644 Pa・m ³ /mol	644	25 °C				experimental result		2B	×	×		Zhang, Z., Pawliszyn, J. (1993) Headspace solid-phase microextraction. Anal. Chem. 65, 1843–1852.	p.428
9	676 Pa・m ³ /mol	676	23 °C				experimental result		2B	×	×		Nielsen, F., Olsen, E., Fredenslund, A. (1994) Henry's law constants and infinite dilution activity coefficients of volatile organic compounds in water by a validated batch air stripping method. Environ. Sci. Technol. 28, 2133–2138.	p.428

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
10	699 Pa・m ³ /mol	699	25 °C				experimental result		2B	×	×		Dewulf, J., Drijvers, D., van Langenhove, H. (1995) Measurement of Henry's law constant as function of temperature and salinity for low temperature range. Environ. Toxicol. Chem. 29, 323-331.	p.428
11	684 Pa・m ³ /mol	684	25 °C				experimental result		2B	×	×		Turner, L.H., Chiew, Y.C., Ahlert, R.C., Kosson, D.S. (1996) Measuring vapor-liquid equilibrium for aqueous-organic systems: Review and a new technique. Am. Inst. Chem. Eng. J. 42, 1772-1778.	p.428
12	631 Pa・m ³ /mol	631	25 °C				estimated by calculation		4C	×	×		Li, J., Dallas, A.J., Eikens, D.I., Carr, P.W., Bergmann, D.L., Hait, M.J., Eckert, C.A. (1993) Measurement of large infinite dilution activity coefficients of nonelectrolytes in water by inert gas stripping and gas chromatography. Anal. Chem. 65, 3212-3218.	p.428
13	634 Pa・m ³ /mol	634	20 °C				experimental result		2B	×	○		Schoene, S., Steinhases, J. (1985) Determination of Henry's law constant by automated headspace gas chromatography determination of dissolved gases. Fresenius Z. Anal. Chem. 321, 538-543.	p.427
14	555 Pa・m ³ /mol	555	25 °C				experimental result		2B	×	×		Dewulf, J., Drijvers, D., van Langenhove, H. (1995) Measurement of Henry's law constant as function of temperature and salinity for low temperature range. Environ. Toxicol. Chem. 29, 323-331.	p.428
15	1116 Pa・m ³ /mol	1116	45 °C				experimental result		2B	×	×		Ettre, L.S., Weltier, C., Kolb, B. (1993) Determination of gas-liquid partition coefficients by automatic equilibrium headspace-gas chromatography utilizing the phase ratio variation method. Chromatographia 35, 73-84.	p.427

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
16	933 Pa・m ³ /mol	933	40 °C				experimental result		2B	×	×		Kolb, B., Welter, C., Bichler, C. (1992) Determination of partition coefficients by automatic equilibrium headspace gas chromatography by vapor phase calibration. Chromatographia 34, 235-240.	p.427
17	644 Pa・m ³ /mol	644	25 °C				estimated by calculation		4C	×	×		Yaws, C.L., Yang, J.C., Pan, X. (1991) Henry's law constants for 362 organic compounds in water. Chem. Eng. November, 179-185.	p.427
18	652 Pa・m ³ /mol	652	25 °C				estimated by calculation		4C	×	×		Abraham, M.H., Fuchs, R., Whiting, G.S., Chambers, E.C. (1990) J. Chem. Soc. Parkin Trans 2, 291.	p.427
19	651 Pa・m ³ /mol	651	25 °C				experimental result		2B	×	×		Ashworth, R.A., Howe, G.B., Mullins, M.E., Rogers, T.N. (1988) Air-water partitioning coefficients of organics in dilute aqueous solutions. J. Hazard. Materials 18, 25-36.	p.427
20	595 Pa・m ³ /mol	595	25 °C				experimental result		2B	×	×		Altschuh, J., Bruggemann, Santl, H., Eichinger, G., Piringner, O.G. (1999) Henry's law constants for a diverse set of organic chemicals: Experimental determination and comparison of estimation methods. Chemosphere 39, 1871-1887.	p.428
21	601 Pa・m ³ /mol	601	25 °C				experimental result		2B	×	×		Warner, P.H., Cohen, J.M., Ireland, J.C. (1987) Determination of Henry's Law Constant of Selected Priority Pollutants. NTIS PB- 87-212684, EPA/600/D-87/229. U.S. EPA, Cincinnati, OH.	p.427
22	647.5 Pa・m ³ /mol	647.5	25 °C				experimental result		2B	○	×		Gorgenyi, M., Dewulf, J., Van Langenhove, H. (2002) Temperature dependence of Henry's law constant in an extended temperature range. Chemosphere 48, 757-762.	p.428

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
23	647 Pa・m ³ /mol	647	25 °C				experimental result		2B	×	×		Garbarni, D.R., Lion, L.W. (1985) Evaluation of sorptive partitioning of nonionic pollutants in closed systems by headspace analysis. Environ. Sci. Technol. 19, 1122–1128.	p.427
24	664 Pa・m ³ /mol	664	25 °C				experimental result		2B	×	×		Sanemasa, I., Araki, M., Deguchi, T., Nagai, H. (1982) Solubility measurement of benzene and the alkylbenzenes in water by making the use of solute vapor. Bull. Chem. Soc. Jpn. 53, 1054–1062.	p.427
25	628 Pa・m ³ /mol	628	25 °C				experimental result		2B	×	×		Sanemasa, I., Araki, M., Deguchi, T., Nagai, H. (1981) Solubilities of benzene and alkylbenzenes in water. Methods for obtaining aqueous solutions saturated with vapors in equilibrium with organic liquids. Chem. Lett. 2, 255–258.	p.427
26	594 Pa・m ³ /mol	594	20 °C				experimental result		2B	×	○		Yurteri, C. Ryan, D.F., Callow, J.J., Gurol, J.J. (1987) The effect of chemical composition of water on Henry's law constant. J. WPCF 59, 950–956.	p.427
27	612 Pa・m ³ /mol	612	25 °C				experimental result		2B	×	×		Bakierowska, A.-M., Trzeszczynski, J. (2003) Graphical method for the determination of water/gas partition coefficients of volatile organic compounds by a headspace gas chromatography technique. Fluid Phase Equil. 213, 139–146.	p.428
28	474 Pa・m ³ /mol	474	25 °C				experimental result		2B	×	×		Brown, R.L., Wasik, S.P. (1974) A method of measuring the solubilities of hydrocarbons in aqueous solutions. J. Res. Nat. Bur. Std. 78A, 453–460.	p.427
29	527 Pa・m ³ /mol	527	25 °C				experimental result		2B	×	×		Vitenberg, A.G., Ioffe, B.V., St. Dimitrova, Z., Butaeva, I.L. (1975) Determination of gas-liquid partition coefficients by means of gas chromatographic analysis. J. Chromatogr. 112, 319–327.	p.427

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
30	959 Pa・m ³ /mol	959	25 °C				experimental result		2B	×	×		Ayuttaya, P.C.N., Rogers, T.N., Mullins, M.E., Kline, A.A. (2001) Henry's law constants derived from equilibrium static cell measurements for dilute organic-water mixtures. Fluid Phase Equil. 185, 359-377.	p.428
31	673 Pa・m ³ /mol	673	25 °C				experimental result		2B	×	×		Mackay, D., Shiu, W.Y., Sutherland, R.P. (1979) Determination of air-water Henry's law constants for hydrophobic pollutants. Environ. Sci. Technol. 13, 333-337.	p.427
32	625 Pa・m ³ /mol	625	23.0 °C				experimental result		2B	×	×		Leighton, D.T., Calo, J.M. (1981) Distribution coefficients of chlorinated hydrocarbons in dilute air-water systems for groundwater contamination applications. J. Chem. Eng. Data 26, 381-385.	p.427
33	605 Pa・m ³ /mol	605	25 °C				experimental result		2B	×	×		Peng, J., Wan, A. (1997) Measurement of Henry's law constants of high volatility organic compounds using a headspace autosampler. Environ. Sci. Technol. 31, 2998-3003.	p.428
34	556~574 Pa・m ³ /mol	565	27 °C				experimental result		2B	×	×		Cheng, W.-H., Chu, F.-S., Liou, J.-J. (2003) Air-water interface equilibrium partitioning coefficients of aromatic hydrocarbons. Atmos. Environ. 37, 4807-4815.	p.428
35	509 Pa・m ³ /mol	509	20 °C				experimental result		2B	×	○		Staudinger, J., Roberts, P.V. (2001) A critical compilation of Henry's law constant temperature dependence relations for organic compounds in dilute aqueous solutions. Chemosphere 44, 561-576.	p.428

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
36	644 Pa・m ³ /mol	644	25 °C				experimental result		2B	×	×		Miller, M.E., Stuart, J.D. (2000) Measurement of aqueous Henry's law constants for oxygenates and aromatics found in gasolines by the static headspace method. Anal. Chem. 72, 622–625.	p.428
37	652 Pa・m ³ /mol	652	25 °C				experimental result		2B	×	×		David, M.O., Fendinger, N.J., Hand, V.C. (2000) Determination of Henry's law constants for organosilicones in actual and simulated wastewater. Environ. Sci. Technol. 34, 4554–4559.	p.428
38	674.8 Pa・m ³ /mol	674.8	25 °C				experimental result		2B	×	×		Ryu, S.-A., Park, S.-J. (1999) A rapid determination method of the air/water partition coefficient and its application. Fluid Phase Equil. 161, 295–304.	p.428
39	637.2 Pa・m ³ /mol	637.2	25 °C				experimental result		2B	×	×		Dohnal, V., Hovorka, Š. (1999) Exponential saturator: A novel gas-liquid partitioning technique for measurement of large limiting activity coefficients. Ind. Eng. Chem. Res. 38, 2036–2043.	p.428
40	478 Pa・m ³ /mol	478	25 °C				experimental result		2B	×	×		Peng, J., Wan, A. (1998) Effect of ionic strength on Henry's law constant of volatile organic compounds. Chemosphere 36, 2731–2740.	p.428
41	NITE初期リス ク評価書	673 Pa・m ³ /mol	673	25 °C		-	その他(推定 値),推定値	-	4C	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) HenryWin Estimation Software, ver. 3.10, North Syracuse, NY..	p.2
42		0.00664 atm・ m ³ /mol	672.798	25 °C		-	その他(推定 値),推定値	-	4C	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) HenryWin Estimation Software, ver. 3.10, North Syracuse, NY..	p.2
43		673 Pa・m ³ /mol[6.64 ×10 ⁻³ atm・m ³ /mol]	673	25 °C			experimental result		2B	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) HenryWin Estimation Software, ver. 3.10, North Syracuse, NY.	p.2
44	PhysProp	0.00664 atm・ m ³ /mol	672.798	25 °C			experimental result		2B	×	×		MACKAY, D ET AL. (1979)	

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
45 ECHA	485 Pa・m ³ /mol	485	[Standard temperature and pressure assumed .]		2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×	×		[Reference Type]:other: Guidance document, [Title]:Chapter 16 "Environmental exposure estimate", [Author]:ECHA, [Year]:2012, [Bibliographic source]:Guidance on information requirements and chemical safety assessment (IR & CSA)	001 Key Calculation
46 SIDS	537 Pa・m ³ /mol	537	20 °C			-	estimated by calculation	vapour pressure 3,000 Pa and the water solubility 515 mg/L	4C	×	×			p.38

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR		1			BCF		13	13				-	experimental result		2B	x	x		EC. 2003. European Union risk assessment report. Toluene. European Commission, Institute for Health and Consumer Protection, European Chemicals Bureau.	p.315
2		1			BCF		8	8				-	experimental result		2B	x	x		EC. 2003. European Union risk assessment report. Toluene. European Commission, Institute for Health and Consumer Protection, European Chemicals Bureau.	p.315
3		1			BCF		90	90				-	experimental result		2B	x	x		EC. 2003. European Union risk assessment report. Toluene. European Commission, Institute for Health and Consumer Protection, European Chemicals Bureau.	p.315
4 EPI Suite		1			BCF		26.03 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C)]	26.03	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	x	x			
5 HSDB		1			BCF		90	90				-			2B	x	x		Freitag D et al: Chemosphere 14: 1589-1616 (1985)	Environmental Bioconcentration:
6		1			BCF		13	13				-			2B	x	x		Ogata M, Miyake Y; Water Res 12: 1041-4 (1978)	Environmental Bioconcentration:
7 Mackay		1			その他		1.95	1.95				-			2B	x	x		Freitag, D., Ballhorn, L., Geyer, H., Korte, F. (1985) Environmental hazard profile of organic chemicals. An experimental method for the assessment of the behaviour of organic chemicals in the ecosphere by means of simple laboratory tests with 14C labelled chemicals. Chemosphere 14, 1589-1616.	p.429
8		1			その他		3.28[activat ed sludge]	3.28				-			2B	x	x		Freitag, D., Ballhorn, L., Geyer, H., Korte, F. (1985) Environmental hazard profile of organic chemicals. An experimental method for the assessment of the behaviour of organic chemicals in the ecosphere by means of simple laboratory tests with 14C labelled chemicals. Chemosphere 14, 1589-1616.	p.429

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
9		1			その他		0.62	0.62					-		2B	×	×		Geyer, H., Sheenhan, P., Kotzias, D., Freitag, D., Korte, F. (1982) Prediction of ecotoxicological behaviour of chemicals: relationship between physico-chemical properties and bioaccumulation of organic chemicals in the mussel mytilus edulis. Chemosphere 11, 1121- 1134.	p.429
10		1			その他		1.99	1.99					-		2B	×	×		Herman, D.C., Mayfield, C.I., Innis, W.E. (1991) The relationship between toxicity and bioconcentration of volatile aromatic hydrocarbons by the alga selenastrum capricornutum. Chemosphere 22(7), 665-676.	p.429
11		1			その他		0.22	0.22					-		2B	×	×		Nunes, P., Benville, P.E., Jr. (1979) Uptake and depuration of petroleum hydrocarbons in the Manila clams, Tapes semidecussata Reeve. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 21, 719-724.	p.429
12		1			その他		2.58	2.58					-		2B	×	×		Freitag, D., Ballhorn, L., Geyer, H., Korte, F. (1985) Environmental hazard profile of organic chemicals. An experimental method for the assessment of the behaviour of organic chemicals in the ecosphere by means of simple laboratory tests with 14C labelled chemicals. Chemosphere 14, 1589-1616.	p.429
13		1			その他		1.12	1.12					-		2B	×	×		Ogata, M., Miyake, Y. (1978) Disappearance of aromatic hydrocarbons and organic sulfur compounds from fish flesh reared in crude oil suspension. Water Res. 12, 1041-1044.	p.429
14		1			その他		0.92	0.92					-		2B	×	×		Ogata, M., Fujisawa, K., Ogino, Y., Mano, E. (1984) Partition coefficients as a measure of bioconcentration potential of crude oil compounds in fish and shellfish. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 33, 561-567.	p.429
15	MOE初期評価	1			BCF		13	13					-		2B	×	×		Hazardous Substances Data Bank (HSDB) (1998) U.S.National Library of Medicine	p.1
16		1			BCF		90	90					-		2B	×	×		Hazardous Substances Data Bank (HSDB) (1998) U.S.National Library of Medicine	p.1

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
17 NITE初期リス ク評価書		1			BCF		90	90					experimental result		2B	x	x		Freitag, D., Ballhorn, L., Geyer, H. and Korte, F. (1985) Environmental hazard profile of organic chemicals. An experimental method for the assessment of the behaviour of organic chemicals in the ecosphere by means of simple laboratory tests with 14C labelled chemicals. Chemosphere, 14, 1589-1616.	p.7
18		1			BCF		13	13					experimental result		2B	x	x		Ogata, M. and Miyake, Y. (1978) Disappearance of aromatic hydrocarbons and organic sulfur compounds from fish flesh reared in crude oil suspension. Water Res., 12, 1041-1044.	p.7
19 ECHA		1			BCF		42 無次元 [Calculated from partition coefficient]	42		no	2: reliable with restrictions	supporting study	estimated by calculation	Calculation following the Veith et al. (1979) method as set out in the Technical Guidance Document (ECB 2003).	4C	x	x		[Reference Type]:grey literature, [Title]:Technical Guidance Document on Risk Assessment - Part III, [Author]:European Chemicals Bureau, [Year]:2003, [Bibliographic source]:European Commission - Joint Research Council. EUR 20418 EN/3 [Reference Type]:publication, [Title]:Measuring and estimating the bioconcentration factor of chemicals on fish, [Author]:Veith GD DeFoe DL, Bergstedt BV, [Year]:1979, [Bibliographic source]:Journal of Fisheries Research Board of Canada. 36: 4069-4072	002 Supporting Calculation
20		1	50 µg/L		BCF		90[whole body w.w.]	90		その他_not specified	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	x	x		[Reference Type]:publication, [Title]:Environmental Hazard profile of organic chemicals., [Author]:Freitag D, Ballhorn L, Geyer H, Korte F, [Year]:1985, [Bibliographic source]:Chemosphere 14 (10), 1589-1616. [Reference Type]:publication, [Title]:Ecotoxicological profile analysis VII Screening chemicals for their environmental behaviour by comparative evaluation, [Author]:Freitag D, Geyer H, Kraus A, Viswanathan R, Kotzias D, Attar A, Klein W and Korte F, [Year]:1982, [Bibliographic source]:Ecotoxicology and Environmental Safety 6, 61-80	001 Key Experimental result

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
21	SIDS	1	0.05 mg/L		BCF	-	90	90				key study	experimental result		2B	×	○		Freitag D, Ballhorn L, Geyer H, Korte F (1985). Environmental Hazard profile of organic chemicals. Chemosphere 14(10). 1589-1616.	p.40
22		1	0.05~4 mg/L		BCF	-	4.2	4.2				-	experimental result		2B	×	×		Geyer H, Sheehan P, Kotzias D, Freitag D Korte F (1982). Prediction of ecotoxicological behaviour of chemicals. Relationships between physico-chemical properties and bioaccumulation of organic chemicals in the mussel Mytilus edulis. Chemosphere 11, 1121-1134.	p.40
23		1	0.05 mg/L		BCF	-	380	380				-	experimental result		2B	○	×		Freitag D, Ballhorn L, Geyer H, Korte F (1985). Environmental Hazard profile of organic chemicals. Chemosphere 14(10). 1589-1616.	p.40
24		1	0.09 mg/L		BCF	-	8	8				-	experimental result		2B	×	×		Korn S, Hirsch N, Struhsaker JW (1977). The uptake and depuration of 14C-benzene and 14C-toluene in pacific herring, Clupea harengus pallasii. Fish. Bull. 75, 633-636.	p.40
25		1	0.13 mg/L		BCF	-	13	13				-	experimental result		2B	×	×		Ogata M, Miyaka Y (1978). Disappearance of aromatic hydrocarbons and organic sulphur compounds from fish flesh reared in crude oil suspension. Water Res. 12, 1041-1044.	p.40
26		1	1.2 mg/L		BCF	-	1.7	1.7				-	experimental result		2B	×	×		Nunes P, Benville P (1979). Uptake and depuration of petroleum in the Manila clam, Tapes semidecurata Reeve. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 21, 719-726.	p.40

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	水域	生分解				4~22 日					記載なし				-	estimated by calculation		x		Howard PH, Boethling RS, Jarvis WF, et al., eds. 1991. Handbook of environmental degradation rates. Chelsea, MI: Lewis Publishers, Inc, 410-411.	p.316
2	大気	OHラジカルとの反応	0.6E-5~2.4E-5 1/秒			13 時間[The actual half-life may range from 10 to 104 hours depending on atmospheric conditions]		0.53483579			記載なし				-	estimated by calculation		x		Howard PH, Boethling RS, Jarvis WF, et al., eds. 1991. Handbook of environmental degradation rates. Chelsea, MI: Lewis Publishers, Inc, 410-411.	p.316
3	土壌	生分解					50 % [The wood-degrading, white-rot fungus, Phanerochaete chrysosporium, mineralizes 50% of 2 ppm aqueous solutions of toluene or BTEX compounds to carbon dioxide within 5 days.]				記載なし				-	experimental result		x		Yadav JS, Reddy CA. 1993. Degradation of benzene, toluene, ethylbenzene, and xylenes (BTEX) by the lignin-degrading basidiomycete Phanerochaete chrysosporium. Appl Environ Microbiol 59(3):756-762.	p.318
4	土壌	生分解				1 時間[as short as 1 hour]					記載なし				-	-		x		Claus D, Walker N. 1984. The decomposition of toluene by soil bacteria. J Gen Microbiol 36:107-122.	p.318
5	水域	生分解 (好氣的)					93 % [14 days]				OECD TG 301D				-	experimental result		o		Lapertot ME, Pulgarin C. 2006. Biodegradability assessment of several priority hazardous substances: Choice, application and relevance regarding toxicity and bacterial activity. Chemosphere 65(4):682-690.	p.317

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
6 EHC	水域	生分解					18.47 %[ponds]				その他,the standard dilution method				-	experimen tal result		x		PRICE, K.S., WAGGY, G.T., & CONWAY, R.A. (1974) Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals. J. Water Pollut. Contr. Fed., 46(1): 63-77. BRIDIE, A.L., WOLFF, C.J.M., & WINTER, M. (1979) BOD and COD of some petrochemicals. Water Res., 13: 627-630. DAVIS, E.M., MURRAY, H.E., LIEHR, J.G., & POWERS, E.L. (1981) Basic microbial degradation rates and chemical byproducts of selected organic compounds. Water Res., 15: 1125-1127.	4.2.1. Biodegradation
7	水域	生分解					63~86 %[the biodegradability of toluene (percent bio- oxidized) ranged from 63% to 86% after up to 20 days]				その他,the standard dilution method				-	experimen tal result		x		PRICE, K.S., WAGGY, G.T., & CONWAY, R.A. (1974) Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals. J. Water Pollut. Contr. Fed., 46(1): 63-77. BRIDIE, A.L., WOLFF, C.J.M., & WINTER, M. (1979) BOD and COD of some petrochemicals. Water Res., 13: 627-630. DAVIS, E.M., MURRAY, H.E., LIEHR, J.G., & POWERS, E.L. (1981) Basic microbial degradation rates and chemical byproducts of selected organic compounds. Water Res., 15: 1125-1127.	4.2.1. Biodegradation
8	水域	生分解					0.09 %[turbid rivers]				その他,the standard dilution method				-	experimen tal result		x		PRICE, K.S., WAGGY, G.T., & CONWAY, R.A. (1974) Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals. J. Water Pollut. Contr. Fed., 46(1): 63-77. BRIDIE, A.L., WOLFF, C.J.M., & WINTER, M. (1979) BOD and COD of some petrochemicals. Water Res., 13: 627-630. DAVIS, E.M., MURRAY, H.E., LIEHR, J.G., & POWERS, E.L. (1981) Basic microbial degradation rates and chemical byproducts of selected organic compounds. Water Res., 15: 1125-1127.	4.2.1. Biodegradation
9	水域	生分解					0.36 %[clean rivers]				その他,the standard dilution method				-	experimen tal result		x		PRICE, K.S., WAGGY, G.T., & CONWAY, R.A. (1974) Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals. J. Water Pollut. Contr. Fed., 46(1): 63-77. BRIDIE, A.L., WOLFF, C.J.M., & WINTER, M. (1979) BOD and COD of some petrochemicals. Water Res., 13: 627-630. DAVIS, E.M., MURRAY, H.E., LIEHR, J.G., & POWERS, E.L. (1981) Basic microbial degradation rates and chemical byproducts of selected organic compounds. Water Res., 15: 1125-1127.	4.2.1. Biodegradation

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
10	水域	生分解					4.81 %[eutrophic lakes]				その他,the standard dilution method				-	experimental result		x		PRICE, K.S., WAGGY, G.T., & CONWAY, R.A. (1974) Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals. J. Water Pollut. Contr. Fed., 46(1): 63-77. BRIDIE, A.L., WOLFF, C.J.M., & WINTER, M. (1979) BOD and COD of some petrochemicals. Water Res., 13: 627-630. DAVIS, E.M., MURRAY, H.E., LIEHR, J.G., & POWERS, E.L. (1981) Basic microbial degradation rates and chemical byproducts of selected organic compounds. Water Res., 15: 1125-1127.	4.2.1. Biodegradation
11	水域	生分解					0.31 %[oligotrophic lakes]				その他,the standard dilution method				-	experimental result		x		PRICE, K.S., WAGGY, G.T., & CONWAY, R.A. (1974) Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals. J. Water Pollut. Contr. Fed., 46(1): 63-77. BRIDIE, A.L., WOLFF, C.J.M., & WINTER, M. (1979) BOD and COD of some petrochemicals. Water Res., 13: 627-630. DAVIS, E.M., MURRAY, H.E., LIEHR, J.G., & POWERS, E.L. (1981) Basic microbial degradation rates and chemical byproducts of selected organic compounds. Water Res., 15: 1125-1127.	4.2.1. Biodegradation
12	大気	その他,Atmospheric oxidation				12.8 時間					記載なし				-	-		x		US EPA (1980) Exposure assessments of priority pollutants: toluene. In: Little, A.D., ed. Storet water quality information system, Washington DC, US Environmental Protection Agency (October 1980).	4.1.1. Air
13	水域	生分解					38 %[180 min]				記載なし				-	experimental result		x		CHAMBERS, C.W., TABAK, H.H., & KABLER, P.W. (1963) Degradation of aromatic compounds by phenol-adapted bacteria. J. Water Pollut. Contr. Fed., 35(12): 1517-1528.	4.2.1. Biodegradation
14	Howard Deg	水域	生分解 (好氣的)			96 時間 [Low]									-	-		x			p.410
15		水域	生分解 (嫌氣的)			5040 時間 [High]									-	-		x			p.410
16		水域	加水分解												-	-		x			p.411
17		大気	OHラジカルとの反応		3E+6 molecule/cm ³	10 時間 [Low]									-	-		x			p.411
18		大気	OHラジカルとの反応		3E+5 molecule/cm ³	104 時間 [High]									-	-		x			p.411
19		水域	光分解			321 時間 [Low]									-	-		x			p.411
20		水域	光分解			1284 時間 [High]									-	-		x			p.411
21		土壌	総括分解			528 時間 [High]									-	-		x			p.410
22		水域	生分解 (好氣的)			528 時間 [High]									-	-		x			p.410

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタティの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタティ該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等	
23	水域	総括分解				96 時間 [Low]										-		x			p.410	
24	水域	総括分解				528 時間 [High]										-		x			p.410	
25	大気	総括分解				10 時間 [Low]										-		x			p.410	
26	大気	総括分解				104 時間 [High]										-		x			p.410	
27	土壌	総括分解				96 時間 [Low]										-		x			p.410	
28	水域	生分解(嫌氣的)				1344 時間 [Low]										-		x			p.410	
29	Howard FATE	水域	生分解			30 日[in oil-polluted water]										experimental result		x		Lee RF; 1977 Oil Spill Conf Am Petrol Inst p 611-6 (1977)	p.437	
30		土壌	生分解				90 %[in 4 weeks]									experimental result		x		McNabb JF et al; 81st Ann Mtg Am Soc Microbiology p.213 (1981) Wilson JT et al; Ground Water 21: 134-42 (1983)	p.437	
31		水域	生分解			12 日[in water collected near Port Valdez, Alaska]										experimental result		x		Button DK et al; Appl Environ Microbiol 42: 708-19 (1981)	p.437	
32		水域	生分解			90 日[in uncontaminated estuarine water]										experimental result		x		Lee RF; 1977 Oil Spill Conf Am Petrol Inst p 611-6 (1977)	p.437	
33		大気	総括分解			[Its half-life ranges from 3 hr to somewhat over a day]										-		x		Smith JH, Harper JC; 12th Conf Environ Toxicol Airforce Aerospace Med Res Lab p.336-53 (1982) Suzuki J et al; Bull Environ Contam Toxicol 31: 79-84 (1983)	p.437	
34		大気	OHラジカルとの反応			[a half-life of slightly over a day and a degradation rate of 41 %/day]										-		x		Perry RA et al; J Phys Chem 81: 296-304 (1977) Singh HB et al; Atmos Environ 15: 601-12 (1981)	p.438	
35	HSDB	水域	生分解(好氣的)				123 %[123% of its theoretical BOD][in 2 weeks]									化審法TG	experimental result		x		NITE; Chemical Risk Information Platform (CHRIP). Biodegradation and Bioconcentration. Tokyo, Japan: Natl Inst Tech Eval. Available from, as of January 25, 2016: http://www.safe.nite.go.jp/english/db.html	Environmental Biodegradation:
36		水域	生分解(好氣的)			4 日										-		x		Capel PD, Larson SL; Chemosphere 30: 1097-1107 (1995)	Environmental Biodegradation:	
37		大気	オゾンとの反応	4.1E-22 cm^3/molecule/sec	7E11 molecule/cm^3	27950 日		27953.0899	25 °C							experimental result		x		Atkinson R; J Phys Chem Ref Data Monograph 2 (1994) Atkinson R, Carter WPL; Chem Rev 84: 437-70 (1984) (ラジカル濃度、半減期)	Environmental Abiotic Degradation:	

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等	
38	大気	硝酸ラジカルとの反応		6.8E-17 cm ³ /molecule/sec	2.4E8 molecule/cm ³	491 日		491.577011	25 °C							experimental result		x		Atkinson R; J Phys Chem Ref Data Monograph 2 (1994) Atkinson R et al; Atmos Environ 24: 2647-54 (1990) (ラジカル濃度、半減期)	Environmental Abiotic Degradation:	
39	大気	OHラジカルとの反応		5.98E-12 cm ³ /molecule/sec	5E6 molecule/cm ³	2 日		2.69212645	25 °C							experimental result		x		Atkinson R, Arey J; Chem Rev 103: 4805-38 (2003) Meylan WM, Howard PH; Chemosphere 26: 2293-99 (1993) (ラジカル濃度、半減期)	Environmental Abiotic Degradation:	
40	土壌	生分解														-		x		Aronson D et al; Aerobic biodegradation of organic chemicals in environmental media. Washington, DC: US EPA (1999). Available from, as of Mar 3, 2016: http://www3.epa.gov/epawaste/hazard/wastetypes/wasteid/hwirwste/pdf/risk/reports/s0549.pdf	Environmental Biodegradation:	
41	水域	生分解 (嫌氣的)														-		x		Capel PD, Larson SL; Chemosphere 30: 1097-1107 (1995)	Environmental Biodegradation:	
42	水域	生分解	0.0005~ 0.0063 1/日 [First-order degradation rate constants of 0.0005 to 0.0063 day- 1]			100~1386 日										experimental result		x		Borden RC et al; Water Resour Res 33: 1105-15 (1997)	Environmental Biodegradation:	
43	水域	生分解 (好氣的)					1~2 %									experimental result		x		Wilson JT et al; Devel Indust Microbiol 24: 225-33 (1983)	Environmental Biodegradation:	
44	土壌	生分解 (好氣的)					90 % [in 4 weeks [in soil cores at various depths both above and below the water table]										experimental result		x		McNabb JF et al; 81st Ann Mtg Amer Soc Microbiology p.213 (1981) Wilson JT et al; Ground Water 21: 134-42 (1983)	Environmental Biodegradation:
45	水域	生分解 (好氣的)				12 日										experimental result		x		Button DK et al; Appl Environ Microbiol 42: 708-19 (1981)	Environmental Biodegradation:	
46	水域	生分解 (好氣的)				30 日 [in oil- polluted water]										experimental result		x		Lee RF; 1977 Oil Spill Conf Amer Petrol Inst p 611-6 (1977)	Environmental Biodegradation:	
47	水域	生分解 (好氣的)				90 日 [uncontaminated estuarine water]										experimental result		x		Lee RF; 1977 Oil Spill Conf Amer Petrol Inst p 611-6 (1977)	Environmental Biodegradation:	
48	大気	OHラジカルとの反応		5.96E-12 cm ³ /molecule/sec					25 °C							-		x		[Atkinson R; J Phys Chem Ref Data Monograph No. 2 (1994)] **PEER REVIEWED**	Other Chemical/Physical Properties:	

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタターの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタター該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
49	水域	生分解 (嫌 氣的)	0.045 1/日[A first-order biodegradati on rate constant of 0.045 day ⁻¹]			15 日										experimen tal result		x		Borden RC et al; Anaerobic Biodegradation of BTEX in Aquifer Material USEPA/600/S-97/003. National Risk Management Laboratory, Ada, OK, pp. 9 (1997)	Environmental Biodegradation:
50	Mackay	大気	OHラジカ ルとの反応			10~104 時 間										experimen tal result		x		Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Eds. (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers, Chelsea, MI.	p.431
51		底質	生分解 (嫌 氣的)			1344~5040 時間					based on anaerobic screening test data and anaerobic sediment grab sample data					experimen tal result		o		Horowitz, A., Shelton, D.R., Cornell, C.P., Tiedje, J.M. (1982) Anaerobic degradation of aromatic compounds in sediment and digested sludge. Dev. Ind. Microbiol. 23, 435-444. Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Eds. (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers, Chelsea, MI.	p.431
52		水域	生分解	0.07 1/年		39 日										-		x		Zoeteman, B.C.J., De Greef, E., Brinkmann, F.J.J. (1981) Persistency of organic contaminants in groundwater. Lessons from soil pollution incidents in the Netherlands. Sci. Total Environ. 21, 187-202. Olsen, R.L., Davis, A. (1990) Predicting the fate and transport of organic compounds in groundwater. Hazard. Mat. Control 3, 40-64.	p.431
53		水域	生分解 (好 氣的)	0.5 1/日												-		x		Tabak, H.H., Quave, S.A., Moshni, C.I., Barth, E.F. (1981) Biodegradability studies with organic priority pollutant compounds. J. Water Pollut. Control Fed. 53, 1503-1518. Mills, W.B., Dean, J.D., Porcella, D.B., Gherini, S.A., Hudson, R.J.M., Frick, W.E., Rupp, G.L., Bowie, G.L. (1982) Water Quality Assessment: A Screening Procedure for Toxic and Conventional Pollutants, Part 1, U.S. EPA, EPA-600/6-82-004a.	p.431
54		水域	生分解			30 日[in oil polluted water]										experimen tal result		x		Lee, R.F. (1977) Oil Spill Conference, Am. Petroleum Institute pp. 611-616.	p.431
55		水域	生分解			90 日[in uncontamin ated estuarine water]										experimen tal result		x		Lee, R.F. (1977) Oil Spill Conference, Am. Petroleum Institute pp. 611-616.	p.431
56		水域	生分解				100 % [after 192 h]		13 °C							-		x		Jamison, V.W., Raymond, R.L., Hudson, J.O. (1978) Biodegradation of high octane gasoline. Proceedings of The Third International Biodegradation Symposium, J.M. Sharpley, A.M. Kaplan Eds., pp. 187-196.	p.431

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
57	水域	生分解 (好氣的)				96~528 時間					その他,acclimated seawater dieaway test					experimental result		x		Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Eds. (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers, Chelsea, MI.	p.431
58	大気	OHラジカルとの反応		5.50E-12 cm ³ /molecule/sec					298 K		その他,SAR					estimated by calculation		x		Müller, M., Klein, W. (1992) Comparative evaluation of methods predicting water solubility for organic compounds. Chemosphere 25, 769-782.	p.431
59	大気	OHラジカルとの反応		5.96E-12 cm ³ /molecule/sec					298 K							-		x		Atkinson, R. (1989) Kinetics and Mechanisms of the gas-phase reactions of the hydroxyl radical with organic compounds. J. Phys. Chem. Data Monograph No. 1. Atkinson, R. (1990) Gas-phase tropospheric chemistry of organic compounds: a review. Atmos. Environ. 24A, 1-41.	p.431
60	大気	硝酸ラジカルとの反応		7.8E-17±1.5E-17 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]		その他,relative rate method					experimental result		x		Atkinson, R., Aschmann, S.M. (1988) Kinetics of the reactions of acenaphthene and acenaphthylene and structurally-related aromatic compounds with OH and NO3 radicals, N2O5 and O3 at 296 ± 2 K. Int. J. Chem. Kinet. 20, 513-539.	p.431
61	大気	OHラジカルとの反応		6.19E-12 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]		その他,relative rate method					experimental result		x		Atkinson, R., Aschmann, S.M. (1988) Kinetics of the reactions of acenaphthene and acenaphthylene and structurally-related aromatic compounds with OH and NO3 radicals, N2O5 and O3 at 296 ± 2 K. Int. J. Chem. Kinet. 20, 513-539.	p.431
62	大気	OHラジカルとの反応		4.79E-12 cm ³ /molecule/sec							その他,based on molecular orbital calculations					estimated by calculation		x		Klamt, A. (1993) Estimation of gas-phase hydroxyl radical rate constants of organic compounds from molecular orbital calculations. Chemosphere 26, 1273-1289.	p.431
63	水域	生分解 (好氣的)				4 日										-		x		Capel, P.D., Larson, S.J. (1995) A chemodynamic approach for estimating losses of target organic chemicals from water during sample holding time. Chemosphere 30, 1097-1107.	p.431
64	水域	生分解 (嫌氣的)				56 日										-		x		Capel, P.D., Larson, S.J. (1995) A chemodynamic approach for estimating losses of target organic chemicals from water during sample holding time. Chemosphere 30, 1097-1107.	p.431
65	土壌	生分解				172 時間[in sand]										-		x		Davis, J.W., Madsen, S. (1996) Factors affecting the biodegradation of toluene in soil. Chemosphere 33, 107-130.	p.431
66	土壌	生分解				165 時間[in sand]										-		x		Davis, J.W., Madsen, S. (1996) Factors affecting the biodegradation of toluene in soil. Chemosphere 33, 107-130.	p.431

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
67	大気	総括分解				4.6 時間			300 K							-		x		Doyle, G.J., Lloyd, A.C., Darnall, K.R., Winer, A.M., Pitts, J.N. Jr. (1975) Gas phase kinetic study of relative rates of reaction of selected aromatic compounds with hydroxyl radicals in an environmental chamber. Environ. Sci. Technol. 9, 237-241.	p.431
68	大気	総括分解				2.4~24 時間										-		x		Darnall, K.R., Lloyd, A.C., Winer, A.M., Pitts, J.N. (1976) Reactivity scale for atmospheric hydrocarbons based on reaction with hydroxyl radicals. Environ. Sci. Technol. 10, 692-696.	p.431
69	大気	総括分解				10~104 時間										-		x		Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Eds. (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers, Chelsea, MI.	p.431
70	水域	総括分解				5.55 時間			25 °C							-		x		Mackay, D., Leinonen, P.J. (1975) Rate of evaporation of low-solubility contaminants from water to atmosphere. Environ. Sci. Technol. 7, 1178-1180. Haque, R., Falco, J., Cohen, S., Riordan, C. (1980) Role of transport and fate studies in the exposure, assessment and screening of toxic chemicals. In: Dynamics, Exposure and Hazard Assessment of Toxic Chemicals. Haque, R., Ed., pp. 47-67. Ann Arbor Sci. Publ., Ann Arbor, MI.	p.431
71	水域	総括分解				96~528 時間										-		x		Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Eds. (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers, Chelsea, MI.	p.431
72	土壌	総括分解				10 日										-		x		Ryan, J.A., Bell, R.M., Davidson, J.M., O'Connor, G.A. (1988) Plant uptake of non-ionic organic chemicals from soils. Chemosphere 17, 2299-2323.	p.431
73	土壌	総括分解				5 日										-		x		Jury, W.A., Russo, D., Streile, G., El Abd, H. (1990) Evaluation of volatilization by organic chemicals residing below the soil surface. Water Resources Res. 26, 13-26.	p.431
74	大気	OHラジカルとの反応		6.0E-12 cm ³ /molecule/sec												-		x		Singh, H.B., Salas, L.J., Smith, A.J., Shigeishi, H. (1981) Measurements of some potentially hazardous organic chemicals in urban environments. Atmos. Environ. 15, 601-612.	p.430
75	大気	オゾンとの反応		<0.01E-18 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]		その他,relative rate method					-	experimetal result	x		Atkinson, R., Aschmann, S.M. (1988) Kinetics of the reactions of acenaphthene and acenaphthylene and structurally-related aromatic compounds with OH and NO ₃ radicals, N ₂ O ₅ and O ₃ at 296 ± 2 K. Int. J. Chem. Kinet. 20, 513-539.	p.431

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
76	土壌	生分解				31~220 時間[in sandy loam soil]										-		x		Davis, J.W., Madsen, S. (1996) Factors affecting the biodegradation of toluene in soil. Chemosphere 33, 107-130.	p.431
77	大気	硝酸ラジカルとの反応		$\leq 3E-14$ cm ³ /molecule/sec					300±1 K							-		x		Carter, W.P.L., Winer, A.M., Pitts, Jr., J.N. (1981) Major atmospheric sink for phenol and the cresols. Reaction with the nitrate radical. Environ. Sci. Technol. 15, 829-831.	p.430
78	水域	光分解	3.39E-3 1/時間[with H2O2 under photolysis at 25°C in F-113 solution and with HO ₂ in the gas]						25 °C							-		x		Dilling, W.L., Gonsior, S.J., Boggs, G.U., Mendoza, C.G. (1988) Organic photochemistry. 20. A method for estimating gas-phase rate constants for reactions of hydroxyl radicals with organic compounds from their relative rates of reaction with hydrogen peroxide under photolysis in 1,1,2-trichlorotrifluoroethane solution. Environ. Sci. Technol. 22, 1447-1553.	p.430
79	大気	OHラジカルとの反応		2.5E+9±0.9E+9 L/molecule/sec		4.6 時間			[at room temp.]		その他,relative rate method					experimental result		x		Doyle, G.J., Lloyd, A.C., Darnall, K.R., Winer, A.M., Pitts, J.N. Jr. (1975) Gas phase kinetic study of relative rates of reaction of selected aromatic compounds with hydroxyl radicals in an environmental chamber. Environ. Sci. Technol. 9, 237-241. Lloyd, A.C., Darnall, K.R., Winer, A.M., Pitts, Jr., J.N. (1976) Relative rate constants for reaction of the hydroxyl radical with a series of alkanes, alkenes, and aromatic hydrocarbons. J. Phys. Chem. 80, 789-794.	p.430
80	大気	OHラジカルとの反応		5.7E-12 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]		その他,flash photolysis-resonance fluorescence					experimental result		o		Hansen, D.A., Atkinson, R., Pitts, J.N. Jr. (1975) Rate constants for the reaction of OH radicals with a series of aromatic hydrocarbons. J. Phys. Chem. 79, 1763-1766.	p.430
81	大気	オゾンとの反応		0.75E-13 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]		その他					experimental result		x		Hansen, D.A., Atkinson, R., Pitts, J.N. Jr. (1975) Rate constants for the reaction of OH radicals with a series of aromatic hydrocarbons. J. Phys. Chem. 79, 1763-1766.	p.430
82	大気	OHラジカルとの反応		3.6E+9 L/molecule/sec		2.4~24 時間			[at room temp.]							-		x		Darnall, K.R., Lloyd, A.C., Winer, A.M., Pitts, J.N. (1976) Reactivity scale for atmospheric hydrocarbons based on reaction with hydroxyl radicals. Environ. Sci. Technol. 10, 692-696.	p.430
83	大気	OHラジカルとの反応		6.40E-12±0.64E-12 cm ³ /molecule/sec					[at room temp. measured over temp range 296-473 K]		その他,flash photolysis-resonance fluorescence					experimental result		x		Perry, R.A., Atkinson, R., Pitts, J.N. (1977) Kinetics and mechanisms of the gas phase reaction of the hydroxyl radicals with aromatic hydrocarbons over temperature range 296-473 K. J. Phys. Chem. 81, 296-304.	p.430
84	大気	OHラジカルとの反応		3.5E+9 M-1s-1		1.6 日										-		x		Mill, T. (1982) Hydrolysis and oxidation processes in the environment. Environ. Toxicol. Chem. 1, 135-141.	p.430

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
85	大気	OHラジカルとの反応		6E-12 cm ³ /molecule/sec					300±1 K							-		x		Carter, W.P.L., Winer, A.M., Pitts, Jr., J.N. (1981) Major atmospheric sink for phenol and the cresols. Reaction with the nitrate radical. Environ. Sci. Technol. 15, 829-831.	p.430
86	大気	OHラジカルとの反応		6.19E-12 cm ³ /molecule/sec					298 K							-		x		Atkinson, R., Aschmann, S.M., Pitts, J.N. Jr. (1988) Rate constants for the gas-phase reactions of the NO ₃ radicals with a series of organic compounds at 296 ± 2 K. J. Phys. Chem. 92, 3454-3457. Sabljic, A., Gusten, H. (1990) Predicting the nighttime NO ₃ radical reactivity in the troposphere. Atmos. Environ. 24A, 73-78. Müller, M., Klein, W. (1992) Comparative evaluation of methods predicting water solubility for organic compounds. Chemosphere 25, 769-782.	p.431
87	大気	オゾンとの反応		160 cm ³ /molecule/sec					300 K							-		x		Lyman, W.J., Reehl, W.F., Rosenblatt, D.H. (1982) Handbook of Chemical Property Estimation Methods, McGraw-Hill, New York.	p.430
88	大気	オゾンとの反応		<1.0E-20 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]							-		x		Atkinson, R., Carter, W.L. (1984) Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of ozone with organic compounds under atmospheric conditions. Chem. Rev. 84, 437-470.	p.430
89	大気	OHラジカルとの反応		6.4E-12 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]							-		x		Atkinson, R., Carter, W.L. (1984) Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of ozone with organic compounds under atmospheric conditions. Chem. Rev. 84, 437-470.	p.430
90	大気	硝酸ラジカルとの反応		3.7E-17 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]							-		x		Atkinson, R., Carter, W.L. (1984) Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of ozone with organic compounds under atmospheric conditions. Chem. Rev. 84, 437-470.	p.430
91	大気	OHラジカルとの反応		6.19E-12 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]							-	experimental result	x		Atkinson, R. (1987) Structure-activity relationship for the estimation of the rate constants for the gas phase reactions of OH radicals with organic compounds. Int. J. Chem. Kinetics 19, 799-828.	p.431
92	大気	OHラジカルとの反応		6.19E-12 cm ³ /molecule/sec[recommended]					298 K							-		x			p.430
93	大気	OHラジカルとの反応		5.9E-12 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]		その他,SAR [structure-activity relationship]					-	estimated by calculation	x		Atkinson, R. (1985) Kinetics and mechanisms of the gas phase reaction of hydroxyl radicals with organic compounds under atmospheric conditions. Chem. Rev. 85, 69-201.	p.430

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
94	大気	OHラジカルとの反応		5.7E-12 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]							experimental result		x		Atkinson, R. (1985) Kinetics and mechanisms of the gas phase reaction of hydroxyl radicals with organic compounds under atmospheric conditions. Chem. Rev. 85, 69-201.	p.430
95	大気	OHラジカルとの反応		5.7E-12 cm ³ /molecule/sec		10~104 時間										-		x		Atkinson, R. (1985) Kinetics and mechanisms of the gas phase reaction of hydroxyl radicals with organic compounds under atmospheric conditions. Chem. Rev. 85, 69-201. Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M., Eds. (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers, Chelsea, MI.	p.430
96	大気	オゾンとの反応		<1.0E-20 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]							-		x		Atkinson, R. (1985) Kinetics and mechanisms of the gas phase reaction of hydroxyl radicals with organic compounds under atmospheric conditions. Chem. Rev. 85, 69-201.	p.430
97	大気	OHラジカルとの反応		6.2E-12 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]							-		x		Atkinson, R. (1985) Kinetics and mechanisms of the gas phase reaction of hydroxyl radicals with organic compounds under atmospheric conditions. Chem. Rev. 85, 69-201.	p.430
98	大気	硝酸ラジカルとの反応		3.6E-17 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]							-		x		Atkinson, R. (1985) Kinetics and mechanisms of the gas phase reaction of hydroxyl radicals with organic compounds under atmospheric conditions. Chem. Rev. 85, 69-201.	p.430
99	大気	OHラジカルとの反応		6.03E-12 cm ³ /molecule/sec					298 K		その他,relative rate method					experimental result		x		Ohta, T., Ohyama, T. (1985) A set of rate constants for the reactions of hydroxyl radicals with aromatic hydrocarbons. Bull. Chem. Soc. Jpn. 58, 3029-3030.	p.430
100	大気	OHラジカルとの反応		5.35E-12 cm ³ /molecule/sec					24.2 °C							-		x		Edney, E.L., Kleindienst, T.E., Corse, E.W. (1986) Room temperature rate constants for the reaction of OH with selected chlorinated and oxygenated hydrocarbons. Int. J. Chem. Kinet. 18, 1355-1371.	p.430
101	大気	OHラジカルとの反応		5.5E-12 cm ³ /molecule/sec					[at room temp.]		その他,SAR structure-activity relationship					estimated by calculation		x		Atkinson, R. (1987) Structure-activity relationship for the estimation of the rate constants for the gas phase reactions of OH radicals with organic compounds. Int. J. Chem. Kinetics 19, 799-828.	p.431

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等	
102	大気	硝酸ラジカルとの反応		1.8E-17 cm ³ /molecu le/sec					296 K							-		x		Atkinson, R., Carter, W.L., Plum, C.N., Winer, A.M., Pitts, Jr., J.N. (1984) Kinetics of the gas-phase reactions of NO3 radicals with a series of aromatics at 296 ± 2 K. Int. J. Chem. Kinet. 16, 887-898.	p.430	
103	大気	硝酸ラジカルとの反応		6.46E-17 cm ³ /molecu le/sec					298 K							-		x		Atkinson, R., Aschmann, S.M., Pitts, J.N. Jr. (1988) Rate constants for the gas-phase reactions of the NO3 radicals with a series of organic compounds at 296 ± 2 K. J. Phys. Chem. 92, 3454-3457. Sabljic, A., Gu sten, H. (1990) Predicting the night-time NO3 radical reactivity in the troposphere. Atmos. Environ. 24A, 73-78. Muller, M., Klein, W. (1992) Comparative evaluation of methods predicting water solubility for organic compounds. Chemosphere 25, 769-782.	p.431	
104	MOE初期評価	大気	OHラジカルとの反応	6.1E-12 cm ³ /molecu le/sec	5.0E+5~ 1.0E+6 molecul/c m ³	1~3 日		1.75355996								-		x		(財)化学品検査協会 (1997) 化学物質ハザード・データ集 Atkinson R. (1989) Evaluated Kinetic and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry, Suppl. Ⅲ	p.1	
105		水域	加水分解													-		x		(財)化学品検査協会 (1997) 化学物質ハザード・データ集	p.1	
106		水域	生分解 (好氣的)				112~119 %											x		(財)化学品検査協会 (1992) 化審法の既存化学物質安全性点検データ集	p.1	
107	NIST	大気	OHラジカルとの反応	6.96E-12 cm ³ /molecu le/sec[Reacti on order: 2][Temperatur e: 200 - 300 K][Rate expression: 3.8x10 ⁻¹² [cm ³ /mol ecule s] e ¹⁴⁹⁷ [J/mole]/RT] Uncertainty: 2.50999999]					298 K								-	Review	x		Evaluated kinetic data for combustion modelling, Baulch, D.L.; Cobos, C.J.; Cox, R.A.; Esser, C.; Frank, P.; Just, Th.; Kerr, J.A.; Pilling, M.J.; Troe, J.; Walker, R.W.; Warnatz, J. J. Phys. Chem. Ref. Data 21, 411 (1992).	Toluene+OH→ Adduct

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
108	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 400 - 1200 K Rate expression: 2.56x10^-12[cm^3/molecule s] (T/298 K)^1.00e^-3658 [J/mole]/RT Uncertainty: 3.20000005]												-	Review	x		Evaluated kinetic data for combustion modelling. Supplement I, Baulch, D.L.; Cobos, C.J.; Cox, R.A.; Frank, P.; Hayman, G.; Just, Th.; Kerr, J.A.; Murrells, T.; Pilling, M.J.; Troe, J.; Walker, R.W.; Warnatz, J. J. Phys. Chem. Ref. Data 23, 847 (1994).	Toluene+OH→Benzyl+H2O
109	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 400 - 1200 K Rate expression: 2.57x10^-12[cm^3/molecule s] (T/298 K)^1.00e^-3658 [J/mole]/RT Uncertainty: 3.20000005]												-	Review	x		Evaluated kinetic data for combustion modelling. Baulch, D.L.; Cobos, C.J.; Cox, R.A.; Esser, C.; Frank, P.; Just, Th.; Kerr, J.A.; Pilling, M.J.; Troe, J.; Walker, R.W.; Warnatz, J. J. Phys. Chem. Ref. Data 21, 411 (1992).	Toluene+OH→Benzyl+H2O
110	大気	OHラジカルとの反応		7.01e-13±9.8e-14 cm^3/molecule/sec[Reaction order: 2 Temperature: 338 K Pressure: 0.65 bar Rate expression: 7.01x10^-13[±9.8x10^-14cm^3/molecule s] Bath gas: H2O]					338 K		その他,Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	x		UV spectra and kinetics of radicals produced in the gas phase reactions of Cl, F and OH with toluene. Markert, F.; Pagsberg, P. Chem. Phys. Lett. 209, 445 (1993).	Toluene+OH→Benzyl+H2O

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
111	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 299 - 1050 K Pressure: 0.13 bar Rate expression: 9.51x10^-13± 2.16x10^-13cm^3/mole cule s] (T/298 K)^2.00e^-1995 [±499 J/mole]/RT Bath gas: Ar]							その他_Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	×		Adduct formation of OH radicals with benzene, toluene, and phenol and consecutive reactions of the adducts with NO₂ and O₂ Krnispel, R.; Koch, R.; Siese, M.; Zetzsch, C. Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 94, 1375 (1990).	Toluene+OH→Benzyl+H2O
112	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 500 - 1000 K Pressure: 0.13 - 0.27 bar Rate expression: 2.09x10^-11± 6.14x10^-12cm^3/mole cule s] e^-10809 [± 1621 J/mole]/RT Bath gas: Ar]							その他_Data type: Absolute value measured directly					experimental result	Experiment	×		Kinetics of the reactions of hydroxyl radical with benzene and toluene, Tully, F.P.; Ravishankara, A.R.; Thompson, R.L.; Nicovich, J.M.; Shah, R.C.; Kreuffer, N.M.; Wine, P.H. J. Phys. Chem. 85, 2262 (1981).	Toluene+OH→Benzyl+H2O
113	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 213 - 298 K Pressure: 0.13 - 0.27 bar Rate expression: 3.8x10^-12± 2.49x10^-12cm^3/mole cule s] e^1497 [± 1405 J/mole]/RT Bath gas: Ar]							その他_Data type: Absolute value measured directly					experimental result	Experiment	×		Kinetics of the reactions of hydroxyl radical with benzene and toluene, Tully, F.P.; Ravishankara, A.R.; Thompson, R.L.; Nicovich, J.M.; Shah, R.C.; Kreuffer, N.M.; Wine, P.H. J. Phys. Chem. 85, 2262 (1981).	Toluene+OH→Benzyl+H2O

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
114	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2][Temperature: 380 - 473 K][Pressure: 0.13 bar][Rate expression: 5.01x10^-12[cm^3/molecule s] e^-3766 [44182 J/mole]/RT][Uncertainty: 3.1600009][Bath gas: Ar]							その他_Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	x		Kinetics and mechanism of the gas phase reaction of OH radicals with aromatic hydrocarbons over the temperature range 296-473 K, Perry, R.A.; Atkinson, R.; Pitts, J.N., Jr. J. Phys. Chem. 81, 296 (1977).	Toluene+OH→Benzyl+H2O
115	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2][Reference reaction: Toluene+OH→Products][Reference reaction order: 2][Temperature: 298 K][Pressure: 0.21 bar][Rate expression: 5.4x10^-2±1.2x10^-2][Pressure dependence: None reported]							その他_Data type: Relative rate value measured					experimental result	Experiment	x		Dealkylation of Alkylbenzenes: A Significant Pathway in the Toluene, o-, m-, p-Xylene plus OH Reaction, Noda, J.; Volkamer, R.; Molina, M.J. J. Phys. Chem. A 113, 9658 (2009).	Toluene+OH→Phenol+CH3
116	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2][Reference reaction: (CH3)2CHC(H)(CH3)2+OH→Other Products+H2O][Reference reaction order: 2][Temperature: 284 - 363 K][Pressure: 0.94 - 1.01 bar][Rate expression: 1.26x10^-1e±5105 [±923 J/mole]/RT][Bath gas: N2]							その他_Data type: Relative rate value measured					experimental result	Experiment	x		The temperature dependence of the OH radical reactions with some aromatic compounds under simulated tropospheric conditions, Semadeni, M.; Stocker, D.W.; Kerr, J.A. Int. J. Chem. Kinet. 27, 287 (1995).	Toluene+OH→Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件 温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
117	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 700 - 1900 K Pressure: 1.09 - 1.82 bar Rate expression: 5.6x10 ⁻¹⁴ [cm ³ /mole s] (T/298 K) ^{2.69e⁻³⁸⁵⁸} [J/mole]/RT Uncertainty: 1.35000002 Pressure dependence: None reported]							その他_Data type: Transition state theory					estimated by calculation	Theory	x		High-temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene. Seta, T.; Nakajima, M.; Miyoshi, A. J. Phys. Chem. A 110, 5081 (2006).	Toluene+OH→Phenyl, 3-methyl+H2O
118	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 700 - 1900 K Pressure: 1.09 - 1.82 bar Rate expression: 2.47x10 ⁻¹⁴ [cm ³ /mole s] (T/298 K) ^{2.61e⁻¹²⁹⁷} [J/mole]/RT Uncertainty: 1.35000002 Pressure dependence: None reported]							その他_Data type: Transition state theory					estimated by calculation	Theory	x		High-temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene. Seta, T.; Nakajima, M.; Miyoshi, A. J. Phys. Chem. A 110, 5081 (2006).	Toluene+OH→H2O+Phenyl, 2-methyl-

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
119	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 700 - 1900 K Pressure: 1.09 - 1.82 bar Rate expression: 1.1x10 ⁻¹⁴ [cm ³ /mole s] (T/298 K) ^{3.37e⁻¹⁹747} [J/mole]/RT Uncertainty: 2.0 Pressure dependence: None reported]							その他,Data type: Transition state theory					estimated by calculation	Theory	x		High-temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene. Seta, T.; Nakajima, M.; Miyoshi, A. J. Phys. Chem. A 110, 5081 (2006).	Toluene+OH→methyphenol (unspecified isomer) +H·
120	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Reference reaction: Toluene+OH→Products Reference reaction order: 2 Temperature: 298 K Pressure: 0.21 bar Rate expression: 1.77x10 ⁻¹¹ ± 2.1x10 ⁻¹² Pressure dependence: None reported]							その他,Data type: Relative rate value measured					experimental result	Experiment	x		Dealkylation of Alkylbenzenes: A Significant Pathway in the Toluene, o-, m-, p-Xylene plus OH Reaction. Noda, J.; Volkamer, R.; Molina, M.J. J. Phys. Chem. A 113, 9658 (2009).	Toluene+OH→methyphenol (unspecified isomer) +H·

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価II)	備考	文献	ページ番号等
121	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 700 - 1900 K Pressure: 1.09 - 1.82 bar Rate expression: 7.8x10^-15[cm^3/molecule s] (T/298 K)^3.24e^-22175 [J/mole]/RT Uncertainty: 2.0 Pressure dependence: None reported]							その他,Data type: Transition state theory					estimated by calculation	Theory	x		High-temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene, Seta, T.; Nakajima, M.; Miyoshi, A. J. Phys. Chem. A 110, 5081 (2006).	Toluene+OH→3-Methylphenol+H-
122	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 700 - 1900 K Pressure: 1.09 - 1.82 bar Rate expression: 1.78x10^-14[cm^3/molecule s] (T/298 K)^2.88e^-13478 [J/mole]/RT Uncertainty: 2.0 Pressure dependence: None reported]							その他,Data type: Transition state theory					estimated by calculation	Theory	x		High-temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene, Seta, T.; Nakajima, M.; Miyoshi, A. J. Phys. Chem. A 110, 5081 (2006).	Toluene+OH→Phenol+CH3

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
123	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 700 - 1900 K Pressure: 1.09 - 1.82 bar Rate expression: 4.31x10^-15[cm^3/molecule s] (T/298 K)^3.23e^-24 20 [J/mole]/RT Uncertainty: 2.0 Pressure dependence: None reported]							その他,Data type: Transition state theory					estimated by calculation	Theory	x		High-temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene, Seta, T.; Nakajima, M.; Miyoshi, A. J. Phys. Chem. A 110, 5081 (2006).	Toluene+OH→4-Methylphenol+H
124	大気	OHラジカルとの反応		1.0e-11 cm^3/molecule/sec Reaction order: 2 Temperature: 299 K Rate expression: 1.0x10^-11[cm^3/molecule s]]					299 K		その他,Data type: Transition state theory					estimated by calculation	Theory	x		Theoretical Study of OH Addition Reaction to Toluene, Suh, I.; Zhang, D.; Zhang, R.; Molina, L.T.; Molina, M.J. Chem. Phys. Lett. 364, 454 (2002).	Toluene+OH→Products
125	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 700 - 1900 K Pressure: 1.09 - 1.82 bar Rate expression: 1.89x10^-13[cm^3/molecule s] (T/298 K)^2.78e^3367 [J/mole]/RT Uncertainty: 1.35000002 Pressure dependence: None reported]							その他,Data type: Transition state theory					estimated by calculation	Theory	x		High-temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene, Seta, T.; Nakajima, M.; Miyoshi, A. J. Phys. Chem. A 110, 5081 (2006).	Toluene+OH→Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
126	大気	OHラジカルとの反応		2.23E-13 cm ³ /molecule/sec[Reaction order: 2][Temperature: 275 - 1000 K][Rate expression: 1.03x10 ⁻¹¹ [cm ³ /molecule s] e ^{-9498 [J/mole]/RT]}					298 K		その他_Data type: Transition state theory					estimated by calculation	Theory	×		Theoretical determination of the rate constant for OH hydrogen abstraction from toluene, Uc, V.H.; Alvarez-Idaboy, J.R.; Galano, A.; Garcia-Cruz, I.; Vivier-Bunge, A. J. Phys. Chem. A 110, 10155 (2006).	Toluene+OH→Products
127	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2][Reference reaction: n-C4H10+OH→Other Products+H2O][Reference reaction order: 2][Temperature: 304 K][Pressure: 1.01 bar][Rate expression: 1.4±6.0x10 ⁻¹¹ [Bath gas: N2]							その他_Data type: Relative rate value measured					experimental result	Experiment	×		Gas phase kinetic study of relative rates of reaction of selected aromatic compounds with hydroxyl radicals in an environmental chamber. Doyle, G.J.; Lloyd, A.C.; Darnall, K.R.; Winer, A.M.; Pitts, J.N., Jr. Environ. Sci. Technol. 9, 237 (1975).	Toluene+OH→Products
128	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2][Reference reaction: H2+OH→H2O+H][Reference reaction order: 2][Temperature: 773 K][Pressure: 0.67 bar][Rate expression: 7.0±7.7x10 ⁻¹¹ [Bath gas: N2]							その他_Data type: Relative rate value measured					experimental result	Experiment	×		Addition of benzene and toluene to slowly reacting mixtures of hydrogen and oxygen at 773K. Baldwin, R.R.; Scott, M.; Walker, R.W. Symp. Int. Combust. Proc. 21, 991 (1968).	Toluene+OH→Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
129	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2][Reference reaction: CH3CH=CH2 + OH → Products][Reference reaction order: 2][Temperature: 296 K][Pressure: 0.98 bar][Rate expression: 2.06x10 ⁻¹¹ ± 6.2x10 ⁻⁶][Bath gas: N2]							その他,Data type: Relative rate value measured					experimental result	Experiment	x		Rate constants for the gas-phase reactions of the OH radical with a series of aromatic hydrocarbons at 296 ± 2 K, Atkinson, R.; Aschmann, S.M. Int. J. Chem. Kinet. 21, 355 (1989).	Toluene+OH→ Products
130	大気	OHラジカルとの反応		5.70E-12 cm ³ /molecule/sec[Reaction order: 2][Temperature: 298 K][Pressure: 1.01 bar][Rate expression: 5.7x10 ⁻¹² ± 1.9x10 ⁻⁶][Bath gas: N2][Pressure dependence: None reported]					298 K		その他,Data type: Absolute value measured directly					experimental result	Experiment	x		Formation of Peroxy Radicals from OH-Toluene Adducts and O ₂ [sub>2</sub>], Bohn, B. J. Phys. Chem. A 105, 6092 (2001).	Toluene+OH→ OH-toluene adduct

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
131	大気	硝酸ラジカルとの反応		5.90E-12 cm ³ /mole le/sec[Publis her address:]Comments:]Reaction order: 2]Reference reaction: (CH ₃) ₂ S+NO 3→ Products]Te mperature: 299 K]Pressure: 0.13 bar]Rate expression: 5.9x10 ⁻¹² [± 4.0x10 ⁻ 13cm ³ /mole cule s]Pressure dependence: None reported]					298 K		その他,Data type: Relative value normalized by a reference value					experimen tal result	Experiment	x		Determination of the rate constants of the reactions of NO ₃ radical with CF ₃ I and I(2P ₃ /2), Nakano, Y.; Sadamori, K.; Ishiwata, T. Int. J. Chem. Kinet. 44, 649 (2012).	Toluene+NO ₃ → Products
132	大気	硝酸ラジカルとの反応		[Reaction order: 2]Reference reaction: n- C ₇ H ₁₆ +NO ₃ → Products]Ref erence reaction order: 2]Temperatur e: 296 K]Pressure: 0.99 bar]Rate expression: 5.7x10 ⁻¹ ± 6.3x10 ⁻ 2]Bath gas: N ₂]							その他,Data type: Relative rate value measured					experimen tal result	Experiment	x		Kinetics of the reactions of acenaphthene and acenaphthylene and structurally-related aromatic compounds with OH and NO ₃ radicals, N ₂ O ₅ and O ₃ at 296 ± 2 K, Atkinson, R.; Aschmann, S.M. Int. J. Chem. Kinet. 20, 513 (1988).	Toluene+NO ₃ → Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
133	大気	硝酸ラジカルとの反応		[Publisher address: 1]Comments: 1]Reaction order: 2]Reference reaction: (CH3)2S+NO3→ 3→ Products]Reference reaction order: 2]Temperature: 299 K[Pressure: 0.13 bar[Rate expression: 4.6±1.0x10^-1]Pressure dependence: None reported]							その他,Data type: Relative rate value measured					experimental result	Experiment	x		Determination of the rate constants of the reactions of NO3 radical with CF3I and I(2P3/2), Nakano, Y.; Sadamori, K.; Ishiwata, T. Int. J. Chem. Kinet. 44, 649 (2012).	Toluene+NO3→ Products
134	大気	硝酸ラジカルとの反応		3.01e-15 cm^3/molecule/sec[Reaction order: 2]Reference reaction: CH3CH=CH2+NO3→ Products]Temperature: 300 K[Pressure: 1.01 bar[Rate expression: 3.01x10^-15[cm^3/molecule s][Bath gas: N2]					300 K		その他,Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	x		Major atmospheric sink for phenol and the cresols. Reaction with the nitrate radical, Carter, W.P.L.; Winer, A.M.; Pitts, J.N., Jr. Environ. Sci. Technol. 15, 829 (1981).	Toluene+NO3→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価II)	備考	文献	ページ番号等
135	大気	硝酸ラジカルとの反応		1.79e-17 cm ³ /mole ² /sec[Reaction order: 2][Reference reaction: n-C7H16+NO3 → Products][Temperature: 296 K][Pressure: 0.99 bar][Rate expression: 1.79x10 ⁻¹⁷ ±1.01x10 ⁻¹⁷ cm ³ /mole ²][Bath gas: N2]					296 K		その他 Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	○		Kinetics of the gas-phase reactions of NO ₃ radicals with a series of aromatics at 296 ± 2 K, Atkinson, R.; Carter, W.P.L.; Plumb, C.N.; Winer, A.M.; Pitts, J.N., Jr. Int. J. Chem. Kinet. 16, 887 (1984).	Toluene+NO3→ Products
136	大気	硝酸ラジカルとの反応		2.01E-17 cm ³ /mole ² /sec[Reaction order: 2][Reference reaction: C2H4+NO3 → Products][Temperature: 298 K][Pressure: 0.99 bar][Rate expression: 2.01x10 ⁻¹⁷ ±1.1x10 ⁻¹⁷ cm ³ /mole ²][Bath gas: N2]					298 K		その他 Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	×		Rate constants for the gas-phase reactions of nitrate radicals with a series of organics in air at 298 ± 1 K, Atkinson, R.; Plum, C.N.; Carter, W.P.L.; Winer, A.M.; Pitts, J.N., Jr. J. Phys. Chem. 88, 1210 (1984).	Toluene+NO3→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
137	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 700 - 1900 K Pressure: 1.09 - 1.82 bar Rate expression: 2.89x10 ⁻¹⁴ [cm ³ /molecule s] (T/298 K) ^{2.00} 2536 [J/mole]/RT Uncertainty: 1.3500002 Pressure dependence: None reported]							その他_Data type: Transition state theory					estimated by calculation	Theory	x		High-temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene. Seta, T.; Nakajima, M.; Miyoshi, A. J. Phys. Chem. A 110, 5081 (2006).	Toluene+OH→Phenyl, 4-methyl+H2O
138	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Reference reaction: Toluene+OH→Products Reference reaction order: 2 Temperature: 298 K Pressure: 8.00E-3 - 1.60E-2 bar Rate expression: 1.5x10 ^{-1±} 1.9x10 ⁻¹ Bath gas: Ar]							その他_Data type: Relative rate value measured					experimental result	Experiment	x		Gas-phase hydroxyl radical reactions. Products and pathways for the reaction of OH with aromatic hydrocarbons. Kenley, R.A.; Davenport, J.E.; Hendry, D.G. J. Phys. Chem. 85, 2740 (1981).	Toluene+OH→Benzyl+H2O
139	大気	硝酸ラジカルとの反応		6.79E-17 cm ³ /molecule/sec Reaction order: 2 Temperature: 296 K Rate expression: 6.79x10 ⁻¹⁷ [cm ³ /molecule s] Uncertainty: 2.0]					298 K						-	Review	x		Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of the NO ₃ radical with organic compounds, Atkinson, R. J. Phys. Chem. Ref. Data 20, 459 (1991).	Toluene+NO ₃ →Products	

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
140	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2]Reference reaction: Benzene+OH→Phenyl+H2O) Reference reaction order: 2]Temperature: 563 K]Pressure: 1.01 bar]Rate expression: 1.8]Bath gas: N2]							その他_Data type: Relative rate value measured					experimental result	Experiment	×		Vapour-phase chemistry of arenes. Part 13. Reactivity and selectivity in the gas-phase reactions of hydroxyl radicals with monosubstituted benzenes at 563 K, Mulder, P.; Louw, R. J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2 0, 1167 (1987).	Toluene+OH→Benzyl+H2O
141	大気	オゾンとの反応		1.20E-20 cm^3/molecule/sec]Reaction order: 2]Temperature: 298 K]Pressure: 1.01 bar]Rate expression: 1.2x10^-20±5.98x10^-21cm^3/molecule s]Bath gas: N2]					298 K		その他_Data type: Absolute value measured directly					experimental result	Experiment	×		Ozonolysis Rates of Some Atmospheric Gases, Stedman, D.H.; Niki, H. Environ. Lett. 4, 303 (1973).	Toluene+O3→Products
142	大気	オゾンとの反応		1.5e-22 cm^3/molecule/sec]Reaction order: 2]Temperature: 297 K]Pressure: 1.01 bar]Rate expression: 1.5x10^-22±7.97x10^-23cm^3/molecule s]Bath gas: N2]					297 K		その他_Data type: Absolute value measured directly					experimental result	Experiment	○		The Gas Phase Reaction of O₃ with a Series of Aromatic Hydrocarbons, Pate, C.T.; Atkinson, R.; Pitts, J.N., Jr. J. Environ. Sci. Health A 11, 1 (1976).	Toluene+O3→Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
143	大気	オゾンとの 反応		3.90E-22 cm ³ /molecu le/sec[Reacti on order: 2]Temperature: 298 - 423 K Pressure: 1.33E-3 - 0.15 bar Rate expression: 2.34x10 ⁻¹² [cm ³ /mol ecule s] e ^{-55790 / 3351 J/mole]/(RT U ncertainty: 3.16000009 Bath gas: O2]}					298 K		その他,Data type: Absolute value measured directly					experimen tal result	Experiment	x		Kinetics and chemiluminescence of ozone-aromatic reactions in the gas phase, Toby, S.; Van de Burgt, L.J.; Toby, F.S. J. Phys. Chem. 89, 1982 (1985).	Toluene+O3→ Products
144	大気	OHラジカ ルとの反応		[Reaction order: 2]Temperature: 700 - 1900 K Pressure: 1.09 - 1.82 bar Rate expression: 1.03x10 ⁻¹³ [cm ³ /mol ecule s] (T/298 K) ^{2.69} e ^{-2594 [J/mole]/(RT Uncertainty: 1.35000002 Pressure dependence: None reported]}							その他,Data type: Transition state theory					estimated by calculatio n	Theory	x		High-temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene, Seta, T.; Nakajima, M.; Miyoshi, A. J. Phys. Chem. A 110, 5081 (2006).	Toluene+ OH→ C6H4CH3+H2O

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
145	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2 Temperature: 700 - 1900 K Pressure: 1.09 - 1.82 bar Rate expression: 3.24x10^-15[cm^3/molecule s] (T/298 K)^3.26e^-17219 [J/mole]/RT Uncertainty: 2.0 Pressure dependence: None reported]							その他_Data type: Transition state theory					estimated by calculation	Theory	x		High-temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene. Seta, T.; Nakajima, M.; Miyoshi, A. J. Phys. Chem. A 110, 5081 (2006).	Toluene+OH→2-Methylphenol+H
146	大気	硝酸ラジカルとの反応		3.40E-17 cm^3/molecule^2sec[Reaction order: 2 Reference reaction: n-C7H16+NO3 → Products Temperature: 298 K Pressure: 0.98 bar Rate expression: 3.4x10^-17[cm^3/molecule s] Bath gas: N2]					298 K		その他_Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	x		Kinetics of the reactions of NO₃ radicals with a series of aromatic compounds, Atkinson, R.; Aschmann, S.M.; Winer, A.M. Environ. Sci. Technol. 21, 1123 (1987).	Toluene+NO3→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価II)	備考	文献	ページ番号等
147	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2][Temperature: 450 - 1000 K][Rate expression: 6.74x10^-13[cm^3/molecule s] (T/298 K)^2.00e^91.46 [± 8314472 J/mole]/RT][Uncertainty: 1.2000005]													Review	x		Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of the hydroxyl radical with organic compounds under atmospheric conditions, Atkinson, R. Chem. Rev. 86, 69 (1986).	Toluene+ OH→ Products
148	大気	OHラジカルとの反応		5.66E-12 cm^3/molecule sec[Reaction order: 2][Reference reaction: Cyclohexane + OH→ Cyclohexyl+ H2O][Temperature: 296 - 363 K][Pressure: 1.01 bar][Rate expression: 1.73x10^-12[cm^3/molecule s] e^2943 [J/mole]/RT][Bath gas: N2]					298 K		その他, Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	x		System to measure relative rate constants of semivolatile organic compounds with hydroxyl radicals, Anderson, P.N.; Hites, R.A. Environ. Sci. Technol. 30, 301 (1996).	Toluene+ OH→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
149	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2]Reference reaction: toluene-d1+OH→ Products[Reference reaction order: 2]Temperature: 296 K[Pressure: 1.01 bar]Rate expression: 1.03± 2.1x10^- 3]Pressure dependence: None reported]							その他.Data type: Relative rate value measured					experimental result	Experiment	x		Laboratory studies of the hydrogen kinetic isotope effects (KIES) of the reaction of non-methane hydrocarbons with the OH radical in the gas phase, Iannone, R.; Anderson, R.S.; Vogel, A.; Rudolph, J.; Eby, P.; Whitticar, M.J. J. Atmos. Chem. 47, 191 (2004).	Toluene+OH→ Products
150	大気	OHラジカルとの反応		5.5e-12± 4.98e-13 cm^3/molecule/sec[Reaction order: 2]Reference reaction: CH3CH=CH2+OH→ Products[Temperature: 296 K]Pressure: 1.01 bar]Rate expression: 5.5x10^-12[± 4.98x10^- 13cm^3/molecule s][Bath gas: N2]					296 K		その他.Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	x		On the uncertainties in the rate coefficients for OH reactions with hydrocarbons, and the rate coefficients of the 1,3,5-trimethylbenzene and m-xylene reactions with OH radicals in the gas phase, Kramp, F.; Paulson, S.E. J. Phys. Chem. A 102, 2685 (1998).	Toluene+OH→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
151	大気	OHラジカルとの反応		5.70E-12 cm ³ /molecule/sec[Reaction order: 2][Temperature: 298 K][Pressure: 1.01 bar][Rate expression: 5.7x10 ⁻¹² [± 1.9x10 ⁻¹³ cm ³ /mole cule s][Bath gas: N2][Pressure dependence: None reported]					298 K		その他,Data type: Absolute value measured directly					experimental result	Experiment	x		Formation of Peroxy Radicals from OH-Toluene Adducts and O₂</sub>, Bohn, B. J. Phys. Chem. A 105, 6092 (2001).	Toluene+OH→ Products
152	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2][Temperature: 911 - 1389 K][Pressure: 2.10 - 2.86 bar][Rate expression: no rate data available][Pre ssure dependence: None reported]							その他,Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	x		High-temperature measurements of the reactions of OH with toluene and acetone, Vasudevan, V.; Davidson, D.F.; Hanson, R.K. J. Phys. Chem. A 109, 3352 (2005).	Toluene+OH→ Products
153	大気	OHラジカルとの反応		6.48e-12± 8.47e-13 cm ³ /molecule/sec[Reaction order: 2][Reference reaction: CH3CH=CH2 + OH→ Products][Te mperature: 296 K][Pressure: 0.98 bar][Rate expression: 6.48x10 ⁻¹² ± 8.47x10 ⁻¹³ cm ³ /mole cule s][Bath gas: N2]					296 K		その他,Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	x		Rate constants for the gas-phase reactions of the OH radical with a series of aromatic hydrocarbons at 296 ± 2 K, Atkinson, R.; Aschmann, S.M. Int. J. Chem. Kinet. 21, 355 (1989).	Toluene+OH→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
154	大気	OHラジカルとの反応		5.99e-12±2.99e-13 cm ³ /molecule/sec[Reaction order: 2][Temperature: 295 K][Pressure: 1.01 bar][Rate expression: 5.99x10 ⁻¹² ±2.99x10 ⁻¹³ cm ³ /molecule s][Bath gas: N2]					295 K								Review	x		Sink processes for tetraalkyllead compounds in the atmosphere, Harrison, R.M.; Laxen, D.P.H. Environ. Sci. Technol. 12, 1384 (1978).	Toluene+ OH→ Products
155	大気	OHラジカルとの反応		6.19E-12 cm ³ /molecule/sec[Reaction order: 2][Reference reaction: (CH3)2CHCH(CH3)2+ OH→ Other Products +H2O][Temperature: 284 - 363 K][Pressure: 0.94 - 1.01 bar][Rate expression: 7.89x10 ⁻¹³ cm ³ /molecule s]e ^{5105 ±973 J/mole} /RT[Bath gas: N2]					298 K		その他,Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	x		The temperature dependence of the OH radical reactions with some aromatic compounds under simulated tropospheric conditions, Semadeni, M.; Stocker, D.W.; Kerr, J.A. Int. J. Chem. Kinet. 27, 287 (1995).	Toluene+ OH→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
156	大気	OHラジカルとの反応		6.16E-12 cm ³ /mole le/sec[Reaction order: 2][Temperature: 220 - 325 K][Rate expression: 2.09x10 ⁻¹² [cm ³ /mole cule s] e ²⁶⁷⁷ ± 1231 [J/mole]/RT][U ncertainty: 1.2000005]					298 K							-	Review	x		Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of the hydroxyl radical with organic compounds under atmospheric conditions, Atkinson, R. Chem. Rev. 86, 69 (1986).	Toluene+OH→ Products
157	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2][Temperature: 570 - 1389 K][Rate expression: 2.69x10 ⁻¹¹ [cm ³ /mole cule s] e ⁻¹¹⁵⁹⁰ [J/mole]/RT] Pressure dependence: None reported]							その他>Data type: Experimental value and limited review					-	Review	x		High-temperature measurements of the reactions of OH with toluene and acetone, Vasudevan, V.; Davidson, D.F.; Hanson, R.K. J. Phys. Chem. A 109, 3352 (2005).	Toluene+OH→ Products
158	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2][Temperature: 299 - 340 K][Pressure: 0.13 bar][Rate expression: 2.19x10 ⁻¹³ ± 8.97x10 ⁻¹⁴ cm ³ /mole cule s] e ⁸³¹⁴ ± 1081 [J/mole]/RT][B ath gas: Ar]							その他>Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimen tal result	Experiment	x		Adduct formation of OH radicals with benzene, toluene, and phenol and consecutive reactions of the adducts with NO ₂ and O ₂ and O ₂ , Knispel, R.; Koch, R.; Siese, M.; Zetzsch, C. Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 94, 1375 (1990).	Toluene+OH→ Adduct

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件 温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
159	大気	OHラジカルとの反応		5.71e-12± 1.48e-12 cm ³ /molecu le/sec[Reacti on order: 2][Temperatur e: 338 K][Pressure: 0.65 bar][Rate expression: 5.71x10 ⁻¹² ± 1.48x10 ⁻¹² cm ³ /mole cule s][Bath gas: H2O]					338 K		その他,Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimen tal result	Experiment	x		UV spectra and kinetics of radicals produced in the gas phase reactions of Cl, F and OH with toluene, Markert, F.; Pagsberg, P. Chem. Phys. Lett. 209, 445 (1993).	Toluene+OH→ Adduct
160	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2][Temperatur e: 700 - 1900 K][Pressure: 1.09 - 1.82 bar][Rate expression: 2.46x10 ⁻¹³ [cm ³ /mol ecule s] (T/298 K) ^{2.39e+251 9} [J/mole]/RT Uncertainty: 1.35000002] Pressure dependence: None reported]							その他,Data type: Transition state theory					estimated by calculatio n	Theory	x		High-temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene, Seta, T.; Nakajima, M.; Miyoshi, A. J. Phys. Chem. A 110, 5081 (2006).	Toluene+OH→ Benzyl+H2O

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
161	大気	硝酸ラジカルとの反応		7.8e-17± 1.48e-17 cm ³ /mole le/sec[Reacti on order: 2][Reference reaction: n- C7H16+NO3 → Products][Te mperature: 296 K][Pressure: 0.99 bar][Rate expression: 7.8x10 ⁻¹⁷ [± 1.48x10 ⁻¹⁷ cm ³ /mole cule s][Bath gas: N2]					296 K		その他,Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimen tal result	Experiment	x		Kinetics of the reactions of acenaphthene and acenaphthylene and structurally-related aromatic compounds with OH and NO ₂ radicals, N ₂ O ₂ radicals, and O ₃ at 296 ± 2 K, Atkinson, R.; Aschmann, S.M. Int. J. Chem. Kinet. 20, 513 (1988).	Toluene+NO3→ Products
162	大気	OHラジカルとの反応		[Reaction order: 2][Temperatur e: 919 - 1481 K][Pressure: 1.09 - 1.82 bar][Rate expression: 8.9x10 ⁻¹¹ [± 2.9x10 ⁻¹¹ cm ³ /mole cule s] e ^{- 19700 [± 2700 J/mole]/RT[U ncertainty: 1.20000005] Pressure dependence: None reported]}							その他,Data type: Absolute value measured directly					experimen tal result	Experiment	x		High-temperature reactions of OH radicals with benzene and toluene, Sata, T.; Nakajima, M.; Miyoshi, A. J. Phys. Chem. A 110, 5081 (2006).	Toluene+ OH→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件 温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
163	大気	OHラジカルとの反応		6.11E-12 cm ³ /mole le/sec[Reacti on order: 2]Temperature: 298 K Pressure: 0.13 bar Rate expression: 6.11x10 ⁻¹² ± 4.32x10 ⁻¹³ cm ³ /mole cule s] Bath gas: He]					298 K		その他.Data type: Absolute value measured directly					experimen tal result	Experiment	x		Investigation of Important Hydroxyl Radical Reactions in the Perturbed Troposphere, Davis, D.D. U.S. NTIS PB Rep. 0, 1 (1977).	Toluene+OH→ Products
164	大気	OHラジカルとの反応		[Publisher address:][Comments:][Reaction order: 2]Reference reaction: C6D5CD3+ OH→ Products Ref erence reaction order: 2]Temperatur e: 298 - 353 K Pressure: 1.01 bar Rate expression: 1.28 e ⁻⁵³² [±732 J/mole]/RT P ressure dependence: None reported]							その他.Data type: Relative rate value measured					experimen tal result	Experiment	x		Kinetic isotope effects and rate constants for the gas-phase reactions of three deuterated toluenes with OH from 298 to 353 K, Kim, D.; Stevens, P.S.; Hites, R.A. Int. J. Chem. Kinet. 44, 821 (2012).	Toluene+OH→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件 温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
165	大気	OHラジカルとの反応		[Publisher address:] [Comments:] [Reaction order: 2] [Reference reaction: C6H5CD3+ OH→ Products] [Reference reaction order: 2] [Temperature: 298 - 353 K] [Pressure: 1.01 bar] [Rate expression: 2.8±5.0x10^- 1e^-2669 [± 449 J/mole]/RT] [Pressure dependence: None reported]							その他_Data type: Relative rate value measured					experimental result	Experiment	x		Kinetic isotope effects and rate constants for the gas-phase reactions of three deuterated toluenes with OH from 298 to 353 K. Kim, D.; Stevens, P.S.; Hites, R.A. Int. J. Chem. Kinet. 44, 821 (2012).	Toluene+ OH→ Products
166	大気	OHラジカルとの反応		[Publisher address:] [Comments:] [Reaction order: 2] [Reference reaction: C6D5CH3+ OH→ Products] [Reference reaction order: 2] [Temperature: 300 - 353 K] [Pressure: 1.01 bar] [Rate expression: 8.53x10^- 1e^-441 [± 1064 J/mole]/RT] [Pressure dependence: None reported]							その他_Data type: Relative rate value measured					experimental result	Experiment	x		Kinetic isotope effects and rate constants for the gas-phase reactions of three deuterated toluenes with OH from 298 to 353 K. Kim, D.; Stevens, P.S.; Hites, R.A. Int. J. Chem. Kinet. 44, 821 (2012).	Toluene+ OH→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件 温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
167	大気	OHラジカルとの反応		6.11E-12 cm ³ /molecule/sec[Reaction order: 2][Temperature: 298 K][Pressure: 0.13 bar][Rate expression: 6.11x10 ⁻¹² ± 4.32x10 ⁻¹³ cm ³ /molecule s][Bath gas: He]					298 K		その他,Data type: Absolute value measured directly					experimental result	Experiment	x		A kinetics study of the reaction of the OH free radical with aromatic compounds. I. Absolute rate constants for reaction with benzene and toluene at 300°K, Davis, D.D.; Bollinger, W.; Fischer, S. J. Phys. Chem. 79, 293 (1975).	Toluene+ OH→ Products
168	大気	OHラジカルとの反応		5.92E-12 cm ³ /molecule/sec[Reaction order: 2][Reference reaction: Cyclohexane + OH→ Cyclohexyl+ H2O][Temperature: 276 - 383 K][Pressure: 1.01 bar][Rate expression: 8.6x10 ⁻¹³ [cm ³ /molecule s] e ^{-4781 [J/mole]/RT}][Bath gas: He]					298 K		その他,Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	x		System to measure relative rate constants of semivolatile organic compounds with hydroxyl radicals, Anderson, P.N.; Hites, R.A. Environ. Sci. Technol. 30, 301 (1996).	Toluene+ OH→ Products
169	大気	OHラジカルとの反応		5.78E-12 cm ³ /molecule/sec[Reaction order: 2][Temperature: 298 K][Pressure: 0.13 - 0.83 bar][Rate expression: 5.78x10 ⁻¹² ± 5.81x10 ⁻¹³ cm ³ /molecule s][Bath gas: Ar]					298 K		その他,Data type: Absolute value measured directly					experimental result	Experiment	x		Rate constants for the reaction of OH radicals with a series of aromatic hydrocarbons. Hansen, D.A.; Atkinson, R.; Pitts, J.N., Jr. J. Phys. Chem. 79, 1763 (1975).	Toluene+ OH→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
170	大気	OHラジカルとの反応		5.99e-12± 7.14e-13 cm ³ /molecu le/sec[Reacti on order: 2]Temperature: 297 K Pressure: 5.33E-4 - 1.31E-2 bar Rate expression: 5.99x10^- 12± 7.14x10^- 13cm ³ /mole cule s][Bath gas: He]					297 K		その他_Data type: High or low pressure extrapolation					experimen tal result	Experiment	x		Rate constant for the termolecular reaction of OH+toluene+helium in the fall-off range below 10 torr, Bourmada, N.; Devolder, P.; Sochet, L.R. Chem. Phys. Lett. 149, 339 (1988).	Toluene+ OH→ Products
171	大気	OHラジカルとの反応		6.38E-12 cm ³ /molecu le/sec[Reacti on order: 2]Temperature: 299 K Pressure: 0.13 bar Rate expression: 6.39x10^- 12± 6.48x10^- 13cm ³ /mole cule s][Bath gas: Ar]					298 K		その他_Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimen tal result	Experiment	x		Kinetics and mechanism of the gas phase reaction of OH radicals with aromatic hydrocarbons over the temperature range 296-473 K, Perry, R.A.; Atkinson, R.; Pitts, J.N., Jr. J. Phys. Chem. 81, 296 (1977).	Toluene+ OH→ Products
172	大気	OHラジカルとの反応		7.21e-12 cm ³ /molecu le/sec[Reacti on order: 2]Temperature: 300 K Pressure: 1.01 bar Rate expression: 7.21x10^- 12[cm ³ /mol ecule s][Bath gas: N2]					300 K		その他_Data type: Absolute value measured directly					experimen tal result	Experiment	x		Rates, Reactivity and Mechanism for Homogeneous Atmospheric Oxidation Reactions, Cox, R.A. Phys. Chem. Behav. Atmos. Pollut. Proc. Eur. Symp. 1, 91 (1980).	Toluene+ OH→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
173	大気	OHラジカルとの反応		7.21E-12 cm ³ /molecule/sec[Reaction order: 2][Reference reaction: C2H4+ OH→C2H3+H2O][Temperature: 298 K][Pressure: 1.01 bar][Rate expression: 7.21x10 ⁻¹² [cm ³ /molecule s][Bath gas: N2]					298 K		その他_Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	×		Atmospheric Photooxidation Reactions. Rates, Reactivity, and Mechanism for Reaction of Organic Compounds with Hydroxyl Radicals, Cox, R.A.; Derwent, R.G.; Williams, M.R. Environ. Sci. Technol. 14, 57 (1980).	Toluene+OH→ Products
174	大気	OHラジカルとの反応		6.38E-12 cm ³ /molecule/sec[Reaction order: 2][Reference reaction: n-C6H14+ OH→ Products][Temperature: 298 K][Pressure: 1.01 bar][Rate expression: 6.38x10 ⁻¹² ± 6.31x10 ⁻¹⁴ cm ³ /molecule s][Bath gas: N2]					298 K		その他_Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result	Experiment	×		A set of rate constants for the reaction of OH radicals with aromatic hydrocarbons, Ohta, T.; Ohya, T. Bull. Chem. Soc. Jpn. 58, 3029 (1985).	Toluene+OH→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
175	大気	OHラジカルとの反応		5.35e-12± 5.31e-13 cm ³ /mole le/sec[Reacti on order: 2]Reference reaction: Cyclohexane +·OH→ Cyclohexyl+ H2O]Temper ature: 297 K]Pressure: 1.01 bar]Rate expression: 5.35x10 ⁻ 12]± 5.31x10 ⁻ 13cm ³ /mole cule s][Bath gas: N2]					297 K		その他_Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimen tal result	Experiment	x		Room temperature rate constants for the reaction of OH with selected chlorinated and oxygenated hydrocarbons. Edney, E.O.; Kleindienst, T.E.; Corse, E.W. Int. J. Chem. Kinet. 18, 1355 (1986).	Toluene+·OH→ Products
176	大気	OHラジカルとの反応		4.73e-12± 5.65e-13 cm ³ /mole le/sec[Reacti on order: 2]Reference reaction: H2+ OH→ H2O+H]Temperature : 773 K]Pressure: 0.67 bar]Rate expression: 4.73x10 ⁻ 12]± 5.65x10 ⁻ 13cm ³ /mole cule s][Bath gas: N2]					773 K		その他_Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimen tal result	Experiment	x		Addition of benzene and toluene to slowly reacting mixtures of hydrogen and oxygen at 773K, Baldwin, R.R.; Scott, M.; Walker, R.W. Symp. Int. Combust. Proc. 21, 991 (1988).	Toluene+·OH→ Products

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件 温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタティの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタティ該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
177	大気	OHラジカルとの反応		5.96E-12 cm ³ /mole le/sec[Reacti on order: 2]Temperature: 297 - 353 K Pressure: 8.00E-4 - 1.29E-2 bar Rate expression: 4.67x10 ⁻ 13[cm ³ /mol ecule s] e6311 [J/mole]/RT] Bath gas: He]					298 K		その他_Data type: High or low pressure extrapolation					experimen tal result	Experiment	x		Mesure de la constante de vitesse de la reaction du radical OH avec le toluene par la technique du tube a ecoulement rapide et decharge microonde, Bourmada, M.; Carlier, M.; Pauwels, J.F.; Devolder, P. J. Chim. Phys. 85, 881 (1988).	Toluene+OH→ Products
178	大気	OHラジカルとの反応		4.15e-12± 1.49e-12 cm ³ /mole le/sec[Reacti on order: 2]Reference reaction: n- C4H10+ OH → Other Products +H2O Tempe rature: 304 K Pressure: 1.01 bar Rate expression: 4.15x10 ⁻ 12[± 1.49x10 ⁻ 12cm ³ /mole cule s] Bath gas: N2]					304 K		その他_Data type: Derived from fitting to a complex mechanism					experimen tal result	Experiment	x		Gas phase kinetic study of relative rates of reaction of selected aromatic compounds with hydroxyl radicals in an environmental chamber, Doyle, G.J.; Lloyd, A.C.; Darnall, K.R.; Winer, A.M.; Pitts, J.N., Jr. Environ. Sci. Technol. 9, 237 (1975).	Toluene+OH→ Products
179	NITE初期リ スク評価書	水域	生分解(嫌 氣的)			210 日										-		x		Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M. and Michalenko, E.M. Eds. (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates, Lewis Publishers, Inc., Chelsea, MI. Mackay, D., Shiu, W.Y. and Ma, K.C. (1992a) Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Vol. 1 - Monoaromatic Hydrocarbons, Chlorobenzenes, and PCBs., Lewis Publishers, Inc., Chelsea, MI.	p.7

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
180	水域	生分解(好氣的)				22 日										-		x		Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M. and Michalenko, E.M. Eds. (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates, Lewis Publishers, Inc., Chelsea, MI. Mackay, D., Shiu, W.Y. and Ma, K.C. (1992a) Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Vol. 1 - Monoaromatic Hydrocarbons, Chlorobenzenes, and PCBs., Lewis Publishers, Inc., Chelsea, MI.	p.7
181	水域	生分解					98.6 %[活性汚泥曝気槽において、流入したトルエンは、濃度の98.6%が生分解、1.2%が大気中への揮散により除去された]									-		x		Melcer, H., Bell, J. and Thompson, D. (1992) Predicting the fate of volatile organic compounds in municipal waste water treatment plants. Wat. Sci. Tech., 25, 383-389.	p.7
182	水域	生分解(好氣的)					80 %[BOD測定]				その他					experimental result		x		Price, K.S., Waggy, G.T., and Conway, R.A. (1974) Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals. J. Water Pollut. Contr. Fed., 46, 63-77.	p.6
183	水域	生分解(好氣的)				4 日										-		x		Capel, P.D. and Larson, S.J. (1995) A chemodynamic approach for estimating losses of target organic chemicals from water during sample holding time. Chemosphere, 30, 1097-1107. Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M. and Michalenko, E.M. Eds. (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates, Lewis Publishers, Inc., Chelsea, MI. Mackay, D., Shiu, W.Y. and Ma, K.C. (1992a) Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Vol. 1 - Monoaromatic Hydrocarbons, Chlorobenzenes, and PCBs., Lewis Publishers, Inc., Chelsea, MI.	p.7
184	水域	生分解(好氣的)					100 %[生物化学的酸素消費量(BOD)測定]				化審法TG					experimental result		x		通商産業省(1980)通商産業省公報1980年12月25日,製品評価技術基盤機構 化学物質管理情報.(http://www.nite.go.jp から引用)	p.6
185	水域	加水分解														-		x			p.6
186	天気	直接光分解														-		x		Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M. and Michalenko, E.M. Eds. (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates, Lewis Publishers, Inc., Chelsea, MI.	p.6

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタティの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタティ該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
187	大気	硝酸ラジカルとの反応		6.80E-17 cm ³ /molecule/sec					25 °C							experimental result		x		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) AopWin Estimation Software, ver. 1.90, North Syracuse, NY.	p.6
188	大気	オゾンとの反応		1.35E-20 cm ³ /molecule/sec					25 °C							experimental result		x		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) AopWin Estimation Software, ver. 1.90, North Syracuse, NY.	p.6
189	大気	OHラジカルとの反応		5.96E-12 cm ³ /molecule/sec					25 °C							experimental result		x		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) AopWin Estimation Software, ver. 1.90, North Syracuse, NY. EU, European Union Bureau (2003) European Union Risk Assessment Report, toluene. ECB, European Chemicals Bureau. (http://ecb.jrc.it/DOCUMENTS/Existing-Chemicals/Risk-Assessment/REPORT/toluenerport032.pdf から引用)	p.6
190	水域	生分解 (嫌氣的)				56 日										-		x		Capel, P.D. and Larson, S.J. (1995) A chemodynamic approach for estimating losses of target organic chemicals from water during sample holding time. Chemosphere, 30, 1097-1107. Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M. and Michalenko, E.M. Eds. (1991) Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis Publishers, Inc., Chelsea, MI. Mackay, D., Shiu, W.Y. and Ma, K.C. (1992a) Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Vol. 1 - Monocyclic Hydrocarbons, Chlorobenzenes, and PCBs., Lewis Publishers, Inc., Chelsea, MI.	p.7
191	水域	生分解 (好氣的)					100 % [ガスクロマトグラフ (GC) 測定]				化審法TG					experimental result		x		通商産業省 (1980) 通商産業省公報 1980 年12月25日, 製品評価技術基盤機構 化学物質管理情報. (http://www.nite.go.jp から引用)	p.6
192	PhysProp	大気	OHラジカルとの反応	0.00000000000596 cm ³ /molecule/sec					25 °C							experimental result		x		ATKINSON, R (1989)	
193	ECHA	水域	生分解 (好氣的)				73 % [BOD/ThOD] 5 d]				その他, APHA method no 219 (1971)		その他, not specified	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result		x		[Reference Type]: publication, [Title]: Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals, [Author]: Price, Waggy and Conway, [Year]: 1974, [Bibliographic source]: Water Pollution Control Federation 46(1), 63-77	003 Weight of evidence Experimental result
194		水域	生分解 (好氣的)				70 % [BOD/ThOD] 15 d]				その他, APHA method no 219 (1971)		その他, not specified	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result		x		[Reference Type]: publication, [Title]: Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals, [Author]: Price, Waggy and Conway, [Year]: 1974, [Bibliographic source]: Water Pollution Control Federation 46(1), 63-77	004 Weight of evidence Experimental result

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタイルの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタイル該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
195	水域	生分解 (好氣的)					62 %[BOD/ThOD] 10 d]				その他,APHA method no 219 (1971)		その他,not specified	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimen tal result		x		[Reference Type]:publication, [Title]:Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals, [Author]:Price, Waggy and Conway, [Year]:1974, [Bibliographic source]:Water Pollution Control Federation 46(1), 63-77	004 Weight of evidence Experimental result
196	水域	生分解 (好氣的)					53 %[BOD/ThOD]5 d]				その他,APHA method no 219 (1971)		その他,not specified	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimen tal result		x		[Reference Type]:publication, [Title]:Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals, [Author]:Price, Waggy and Conway, [Year]:1974, [Bibliographic source]:Water Pollution Control Federation 46(1), 63-77	004 Weight of evidence Experimental result
197	水域	生分解 (好氣的)					86 %[BOD/ThOD] 20 d]				その他,APHA method no 219 (1971)		その他,not specified	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimen tal result		x		[Reference Type]:publication, [Title]:Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals, [Author]:Price, Waggy and Conway, [Year]:1974, [Bibliographic source]:Water Pollution Control Federation 46(1), 63-77	003 Weight of evidence Experimental result
198	水域	生分解 (好氣的)					74 %[BOD/ThOD] 10 d]				その他,APHA method no 219 (1971)		その他,not specified	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimen tal result		x		[Reference Type]:publication, [Title]:Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals, [Author]:Price, Waggy and Conway, [Year]:1974, [Bibliographic source]:Water Pollution Control Federation 46(1), 63-77	003 Weight of evidence Experimental result
199	水域	生分解 (好氣的)					80 %[BOD/ThOD] 20 d]				その他,APHA method no 219 (1971)		その他,not specified	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimen tal result		x		[Reference Type]:publication, [Title]:Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals, [Author]:Price, Waggy and Conway, [Year]:1974, [Bibliographic source]:Water Pollution Control Federation 46(1), 63-77	004 Weight of evidence Experimental result
200	水域	生分解 (好氣的)					100 %[test mat. analysis]14 d]				OECD TG 301C		その他,not specified	4: not assignable	weight of evidence	experimen tal result		x		[Reference Type]:study report, [Title]:Unnamed, [Year]:1980	002 Weight of evidence Experimental result
201	水域	生分解 (好氣的)					123 %[BOD]14 d]				OECD TG 301C		その他,not specified	4: not assignable	weight of evidence	experimen tal result		x		[Reference Type]:study report, [Title]:Unnamed, [Year]:1980	002 Weight of evidence Experimental result
202	水域	生分解 (好氣的)					81 %[COD/ThOD] 5 d]				その他,APHA method no 219 (1971) for BOD and ASTM D1252- 67 (1974) for COD		その他,not specified	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimen tal result		x		[Reference Type]:publication, [Title]:BOD and COD of some petrochemicals, [Author]:Bridle, Wolff and Winter, [Year]:1979, [Bibliographic source]:Water Research 13, 627-630	001 Weight of evidence Experimental result

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該当	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該当 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
203	水域	生分解 (好氣的)					69 %[BOD/ThOD] 5 d]				その他,APHA method no 219 (1971) for BOD and ASTM D1252- 67 (1974) for COD		その他,not specified	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimen tal result		x		[Reference Type]:publication, [Title]:BOD and COD of some petrochemicals, [Author]:Bridie, Wolff and Winter, [Year]:1979, [Bibliographic source]:Water Research 13, 627-630	001 Weight of evidence Experimental result
204	大気	OHラジカルとの反応		8.19E-12 cm ³ /molecu le/sec	5E5 molecule/c m ³	2.59 日		2.5920959			その他,The author used data from other investigators. This data was generated using two methods: absolute and relative constant techniques. The author then applied a least squares analysis of degradation rate constants for organic chemicals by hydroxyl radicals developed by other investigators.		その他,not specified	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculatio n		x		[Reference Type]:publication, [Title]:Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of the hydroxyl radical with organic compounds under atmospheric conditions , [Author]:Atkinson, R., [Year]:1985, [Bibliographic source]:Chemistry review 85, 69-201	001 Key Calculation
205	水域	生分解 (好氣的)					80 %[BOD/ThOD] 15 d]				その他,APHA method no 219 (1971)		その他,not specified	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimen tal result		x		[Reference Type]:publication, [Title]:Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals, [Author]:Price, Waggy and Conway, [Year]:1974, [Bibliographic source]:Water Pollution Control Federation 46(1), 63-77	003 Weight of evidence Experimental result
206	SIDS	生分解				3 日					その他,at 5 mg toluene/kg soil				-	experimen tal result		x		Davis JW, Madsen S (1996). Factors affecting the biodegradation of toluene in soil. Chemosphere 33(1), 107-130.	p.37

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
207	水域	生分解(嫌氣的)					33~49%[during two weeks]				その他,in an anaerobic microcosm employing aquifer material from the vicinity of a gasoline spill				-	experimental result		x		Haag F, Reinhard M, McCarty PL (1991). Degradation of toluene and p-xylene in anaerobic microcosms: Evidence for sulfate as a terminal electron acceptor. Environ. Toxicol. Chem. 10, 1379-1389.	p.37
208	土壌	生分解				172 時間					その他,in two different soil types at a concentration of 0.5 mg/kg				-	experimental result		x		Davis JW, Madsen S (1996). Factors affecting the biodegradation of toluene in soil. Chemosphere 33(1), 107-130.	p.37
209	土壌	生分解				31 時間					その他,in two different soil types at a concentration of 0.5 mg/kg				-	experimental result		x		Davis JW, Madsen S (1996). Factors affecting the biodegradation of toluene in soil. Chemosphere 33(1), 107-130.	p.37
210	土壌	生分解				9 日					その他,at 200 mg toluene/kg soil				-	experimental result		x		Davis JW, Madsen S (1996). Factors affecting the biodegradation of toluene in soil. Chemosphere 33(1), 107-130.	p.37
211	土壌	生分解				12 日					その他,at 200 mg toluene/kg soil				-	experimental result		x		Davis JW, Madsen S (1996). Factors affecting the biodegradation of toluene in soil. Chemosphere 33(1), 107-130.	p.37
212	土壌	生分解				2 日					その他,at 5 mg toluene/kg soil				-	experimental result		x		Davis JW, Madsen S (1996). Factors affecting the biodegradation of toluene in soil. Chemosphere 33(1), 107-130.	p.37
213	土壌	生分解				83 日					その他,in various soil systems under different experimental conditions				-	experimental result		x		Sloof W, Blokzijl PJ (eds.) (1988). Integrated criteria document Toluene. National Institute of Public Health and Environmental Protection (RIVM), RIVM Report 758473010. Bilthoven, The Netherlands.	p.36

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等	
214	水域	生分解(好氣的)				1.5 日			20~22 °C		その他.The removal in seawater was examined in mesocosmos studies including the volatilisation. The tanks were 5.5 m high and 1.8 m in diameter and contained 13 m3 seawater. The dissipation of an initial concentration of 3.6 µg/l toluene was studied at the temperature intervals 3 to 7°C, 8 to 16°C and 20 to 22°C. The concentrations were measured during 1-2 months.				-	experimental result		x			Wakeham SG, Davis AC, Karas JL (1983). Mesocosm experiments to determine the fate and persistence of volatile organic compounds in coastal seawater. Environ. Sci. Technol. 17(10), 611-617.	p.36
215	水域	生分解(好氣的)				16 日			8~16 °C		その他.The removal in seawater was examined in mesocosmos studies including the volatilisation. The tanks were 5.5 m high and 1.8 m in diameter and contained 13 m3 seawater. The dissipation of an initial concentration of 3.6 µg/l toluene was studied at the temperature intervals 3 to 7°C, 8 to 16°C and 20 to 22°C. The concentrations were measured during 1-2 months.				-	experimental result		x			Wakeham SG, Davis AC, Karas JL (1983). Mesocosm experiments to determine the fate and persistence of volatile organic compounds in coastal seawater. Environ. Sci. Technol. 17(10), 611-617.	p.36

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
216	水域	生分解 (好 氣的)				13 日			3~7 °C		その他.The removal in seawater was examined in mesocosms studies including the volatilisation. The tanks were 5.5 m high and 1.8 m in diameter and contained 13 m3 seawater. The dissipation of an initial concentration of 3.6 µg/l toluene was studied at the temperature intervals 3 to 7° C, 8 to 16°C and 20 to 22°C. The concentrations were measured during 1-2 months.				-	experimen tal result		x		Wakeham SG, Davis AC, Karas JL (1983). Mesocosm experiments to determine the fate and persistence of volatile organic compounds in coastal seawater. Environ. Sci. Technol. 17(10), 611-617.	p.36
217	大気	OHラジカル との反応		5.226E-12 cm^3/molecu le/sec	1.5E6 molecule/c m^3	2.047 日		1.02341329			AOPWIN				-	estimated by calculatio n		x		AOPWIN (1995). Atmospheric oxidation Program for Microsoft Windows 3.1 (AOPWIN) prepared by Meylan W and Howard P. Syracuse Research Corporation, Merrill Lane, Syracuse, NY.	p.33
218	大気	OHラジカル との反応		6E-12 cm^3/molecu le/sec	1E6 molecule/c m^3[an average daily (24 hour) abundance of OH radicals of 1.106 molecules/c m3]	1.9 日		1.33708947			記載なし				-	experimen tal result		x		Singh HB, Salas LJ, Smith AJ, Shiheishi H (1981). Measurements of some potentially hazardous organic chemicals in urban environments. Atmos. Environ. 15, 601-612.	p.32-33
219	大気	オゾンとの 反応		1.5E-19 cm^3/molecu le/sec	1E9 molecule/c m^3	30 日		53483.5787			記載なし				-	experimen tal result		x		IUCLID (1994). IUCLID data sheet, Toluene. Deutsche SHELL Chemie, 30- Jun-1994. Palm WU, Zetsch C (1992). OH-radiale in der Troposphäre; Ihre Konzentration und Auswirkung. Fraunhofer-Institute für Toxicologie und Aerosolforschung, Hanover, Germany.	p.32-33

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価II)	備考	文献	ページ番号等
220	大気	直接光分解					8.4 %[17 hours]				その他, In a test where toluene was adsorbed on silica gel and irradiated with light at wavelengths >290 nm for 17 hours				-	experimental result		x		Freitag D, Ballhorn L, Geyer H, Korte F (1985). Environmental Hazard profile of organic chemicals. Chemosphere 14(10). 1589-1616.	p.32
221	大気	OHラジカルとの反応		5.997E-12 cm ³ /molecule/sec	1E6 molecule/cm ³	1.3 日		1.33775835			その他, OECD (draft 1990)				-	experimental result		x		IUCLID (1994). IUCLID data sheet, Toluene. Deutsche SHELL Chemie, 30-Jun-1994. Palm WU, Zetsch C (1992). OH-radicals in der Troposphäre, ihre Konzentration und Auswirkung. Fraunhofer-Institute für Toxicologie und Aerosolforschung, Hanover, Germany.	p.32-33
222	既存点検事業	水域	生分解				100 %[GC]		25 °C		化審法TG					experimental result		x			
223		水域	生分解				112 %[酸素消費量による結果]		25 °C		化審法TG					experimental result		x			
224		水域	生分解				127 %[酸素消費量による結果]		25 °C		化審法TG					experimental result		x			
225		水域	生分解				129 %[酸素消費量による結果]		25 °C		化審法TG					experimental result		x			

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 MOE初期評価	その他	[解離基なし]								-		x		(財)化学品検査協会(1997) 化学物質ハザード・データ集.	p.1
2 NITE初期リスク評価書	その他	[解離基なし]								-		x			p.2

PACS F 等	46000
PACS Name 等	トルエン
CASRN	108-88-3
CA IN	Benzene, methyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	Cc1ccccc1

分解性

収集データ

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	readily biodegradable	93%	O_2 consumption		OECD TG 301D			-	experimental result			Lapertot ME, Pulgarin C. 2006. Biodegradability assessment of several priority hazardous substances: Choice, application and relevance regarding toxicity and bacterial activity. Chemosphere 65(4):682-690.	p.317
2 HSDB		123%	O_2 consumption		化審法TG				experimental result			NITE: Chemical Risk Information Platform (CHRIP). Biodegradation and Bioconcentration. Tokyo, Japan: Natl Inst Tech Eval. Available from, as of January 25, 2016: http://www.safe.nite.go.jp/english/db.html	Environmental Biodegradation:
3 NITE初期リスク評価書	readily biodegradable	100%	Test mat. analysis		化審法TG				experimental result			通商産業省公報1980年12月25日、製品評価技術基盤機構 化学物質管理情報。 (http://www.nite.go.jp から引用).	p.6
4	readily biodegradable	100%	O_2 consumption		化審法TG				experimental result			通商産業省公報1980年12月25日、製品評価技術基盤機構 化学物質管理情報。 (http://www.nite.go.jp から引用).	p.6
5 ECHA	readily biodegradable	123%	O_2 consumption		OECD TG 301C	その他,not specified	4: not assignable	weight of evidence	experimental result			[Reference Type]:study report, [Title]:Unnamed, [Year]:1980	002 Weight of evidence Experimental result
6	readily biodegradable	100%	Test mat. analysis		OECD TG 301C	その他,not specified	4: not assignable	weight of evidence	experimental result			[Reference Type]:study report, [Title]:Unnamed, [Year]:1980	002 Weight of evidence Experimental result
7 既存点検事業		129%	O_2 consumption		化審法TG				experimental result				
8		112%	O_2 consumption		化審法TG				experimental result				
9		100%	Test mat. analysis		化審法TG				experimental result				
10		127%	O_2 consumption		化審法TG				experimental result				