

(案)

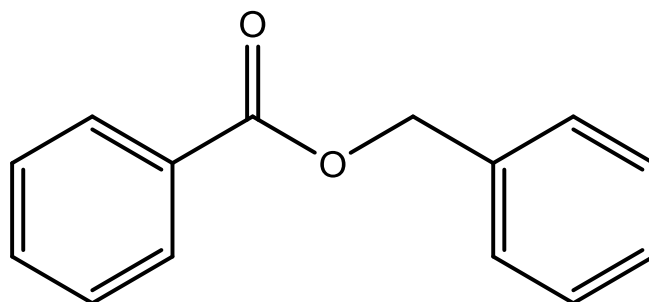
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

安息香酸ベンジル

優先評価化学物質通し番号 128



平成 29 年 1 月

経済産業省

目 次

1		
2	1 評価対象物質の性状	1
3	1-1 物理化学的性状及び濃縮性	1
4	1-2 分解性	4
5	2 【付属資料】.....	6
6	2-1 物理化学的性状等一覧.....	6
7	2-2 その他	6
8		
9		

1 評価対象物質の性状

本章では、モデル推計に用いる物理化学的性状データ、環境中における分解性に係るデータを示す。

1-1 物理化学的性状及び濃縮性

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表 1-1 に示す。なお、表中の下線部は、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。

表 1-1 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¹⁾

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	—	212.24	—	212.24
融点	℃	21 ²⁾	測定値	21 ²⁾
沸点	℃	<u>323.5²⁾</u>	測定値	322.4 ³⁾
蒸気圧	Pa	<u>$\frac{5.63 \times 10^{-2}}{2,4,5,6}$</u>	測定値の平均値	0.0212 ⁶⁾
水に対する溶解度	mg/L	<u>15.3⁷⁾</u>	測定値の平均値	14.7 ⁵⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	3.97 ²⁾	測定値	3.97 ²⁾
ヘンリー係数	Pa·m ³ /mol	<u>7.81×10⁻¹</u>	蒸気圧・水に対する溶解度を用いたヘンリー推計式	0.207 ⁸⁾
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	6,310 ⁷⁾	測定値	6,310 ⁷⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	193.4 ⁸⁾	BCFBAF (v.3.01) による logPow を用いた推計値	193.4 ⁸⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ⁹⁾	1
解離定数(pKa)	—	—	解離性の基を有さない物質	— ¹⁰⁾

1) 平成 27 年度第 4 回優先評価化学物質のリスク評価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（平成 28 年 3 月 22 日）で了承された値

2) USHPV (2010)

3) CRC (2015)

4) HSDB

5) Mackay (2006)

6) Phys Prop

7) ECHA

8) EPI Suite (2012)

9) MHLW, METI, MOE (2014)

10) 評価Ⅰ段階では解離定数を考慮しない

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

① 融点

評価Ⅰで用いたデータ 21℃は、USHPV のキースタディである測定値である。また、他の

1 信頼性の定まった情報源¹においても、同様の値が複数の情報源において記載されている。
2 そのため、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同じ値 21℃ を用いる。

3 4 ② 沸点

5 評価Ⅰ で用いたデータ 322.4℃は、CRC に記載された標準圧力 (760mmHg) における 2
6 つのデータの中央値である。一方、他の信頼性が定まった情報源では、USHPV において測
7 定値 323.5℃が記載されており、同様の値が複数の情報源においても記載されている。

8 そのため、評価Ⅱにおいてはこの値 323.5℃ を用いる。
9

10 ③ 蒸気圧

11 評価Ⅰ で用いたデータ $2.12 \times 10^2 \text{ Pa}$ は、PhysProp の測定値 $2.24 \times 10^4 \text{ mmHg}(25^\circ\text{C})$ を温度補正
12 した値である。一方、他の信頼性が定まった情報源では、測定値として USHPV では
13 $1.0 \times 10^3 \text{ mmHg}$ (20℃)、 $5.2 \times 10^4 \text{ mmHg}$ (25℃)、REACH 登録情報(ECHA)では $2.29 \times 10^4 \text{ mmHg}$
14 (25℃)、PhysProp および HSDB では $2.24 \times 10^4 \text{ mmHg}$ (25℃)の値が記載されている。

15 そのため、評価Ⅱにおいてはこれら 4 つの測定値の算術平均値 $5.63 \times 10^2 \text{ Pa}$ を用いる。
16

17 ④ 水に対する溶解度

18 評価Ⅰ で用いたデータ 14.68 mg/L は、Mackay のデータ 15.73mg/L(25℃)を温度補正した
19 データであるが、測定値か否か等不明な点も多い。

20 また、他の信頼性が定まった情報源には、(Q)SAR による推計値や定性的データの記載し
21 かないが、REACH 登録情報(ECHA)には測定値の平均値 15.3mg/L(20℃, pH4.5)がキースタ
22 ディとして記載されている。

23 そのため、評価Ⅱにおいては 20℃における測定値の平均値 15.3mg/L を用いる。
24

25 ⑤ logPow

26 評価Ⅰ で用いたデータ 3.97 は、USHPV のキースタディである測定値である。また、その
27 他の信頼性の定まった情報源においても、同様の値が複数の情報源において記載されている。

28 そのため、評価Ⅱにおいても、評価Ⅰと同じ値 3.97 を用いる。
29

30 ⑥ヘンリー係数

31 評価Ⅰ で用いたデータ $0.207 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$ は、HENRYWIN (v3.20)の Bond Estimation Method
32 による推定値である。また、他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

33 そのため、評価Ⅱにおいては、水に対する溶解度が 1 mol/L 未満のため、ガイダンスに従
34 って、蒸気圧と水に対する溶解度を用いたヘンリー推計式による値 $7.81 \times 10^{-1} \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$ を用
35 いる。
36

37 ⑦Koc

38 評価Ⅰ で用いた値 6,310 L/kg は、REACH 登録情報(ECHA)による測定値である。また、
39 その他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

40 そのため、評価Ⅱにおいても、評価Ⅰと同じ値 6,310 L/kg を用いる。
41

42 ⑧BCF

¹ 「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」の「3.1 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報源

1 評価Ⅰ で用いた値 193.4 L/kg は、BCFBAF (v3.01) による logPow の値(3.97)を用いた推定値
2 である。また、他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られなかったが、OASIS Catalogic
3 (v.5.11.16)では推定値(26.9)が得られている。

4 なお、ガイダンスに従った NITE カテゴリーアプローチでは、カテゴリーⅤに分類された
5 が類似物質が無い場合類推不能という結果が得られている。

6 そのため、評価Ⅱにおいても、評価Ⅰと同じ BCFBAF の値 193.4 L/kg を用いる。

8 ⑨BMF

9 評価Ⅰ で用いた値 1 は、logPow と BCF の値から技術ガイダンスに従って設定した値であ
10 る。また、他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

11 そのため、評価Ⅱにおいても、評価Ⅰと同じ値 1 を用いる。

1 1-2 分解性

2 表 1-2 にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

3
4

表 1-2 分解に係るデータのまとめ¹⁾

項目		半減期 (日)	詳細	
大気	大気における総括分解半減期		-	
	機序別の 半減期	OH ラジカルとの反応	2.3 25°Cでの反応速度定数の推計値 ²⁾ から OH ラジカル濃度 5×10^5 molecule/cm ³ として算出	
		オゾンとの反応	NA	-
		硝酸ラジカルとの 反応	NA	-
水中	水中における総括分解半減期		-	
	機序別の 半減期	生分解	5 生分解性の試験データから設定	
		加水分解	1.0×10^4 25°Cでの分解速度定数 ³⁾ から換算	
		光分解	NA	-
土壌	土壌における総括分解半減期		-	
	機序別の 半減期	生分解	5 生分解性の試験データから設定	
		加水分解	1.0×10^4 水中における加水分解の半減期を 採用	
底質	底質における総括分解半減期		-	
	機序別の 半減期	生分解	20 水中における生分解の半減期の 4 倍	
		加水分解	1.0×10^4 水中における加水分解の半減期を 採用	

5 1) 平成 27 年度第 4 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレ
6 ビュー会議（平成 28 年 3 月 22 日）で了承された値

7 2) EPI Suite (2001)

8 3) Mackay (2006)

9 NA:情報が得られなかったことを示す

10

11 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、分解の機
12 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。

13

14 ①大気

15 大気中での総括分解半減期に係る情報は得られなかったが、OH ラジカルに係る機序別の
16 情報が得られた。

17 ①-1：OH ラジカルとの反応の半減期

18 半減期算出に採用した反応速度定数データ (6.70×10^{-12} cm³/molecule/s) は
19 AOPWIN(v.1.92)による推計値であり、大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスより 5×10^5
20 molecule/cm³とした場合、半減期は 2.3 日と算出された。

21 評価Ⅱではこの値 2.3 日を用いる。

22 ①-2：オゾンとの反応の半減期

23 大気中でのオゾンとの反応の半減期に係る情報は得られなかった

24 ①-3：硝酸ラジカルとの反応の半減期

25 大気中での硝酸ラジカルとの反応の半減期に係る情報は得られなかった

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40

②水中

水中での総括分解半減期に係る情報は得られなかったが、生分解と加水分解に係る機序別の情報が得られた。

②-1：生分解の半減期

水中での生分解半減期に係る情報は得られなかったが、MITI(1996)では、OECD TG 301C による分解度試験において、28日後のBOD分解度は90%、HPLC分解度は100%との情報が得られている。

そのため、評価Ⅱにおいては、ガイダンスにしたがって換算した値(5日)を用いる。

②-2：加水分解の半減期

Mackayでは 1.0×10^4 日(25℃, pH7)、USHPVでは620日(pH7)といった情報が得られている。

そのため、評価Ⅱにおいては、この中の最大値 1.0×10^4 日を用いる。

②-3：光分解の半減期

水中での光分解半減期に係る情報は得られなかった

③土壌

土壌での総括分解半減期に係る情報は得られなかった。また、機序別の半減期に関する情報も得られなかった。

③-1：生分解の半減期

底質での生分解半減期に係る情報は得られなかった。

評価Ⅱにおいては、技術ガイダンスに従って、水中での生分解の半減期と同じ値(5日)を用いる。

③-2：加水分解の半減期

底質での加水分解半減期に係る情報は得られなかった。

評価Ⅱにおいては、技術ガイダンスに従って、水中での加水分解の半減期と同じ値(1.0×10^4 日)を用いる。

④底質

底質での総括分解半減期に係る情報は得られなかった。また、機序別の半減期に関する情報も得られなかった。

④-1：生分解の半減期

底質での生分解半減期に係る情報は得られなかった。

評価Ⅱにおいては、技術ガイダンスに従って、水中での生分解の半減期の4倍の値(20日)を用いる。

④-2：加水分解の半減期

底質での加水分解半減期に係る情報は得られなかった。

評価Ⅱにおいては、技術ガイダンスに従って、水中での加水分解の半減期と同じ値(1.0×10^4 日)を用いる。

1 **2 【付属資料】**

2 **2-1 物理化学的性状等一覽**

3 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

4
5 出典)

6 USHPV(2010): U.S. Environmental Protection Agency. SCREENING-LEVEL HAZARD
7 CHARACTERIZATION Benzyl Derivatives Category, September, 2010.

8 CRC(2015): Lide, D. R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 96th ed., CRC Press, 2015-
9 2016.

10 HSDB:US NIH.Hazardous Substances Data

11 Bank.<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDBPhysProp>: Syracuse Research Corporation.
12 SRC PhysProp Database. (2015.12 閱覽).

13 ECHA: ECHA. Information on Chemicals – Registered substances. (2015.12 閱覽).

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

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

17 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ド
18 ンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

19 MITI(1996): MITI. 安息香酸ベンジル(被験物質番号 K-1318)の微生物による分解度試験. 試験
20 番号 21318, 既存化学物質点検, 1996.

21

22 **2-2 その他**

23 特になし。

情報源略称	詳細等
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
CCD	Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, Version 2013, CRC-Press
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
Henry計算式	Henry計算式
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUCLID	IUCLID
Mackay	Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Second Edition
Merck	The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006
OASIS Catalogic	OASIS Catalogic
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
REACH登録情報	REACH登録情報
USHPV	US/HPVチャレンジプログラム
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果

基本情報

優先評価化学物質通し番号:	128
物質名称:	安息香酸ベンジル
CAS番号:	120-51-4

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 USHPV	融点	21 °C	21					experimental result		2B	○	○		(14) The Merck Index (1996) 12th edition, Susan Budavari, editor, Merck & Co. Inc., Whitehouse Station, NJ.	p.11
2 HSDB	融点	21 °C	21							2B	○	○		Budavari, S. (ed.). The Merck Index - Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals. Rahway, NJ: Merck and Co., Inc., 1989., p. 176	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
3 Merck	融点	21 °C	21							2B	○	○			
4 REACH登録情報	融点	21 °C	21		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		David R Lide (Ed.) Organic physical properties.2007,Handbook of Chemistry and physics 87th Edition.	Exp Key Melting point/freezing point.001
5 USHPV	融点	21 °C	21					experimental result		4A	×	×		CRC Handbook of Chemistry and Physics (2000) 82nd edition, David R. Lide, editor, The Chemical Rubber Co. Press, Inc., Boca Raton, FL.	
6 Aldrich	融点	17~20 °C	18.5							2B	×	×		Beilstein Shandbuch der Organischen Chemie volume.9, IV, p307	p.251
7 CCD	融点	18.8 °C	18.8							2B	×	×		記載なし	
8 Mackay	融点	19.4 °C	19.4							2B	×	×		Riddick, J., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents: Physical Properties and Method of Purification. 4th Edition, John Wiley & Sons, New York.	p.3077
9 CRC	融点	19±1 °C	19							2B	×	×		記載なし	1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
10 既存点核事業	融点	291~293K (18~20°C)	19							4A	×	×		Aldrich	
11 PhysProp	融点	21 °C	21							2B	○	×		記載なし	
12 IUCLID	凝固点	-18 °C	-18							4A	×	×		(1) Safety Data Sheet Haarman & Reimer GmbH, Revision date 28.03.1995	p.5
13 EPI Suite	融点	70.75 °C	70.75	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	128
物質名称	安息香酸ベンジル
CAS番号	120-51-4

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 ディの是非	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-是非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-是非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 USHPV	323~324 °C	323.5							experimental result		4A	×	○		(14) The Merck Index (1996) 12th edition, Susan Budavari, editor, Merck & Co. Inc., Whitehouse Station, NJ.	p.11
2 Aldrich	323~324 °C	323.5									4A	×	○		The Merck Index 14th, p.1127	p.251
3 HSDB	323~324 °C	323.5									4A	×	○		Budavari, S. (ed.). The Merck Index - Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals. Rahway, NJ: Merck and Co., Inc., 1989., p.176	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
4 Merck	323~324 °C	323.5									4A	×	○			
5 Mackay	323.5 °C	323.5									4A	×	×		Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, CRC Press, LLC. Boca Raton, Florida	p.3077
6 CRC	323.5 °C	323.5	323.5	760 mmHg							2B	○	×		記載なし	23 Enthalpy of Vaporization (Section 6) etc.
7 REACH登録情報	323.5 °C	323.5		[No detail on pressure or decomposition temperature]		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		David R Lide (Ed.). Organic physical properties.2007, Handbook of chemistry and physics 87th Edition.	Exp Key Boiling point.001
8 PhysProp	323.5 °C	323.5									4A	×	×		記載なし	
9 Merck	156 °C	156	194.9035394	4.5 mmHg							2B	×	×			
10 Merck	189~191 °C	190	231.3466315	16 mmHg							2B	×	×			
11 CRC	321.3±0.9 °C	321.3	321.3	760 mmHg							2B	○	×		記載なし	1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
12 既存点検事業	323 °C[596K(323°C)]	323									4A	×	×		Aldrich	
13 IUCLID	324 °C	324	324.0134359	1013 hPa							4A	×	×		(1) Safety Data Sheet Haarman & Reimer GmbH, Revision date 28.03.1995	p.5
14 CCD	325 °C	325									4A	×	×		記載なし	
15 EPI Suite	317.89 °C	317.89			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号:	128
物質名称:	安息香酸ベンジル
CAS番号:	120-51-4

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20℃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是非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラシク (評価Ⅰ)	キースタディ-是非 (評価Ⅰ)	キースタディ-是非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 USHPV	0.0010 mmHg	0.133322368	0.133	20 °C					experimental result		2B	×	○		FFHPVC Aromatic Consortium, Test Plan and Robust Summary for the Benzyl Derivatives Category. May 24, 2010.	p.11
2 PhysProp	0.000224 mmHg	2.99E-02	0.0212	25 °C					experimental result		2B	○	○		Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989.	
3 HSDB	0.000224 mmHg	2.99E-02	0.0212	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.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE:
4 REACH登録情報	0.000229 mmHg[0.000229 Torr]	3.05E-02	0.0216	25 °C		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	○		Etzweiler, F.; Senn, E.; Neuner-Jehle, N. Reaxys 2011 database. 1984. Berichte der Bunsen-Gesellschaft 1984, vol 88, No6, p578-583.	Exp Key Vapour pressure.001
5 USHPV	0.00052 mmHg	6.93E-02	0.0491	25 °C					experimental result		2B	×	○		FFHPVC Aromatic Consortium, Test Plan and Robust Summary for the Benzyl Derivatives Category. May 24, 2010.	p.11
6 Mackay	0.0104 Pa	0.0104	0.0074	25 °C					experimental result (corrected)	Antoine eq	2B	×	×		Riddick, J., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents: Physical Properties and Method of Purification, 4th Edition, John Wiley & Sons, New York.	p.3077
7 Mackay	461 Pa	461	0.8443	150 °C							4A	×	×	quoted lit.	Riddick, J., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents: Physical Properties and Method of Purification, 4th Edition, John Wiley & Sons, New York.	p.3077
8 Mackay	0.0137 Pa	0.0137	0.0097	25 °C					外挿 (補外)	Antoine eq	4C	×	×		Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1984) The Vapor Pressures of Pure Substances, 2nd Edition, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands.	p.3077
9 Mackay	0.043 Pa	0.043	0.0305	25 °C					内挿 (補間)	Antoine eq.-I	4C	×	×		Stephenson, R.M., Malanowski, S. (1987) Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds, Elsevier Science Publishing Co., Inc., New York.	p.3077
10 Mackay	0.0107 Pa	0.0107	0.0076	25 °C	その他,				estimated by calculation	Sugden's parachor method	4C	×	×		Tsuzuki, M. (2001) Vapor pressures of carboxylic acid esters including pyrethroids: measurement and estimation from molecular structure. Chemosphere 45, 729-736.	p.3077
11 Mackay	0.0135 Pa	0.0135	0.0096	25 °C	その他,				estimated by calculation	McGowan's parachor method	4C	×	×		Tsuzuki, M. (2001) Vapor pressures of carboxylic acid esters including pyrethroids: measurement and estimation from molecular structure. Chemosphere 45, 729-736.	p.3077

基本情報

優先評価化学物質通し番号:	128
物質名称:	安息香酸ベンジル
CAS番号:	120-51-4

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是非	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-是非 (評価Ⅰ)	キースタディ-是非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
12 Mackay	0.0178 Pa	0.0178	0.0126	25 °C	その他,				その他 (推定値)	GC-RT correlation	2B	×	×		Tsuzuki, M. (2001) Vapor pressures of carboxylic acid esters including pyrethroids: measurement and estimation from molecular structure. Chemosphere 45, 729-736.	p.3077
13 Mackay	0.0603 Pa	0.0603	0.0427	25 °C	その他,				estimated by calculation	calculated-MW	4C	×	×		Tsuzuki, M. (2001) Vapor pressures of carboxylic acid esters including pyrethroids: measurement and estimation from molecular structure. Chemosphere 45, 729-736.	p.3077
14 Mackay	0.295 Pa	0.295	0.2091	25 °C	その他,				estimated by calculation	calculated-MCI	4C	×	×		Tsuzuki, M. (2001) Vapor pressures of carboxylic acid esters including pyrethroids: measurement and estimation from molecular structure. Chemosphere 45, 729-736.	p.3077
15 Aldrich	1 mmHg	133.3223684	0.5961	125 °C							4A	×	×		Beilstein Shandbuch der Organischen Chemie volume.9, IV, p307	p.251
16 IUCLID	0.1 hPa	10	10	20 °C							4A	×	×		(1) Safety Data Sheet Haarmann & Reimer GmbH, Revision date 28.03.1995	p.5
17 EPI Suite	0.0786 Pa	0.0786	0.0557	25 °C	MPBPWIN(v.1.43)				(Q)SAR		2C	×	×			
18 Mackay	-4.467041722	log(P/mmHg)	0.00455	20	log (P/mmHg) 6.42726 – 1594.49/(126.36 + t/°C)				外挿(補外)	Antoine eq	4C	×	×	temp range 224.7–329.09°C (from twin ebulliometry measurement,)	Hon, H.C., Singh, R.P., Kudchadker, A.P. (1976) Vapor pressure-boiling point measurement of five organic substances by twin ebulliometry. J. Chem. Eng. Data 21, 430-431.	p.3077
19 Mackay	-5.211687718	log (P/kPa)	0.00614	20	log (P/kPa) = 5.59354 – 1628.726/(130.735 + t/°C);				外挿(補外)	Antoine eq from reported exptl.data of Hon et al. 1976	4C	×	×	temp range 224.7–329°C	Boublik et al. 1984 The Vapor Pressures of Pure Substances. 2nd Edition	p.3077
20 Mackay	-5.342141722	log (P/kPa)	0.00455	20	log (P/kPa) = 5.55216 – 1594.49/(126.36 + t/°C);					Antoine eq	4C	×	×	temp range not specified	Riddick et al. 1986 Organic Solvents: Physical Properties and Method of Purification. 4th	p.3077
21 Mackay	-3.989029538	log(P/mmHg)	0.0137	20	log (P/mmHg) = -1.654 – 4.6284 × 10 ³ /(T/K) + 7.363·log (T/K) – 1.8259 × 10 ⁻² ·(T/K) + 7.4580 × 10 ⁻⁵ ·(T/K) ²				内挿(補間)	vapor pressure eq	4C	×	×	temp range 293–820 K	Yaws, C.L. (1994) Handbook of Vapor Pressure, Vol. 1 C1 to C4 Compounds, Vol. 2. C5 to C7 Compounds, Vol. 3, C8 to C28 Compounds. Gulf Publishing Co	p.3077

基本情報

優先評価化学物質通し番号:	128
物質名称:	安息香酸ベンジル
CAS番号:	120-51-4

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 ディの是非	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-非 (評価Ⅰ)	キース タ ディ-非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 REACH登録情報	15.9 mg/L, 15.9 mg/L, 14.1mg/L	15.3	15.3	20 °C	4.5	flask method	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×	○	pH measurement and quantitative analysis by HPLC	1992,1992.5.17.	Exp Key Water solubility.001
2 IUCLID	15.3 mg/L	15.3	15.3	20 °C	4.5		yes					4A	×	○	purity 99.4%	(3) Bayer AG data, 1992	p.5
3 PhysProp	15.39 mg/L	15.39	14.36666408	25 °C						estimated by calculation		4C	×	×		Meylan, W. M. et al. (1996) Improved Method for Estimating Water Solubility from Octanol/Water Partition Coefficient	
4 Mackay	15.73 mg/L	15.73	14.68405627	25 °C								2B	○	×		Seidell, A. (1941) Solubilities of Organic Compounds. Vol. 2, Van Nostrand, New York.; Deno, N.C., Berkeimer, H.E. (1960) Part I. Phase equilibria molecular transport thermodynamics. J. Chem. Eng. Data 5(1), 1-5.	p.3077
5 USHPV	34.8 mg/L	34.8	32.48602403	25 °C						estimated by calculation	U.S. EPA. 2010. Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v4.0.	4C	×	×	U.S. Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.		p.10
6 EPI Suite	34.85 mg/L	34.85	32.53269935	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×	[2B以上の値を用いて推定 (2C)]		
7 Mackay	61.21 mg/L	61.21	57.13992905	25 °C		その他,calculated-intrinsic molar volume V I and solvatochromic parameters				estimated by calculation		4C	×	×		Leahy, D.E. (1986) Intrinsic molecular volume as a measure of the cavity term in linear solvation energy relationships: Octanol-water partition coefficients and aqueous solubilities. J. Pharm. Sci. 75, 629- 636.	p.3077
8 CCD	[Insoluble in water]	単位換算不可										3	×	×			
9 CRC	[insoluble]	単位換算不可										3	×	×			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
10 HSDB	[INSOL IN WATER]	単位換算不可										3	×	×		Budavari, S. (ed.). The Merck Index - Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals. Rahway, NJ: Merck and Co., Inc., 1989., p. 176	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
11 Merck	[Practically insol in water]	単位換算不可										3	×	×			
12 既存点検事業	[加水分解のため 測定不可]	単位換算不可										3	×	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号:	128
物質名称:	安息香酸ベンジル
CAS番号:	120-51-4

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 是非	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- 是非 (評価Ⅰ)	キース タディ- 是非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 USHPV	3.97	3.97							experimental result		2B	○	○		Sangster, J. (1989) Octanol-water partition coefficients of simple organic compounds. J. Phys. Chem. Ref. Data 18(3), 1111-1229.	p.12
2 CRC	3.97	3.97	25 °C								2B	○	○		Sangster, J. (1989) Octanol-water partition coefficients of simple organic compounds. J. Phys. Chem. Ref. Data 18(3), 1111-1229.	38 Octanol-Water Partition Coefficients (Section 16)
3 Mackay	3.97[recommen ded]	3.97									2B	○	○	recommended value,	Sangster, J. (1989) Octanol-water partition coefficients of simple organic compounds. J. Phys. Chem. Ref. Data 18(3), 1111-1229.	p.3078
4 REACH登録情 報	3.97	3.97	25 °C	[No details on pH stated]		no data	2: reliable with restrictio ns	key study	experimental result		4A	×	○		Sangster, J. (1989) Octanol-water partition coefficients of simple organic compounds. J. Phys. Chem. Ref. Data 18(3), 1111-1229.	Exp Key Partition coefficient.001
5 PhysProp	3.97	3.97							experimental result		2B	○	×		Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995., p. 120	
6 HSDB	3.97	3.97									2B	○	×		Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995., p. 120	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT:
7 Mackay	4.00	4.00			その他、V ₁ and solvatochromi c parameters				estimated by calculation		4C	×	×	calculated-VI and solvatochromic parameters	Taft, R.W., Abraham, M.H., Famini, G.R., Doherty, R.M., Abboud, J.-L.M., Kamlet, M.J. (1985) Solubility properties in polymers and biological media: 5. An analysis of the physicochemical properties which influence octanol-water partition coefficients of aliphatic and aromatic solutes. J. Pharm. Sci. 74(8), 807-814.	p.3078
8 Mackay	3.86	3.86			その他、V ₁ and solvatochromi c parameters				estimated by calculation		4C	×	×	calculated-VI and solvatochromic parameters	Taft, R.W., Abraham, M.H., Famini, G.R., Doherty, R.M., Abboud, J.-L.M., Kamlet, M.J. (1985) Solubility properties in polymers and biological media: 5. An analysis of the physicochemical properties which influence octanol-water partition coefficients of aliphatic and aromatic solutes. J. Pharm. Sci. 74(8), 807-814.	p.3078
9 IUCLID	3.9	3.9			その他、according to Howard				estimated by calculation		4C	×	×	according to Howard	(2) Haarman & Reimer data	p.5
10 EPI Suite	3.54	3.54			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号:	128
物質名称:	安息香酸ベンジル
CAS番号:	120-51-4

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 Henry計算式		0.781					EST	H=VP/(WS/MW)	4C	×	○	VP(0.0563)、WS(15.3)、MW(212.24)を用 いて計算		
2 EPI Suite	0.207 Pa・ m ³ /mol	0.207					(Q)SAR	HENRYWIN(v.3.20)	2C	○	×	Bond Estimation Method		
3 Mackay	0.57 Pa・ m ³ /mol	0.57					estimated by calculation		4C	×	×	calculated-P/C with selected values		p.3078
4 PhysProp	0.0000028 atm・ m ³ /mol	0.28371					estimated by calculation		4C	×	×		Meylan, W., Howard, P.H. (1991) Bond contribution method for estimating Henry's law constants. Environ. Toxicol. Chem. 10, 1283 -1293.	
5 USHPV	2.3E-7 atm・ m ³ /mol	0.02330475					estimated by calculation	U.S. EPA. 2010. Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v4.0.	4C	×	×	U.S. Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA. Available online from: http://www.epa.gov/opptintr/exposure/ pubs/episuite.htm as of March 24, 2010.		p.11

基本情報

優先評価化学物質通し番号:	128
物質名称:	安息香酸ベンジル
CAS番号:	120-51-4

▲ 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 の是非	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-是非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-是非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 REACH登録情報	Koc	6310 L/kg	6310	40°C			OECD TG 121	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	○	HPLC	2013,2013.1.17.	Exp Key Adsorption / desorption.001
2 USHPV	logKoc	3.4	2511.886432								estimated by calculation		4C	×	×			p.14
3 EPI Suite	Koc	1136 L/kg[2B以上の値を用いて推定(2C)]	1136				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	128
物質名称	安息香酸ベンジル
CAS番号	120-51-4

BCF

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 の誤非	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-誤非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-誤非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite					BCF	Suite	193.4 L/kg (wet)	193.4	BCFBAF (v.3.01)				(Q)SAR	2B以上の値を用 いて推定 (2C)	2C	○	○			
2 OASIS Catalogic					logBCF		1.39	26.9	OASIS Catalogic (v.5.11.16)				(Q)SAR		2C	×	×			
3 NITEカテゴリーア プローチ					BCF		予測不能	-	専門家判断				類推	カテゴリー-V 類似物質なし	3	×	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号:	128
物質名称:	安息香酸ベンジル
CAS番号:	120-51-4

↑
pKa

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 の誤非	値の種類	値の種類の詳細	キースタ ディ誤非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
------	----	---	------	------------	----	-------	-----	-------------	--------------------------	------	---------	-----------------------	----	----	--------

No DATA

参考情報

優先評価化学物質通し番号:	128
物質名称:	安息香酸ベンジル
CAS番号:	120-51-4

生分解性

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当	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
1 既存点検事業		90%	O ₂ consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result			K-1318	
2 既存点検事業		88%	O ₂ consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result			K-1318	
3 既存点検事業		92%	O ₂ consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result			K-1318	
4 既存点検事業		100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result			K-1318	
5 既存点検事業		100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result			K-1318	
6 既存点検事業		100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result			K-1318	
7 USHPV	readily biodegradable	93%	CO ₂ evolution		OECD TG 301B				experimental result		Readily Biodegradable	Birch R.R. and Fletcher, R. J. (1994) The ultimate biodegradability of base perfumes in the sealed vessel test. Benzyl benzoate. Quest International Ltd. Report no. BD/PER/01.	p.14-15