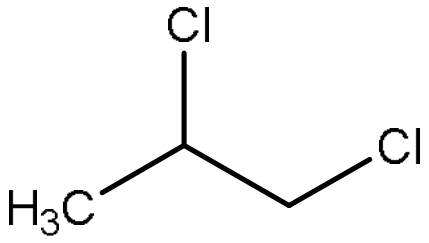
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

人健康影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

１，２－ジクロロプロパン

優先評価化学物質通し番号 12



平成 28 年 6 月

経済産業省

目　　次

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

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	－	112.99	－	112.99
融点	℃	-100.4[2-6)]	測定値	-100.4[2)]
沸点	℃	96.4[3-6)]	101.3 kPa での測定値	96.2[7)]
蒸気圧	Pa	5,622[4,6,8)]	複数の温度における測定値に基づく回帰式から 20℃に内挿した値	4,693[2)]
水に対する溶解度	mg/L	2,700[9,10)]	20℃での測定値	2,614[2)]
1-ｵｸﾀﾉｰﾙと水との間の分配係数(logPow)	－	1.98[4,6-8)]	測定値	2.00[2)]
ヘンリー係数	Pa･m^3/mol	285.7[3,4,7-9)]	測定値	256.5
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	46.8[4,7,9,11)]	1 土壌（silt loam soil）での測定値	46.8[9,11)]
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	2.87	濃縮度試験における測定値[12)]	2.87
生物蓄積係数(BMF)	－	1	logPow と BCF から設定[13)]	1
解離定数(pKa)	－	－	解離性の基を有さない物質	－[14)]

1) 平成 27 年度第 2 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 27 年 6 月 10 日）で了承された値
2) OECD(2003)
3) ECHA(2015-02-23 閲覧)
4) HSDB(2015-02-23 閲覧)
5) IUCLID(2000)
6) MOE(2004)
7) NITE(2005)
8) PhysProp(2015-02-23 閲覧)
9) Mackay(2006)
10) IUPAC
11) ATSDR(1989)
12) MITI(1978)
13) MHLW, METI, MOE(2014)
14) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない

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で採用した値は,OECD (2003) に記載された測定値である。ECHA,HSDB,IUCLID (2000),MOE (2004) にもこの値が記載されており、評価Ⅱにおいてもこの値 (-100.4℃) を用

いる。

②沸点

評価Ⅰで採用した値は,NITE (2005) に記載された値であるが､測定値であるか不明である。ECHA,HSDB,IUCLID (2000),MOE (2004) には標準圧力 (101.3 kPa) での測定値が記載されており、評価Ⅱにおいてはこの値 (96.4℃) を用いる。

③蒸気圧

評価Ⅰで採用した値は,OECD (2003) に記載された 25℃での測定値を 20℃に補正したものである。一方で,HSDB,MOE (2004),PhysProp にも 25℃での測定値 (7,106 Pa) が記載されており、評価Ⅱにおいては、この値の情報源における 20℃を含む範囲の複数の温度での測定値に基づく回帰式を用いて算出した 20℃の蒸気圧 (5,622 Pa) を用いる。

④水に対する溶解度

評価Ⅰで採用した値は、OECD (2003) に記載された 25℃での測定値 (2,800 mg/L) を 20℃に補正したもの (2,614 mg/L) である。Mackay (2006),IUPAC には 20℃での測定値が記載されており、評価Ⅱにおいてはこの値 (2,700 mg/L) を用いる。

⑤logPow

評価Ⅰで採用した値は,OECD (2003) に記載された推計値である。HSDB,MOE (2004),NITE (2005),PhysProp には測定値が記載されており、評価Ⅱにおいてはこの値 (1.98) を用いる。

⑥ヘンリー係数

評価Ⅰで採用した値は、信頼性ランク 2B の 22 データにおける中央値である。ECHA,HSDB,Mackay (2006),NITE (2005),PhysProp には測定値が記載されており、評価Ⅱにおいてはこの値 (285.7 $Pa \cdot m^3/mol$) を用いる。

⑦Koc

評価Ⅰで採用した値は,ATSDR (1989),Mackay (2006) に記載された 1 土壌 (silt loam soil) での測定値である。HSDB,NITE (2005) にもこの値が記載されており、評価Ⅱにおいてもこの値 (46.8 L/kg) を用いる。

⑧BCF

評価Ⅰで採用した値は,MITI (1978) に記載された測定値である。この試験においては定常状態での BCF が算出されていないため、各濃度区の後半 3 回の測定値の算術平均値のうち、最大値を用いている。ECHA,IUCLID (2000),NITE (2005),OECD (2003) でもこのデータが引用されており、評価Ⅱにおいてもこの値 (2.87 L/kg) を用いる。

⑨BMF

評価Ⅰで採用した値は、logPow (1.98) 及び BCF (2.87 L/kg) から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ダンス (以下、「技術ガイダンス」という。) に従って設定したものである。BMF の測定値は得られなかったため、評価Ⅱにおいてもこの値 (1) を用いる。

1-2 分解性

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。

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		NA	
	機序別の半減期	OH ラジカルとの反応	36	AOPWIN (V.1.92)[2)]により推計。反応速度定数の推定値から、OH ラジカル濃度 5×10^5 molecule/cm^3 として算出 [3-5)]
		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		NA	
	機序別の半減期	生分解	1,300	土壌中生分解の項参照
		加水分解	5,800	反応速度定数の測定値から算出 [6-8)]
		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	1,300	馴化した好気的な土壌サンプルを用いた試験結果から算出 [6,7)]
		加水分解	5,800	水中加水分解の項参照
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	5,200	水中生分解半減期の 4 倍と仮定
		加水分解	5,800	水中加水分解の項参照

1) 平成 27 年度第 2 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 27 年 6 月 10 日）で了承された値
2) EPI Suite(2012)
3) HSDB(2015-02-23 閲覧)
4) MOE(2004)
5) NITE(2005)
6) Mackay(2006)
7) Howard(1991)
8) OECD(2003)
NA:情報が得られなかったことを示す

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。

①大気

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。また、機序別の半減期についても、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応に関する情報は得られなかった。

①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

大気中における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値に関する情報は得られなかったため、AOPWIN (v1.92) により推計された 4.42×10^{-13} cm^3/molecule/s を半減期算出に採用する。この反応速度定数は HSDB,MOE (2004),NITE (2005) にも記載されている。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの 5×10^5 molecule/cm^3 とした場合、半減期は 36 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (36 日) を用いる。なお,Howard (1991),Mackay (2006) においても OH ラジカ

ルとの反応の半減期についての記載があり,26.9 日とされている。

②水中

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、生分解と加水分解の機序別の半減期に関する情報が得られた。

②-1　生分解の半減期

水中での生分解半減期に関するデータは得られなかった。Howard (1991),Mackay (2006) において、馴化した好気的な土壌サンプルを用いた試験結果から水中での生分解の半減期を 30,936 時間と算出している。評価Ⅱでは生分解による半減期を 1,300 日とする。なお、MITI (1978) (2) において、被験物質濃度 100 mg/L、活性汚泥濃度 30 mg/L で 14 日間試験を行った結果、BOD 分解度、TOC 分解度、GC 分解度はそれぞれ 0 %,0.8 %,1.5 %であった。また,Howard (1989),HSDB においては、生分解は重要な消失プロセスではないとの記載がある。

②-2　加水分解の半減期

Howard (1991),Mackay (2006),OECD (2003) において、反応速度定数の測定値 (5.0×10^{-6} h^{-1}) から加水分解の半減期を 15.8 年と算出している。評価Ⅱでは加水分解による半減期を 5,800 日とする。なお、Howard (1989),HSDB においては、加水分解による半減期を 6 か月から数年としている。

③土壌

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、生分解の機序別の半減期に関する情報が得られた。

③-1　生分解の半減期

Howard (1991),Mackay (2006) において、馴化した好気的な土壌サンプルを用いた試験結果から土壌中での生分解の半減期を 30,936 時間と算出している。評価Ⅱでは生分解による半減期を 1,300 日とする。

③-2　加水分解の半減期

半減期に関するデータは得られなかったため、土壌中での加水分解半減期は、技術ガイダンスに従って、水中の加水分解半減期と同じ 5,800 日とする。

④底質

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。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

半減期に関するデータは得られなかったため、底質中での生分解半減期は、技術ガイダンスに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 5,200 日とする。

④-2　加水分解の半減期

半減期に関するデータは得られなかったため、底質中での加水分解半減期は、技術ガイダンスに従って、水中の加水分解半減期と同じ 5,800 日とする。

2 【付属資料】

2-1 物理化学的性状等一覧

収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

出典）

ATSDR(1989): Agency for Toxic Substances and Disease Registry. “Toxicological Profile for 1,2-dichloropropane”, Toxicological Profiles. 1989.

ECHA: ECHA. Information on Chemicals – Registered substances. http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances, (2015-02-23 閲覧).

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

Howard(1989): Howard, P. H. et al. Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. CRC Press, 1989.

Howard(1991): Howard, P. H. et al. Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis publishers, 1991.

HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB, (2015-02-23 閲覧).

IUCLID(2000): EU ECB. IUCLID Dataset, 1,2-dichloropropane. 2000.

IUPAC: The IUPAC Solubility Data Series, U.S. National Institute of Standards and Technology

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

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

MITI(1978): MITI. 1,2-ジクロロプロパン (試料 No.K-19) の濃縮度試験成績報告書. 既存化学物質点検, 1978.

MITI(1978)(2): MITI. 1,2-ジクロロプロパン (試料 No.K-19) の分解度試験成績報告書. 既存化学物質点検, 1978.

MOE(2004): MOE. 化学物質の環境リスク評価 第 3 巻, 1,2-ジクロロプロパン. 2004.

NITE(2005): NITE. 化学物質の初期リスク評価書, 1,2-ジクロロプロパン. Ver. 1.0, No. 39, 2005.

OECD(2003): OECD. SIDS Initial Assessment Report, 1,2-dichloropropane. 2003.

PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2015-02-23 閲覧).

2-2 その他

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, 15th, John Wiley & Sons, 2007
CICAD	WHO/IPCS:「国際簡潔評価文書(CICAD)」
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, Version 2013, CRC-Press
EHC	WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
EURAR	EU ECB(European Chemicals Bureau):「リスク評価書(EU Risk Assessment Report)」
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUPAC	The IUPAC Solubility Data Series
JCP	Japanチャレンジプログラム
Lange	Lange's Handbook of Chemistry, McGraw-Hill, 2005
Mackay	Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Second Edition
Merck	The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006
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」
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」
NITE有害性評価書	(財)化学物質評価研究機構・(独)製品評価技術基盤機構:「化学物質有害性評価書」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SIDS	OECD: SIDSレポート
SPARC	SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry
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

優先通し番号	12000
物質名称	1，2−ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

融点

収集データ

	情報源名	項目	値	統一表記[℃]	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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
1	Aldrich	融点	-100 °C	-100							2B	×			p.942
2	ATSDR	凝固点	-100.44 °C	-100.44	-	-	-	-	-		2B	×	-	Riddick JA, Bunger WB, Sakano TK. 1986. Organic solvents. Physical properties and methods of purification. 4th ed. New York, NY: John Wiley and Sons, 449-450	p.73
3	CCD	凝固点	-80 °C	-80	-	-	-	-	-		2B	×	-		Propylene Dichloride
4	EPI Suite	融点	-79.67 °C	-79.67	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
5	HSDB	融点	-100.4 °C	-100.4							2B	○		LIDE, D.R., ed. (1991-1992) CRC Handbook of Chemistry and Physics, 72nd ed., Boca Raton, CRC Press, p. 3-412	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
6	IUCLID	融点	-100.4 °C	-100.4	その他	no data					4A	○		WEAST, R.C., ed. (1988) CRC Handbook of Chemistry and Physics, 69th ed., Boca Raton, CRC Press.	p.12
7		融点	-100 °C	-100	その他						4A	×		その他	p.12
8		融点	-100 °C	-100	その他,not specified	no data					4A	×		その他	p.12
9		凝固点	-100 °C	-100	その他,not specified	no data					4A	×	Hazardous decomposition products: hydrogen chloride, chlorine, phosgene	その他	p.12
10		凝固点	-80 °C	-80	その他	no data					4A	×	Hazardous decomposition products: CO, HCl, CHCl.		p.12
11	Mackay	融点	-100.53 °C	-100.53	-	-	-	-	-		2B	×	-	Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, CRC Press, LLC, Boca Raton, Florida.	p.1031
12	Merck	凝固点	-70 °C	-70	-	-	-	-	-		2B	×	Solidifies below -70°		Monograph Number: 0007854
13	MOE初期評価	融点	-100.4 °C	-100.4	-	-	-	-	-		2B	○	-	LIDE, D.R., ed. (1991-1992) CRC Handbook of Chemistry and Physics, 72nd ed., Boca Raton, CRC Press, p. 3-412 [HSDB]	p.1
14	NITE初期リスク評価書	融点	-100 °C	-100	-	-	-	-	-		2B	×	-	IPCS, International Programme on Chemical Safety (2000) ICSC, International Chemical Safety Cards,Geneva. (http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtasht/index.htm から引用)	p.2
15	PhysProp	融点	-100 °C	-100	-	-	-	-	-		2B	×	-		p.1
16	REACH登録情報	凝固点	-100.4 °C[freezing point]	-100.4		no data	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	○		その他 publication,OECD SIDS(2003)(2003.11.14),OECD SIDS 1,2-DICHLOROPROPANE,UNEP PUBLICATIONS	Exp Key Melting point/freezing point.001

基本情報

優先通し番号	12000
物質名称	1，2－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

融点

収集データ

	情報源名	項目	値	統一表記[℃]	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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
17		融点	-100.4 °C	-100.4		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	○		その他 review article or handbook,D. R. Lide (ed)(1997),CRC Handbook of Chemistry and Physics 78th Edition,CRC Press, Boca Raton, New York	Exp Key Melting point/freezing point.001
18	SIDS	融点	-100.4 °C	-100.4			2: reliable with restrictions	key study			2A	○		その他	p.6, Dossier p.39

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	１，２－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

沸点

収集データ

	情報源名	沸点	統一表記[℃]	101.325 kPaにおける沸点[℃]	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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
1	Aldrich	95～96 °C	95									4A	×			p.942
2	ATSDR	96.37 °C	96.37			-	-	-	-	-		4A	×	-	Riddick JA, Bunger WB, Sakano TK. 1986. Organic solvents. Physical properties and methods of purification. 4th ed. New York, NY: John Wiley and Sons. 449-450.	p.73
3	CCD	96.3 °C	96.3	96.3	760 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×	-		Propylene Dichloride
4	EHC	96.8 °C	96.8			-	-	-	-	-		4A	×	-		PART B 2.2 Physical and chemical properties
5	EPI Suite	101.17 °C	101.17			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
6	HSDB	96.4 °C	96.4									4A	○		LIDE, D.R., ed. (1991-1992) CRC Handbook of Chemistry and Physics, 72nd ed., Boca Raton, CRC Press, p. 3-412	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
7		-3.7 °C	-3.7	20.54851	10 mmHg							2B	×		その他	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
8	IUCLID	95～100 °C	95			その他,DIN 53 171						4A	×		その他	p.12
9		95～100 °C	95			その他,DIN 53 171	no data					4A	×		その他	p.12
10		96 °C	96			その他,not specified	no data					4A	×		その他	p.13
11		96.4 °C	96.4			その他,not specified	no data					4A	○		WEAST, R.C., ed. (1988) CRC Handbook of Chemistry and Physics, 69th ed., Boca Raton, CRC Press.	p.13
12		96.5 °C	96.5			その他,not specified	no data					4A	×		その他	p.13
13		96.6 °C	96.6			その他,not specified	no data					4A	×		その他	p.13
14		96.8 °C	96.8			その他,not specified	no data					4A	×		その他	p.13
15		96 °C	96			その他	no data					4A	×			p.13
16	Mackay	96.4 °C	96.4			-	-	-	-	-		4A	×	-	McGovern, E.W. (1943) Chlorohydrocarbon solvents. Ind. Eng. Chem. 35(12). 1230–1239.	p.1031
17	Merck	95～96 °C	95			-	-	-	-	-		4A	×	-		Monograph Number: 0007854
18	MOE初期評価	95～96 °C	95			-	-	-	-	-		4A	×	-	BUDAVARI, S., ed. (1996) The Merck Index, 12th ed., Whitehouse Station, Merck & Co.	p.1
19		96.4 °C	96.4			-	-	-	-	-		4A	○	-	LIDE, D.R., ed. (1991-1992) CRC Handbook of Chemistry and Physics, 72nd ed., Boca Raton, CRC Press, p. 3-412 [HSDB]	p.1
20	NITE初期リスク評価書	96 °C	96	96.00831	101300 Pa	-	-	-	-	-		2B	×	-	Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.	p.2
21	PhysProp	95.5 °C	95.5			-	-	-	-	-		4A	×	-		p.1

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	１，２－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

沸点

収集データ

	情報源名	沸点	統一表記[℃]	101.325 kPaにおける沸点[℃]	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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
22	REACH登録情報	96.4 °C	96.4				no data	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×		その他 publication,OECD SIDS(2003)(2003.11.14),OECD SIDS 1,2-DICHLOROPROPANE,UNEP PUBLICATIONS	Exp Key Boiling point.001
23		96.4 °C	96.4	96.40831	101.3 kPa		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	○		その他 review article or handbook,D. R. Lide (ed)(1997),CRC Handbook of Chemistry and Physics 78th Edition,CRC Press, Boca Raton, New York	Exp Key Boiling point.001
24	SIDS	96.4 °C	96.4				no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		Howard, P. H. Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. Lewis Publishers, 1990	p.6, Dossier p.39-40
25		94～96.8 °C	94					2: reliable with restrictions	key study			4A	×		その他	p.6, Dossier p.40
26	既存点検事業	96.8 °C	96.8			-	-	-	-	-		4A	×	-	提示資料	K0019
27		96.4 °C	96.4			-	-	-	-	-		4A	×	-		K0019

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	１，２－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク	評価Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
1	Aldrich	40 mmHg	5332.895	5562.062	19.4 °C							2B	×			p.942
2	ATSDR	49.67 mmHg	6622.122	4694.44	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×	-	Riddick JA, Bunger WB, Sakano TK. 1986. Organic solvents. Physical properties and methods of purification. 4th ed. New York, NY: John Wiley and Sons. 449-450	p.72
3	EHC	42 mmHg	5599.539	5599.539	20 °C	-	-	-	-	-		2B	×	42 mmHg at 20 °C (27.9 kPa at 19.6 °C)		PART B 2.2 Physical and chemical properties
4		27.9 kPa	27900	28693.12	19.6 °C	-	-	-	-	-		2B	×	-		PART B 2.2 Physical and chemical properties
5	EPI Suite	5890 Pa[2B以上の値を用いて推定（2C）]	5890	4175.436	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
6	HSDB	53.3 mmHg	7106.082	5622	25 °C							2B	○	20℃の値を回帰式から計算	Boublik, T., Fried, V., and Hala, E., The Vapour Pressures of Pure Substances. Second Revised Edition. Amsterdam: Elsevier, 1984. 177.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE:
7	IUCLID	13.3 hPa	1330	9876.871	-6.1 °C	その他,not specified	no data			estimated by calculation		4C	×		その他	p.15
8		298.2 hPa	29820	2539.666	60 °C	その他	no data			experimental result		4A	×			p.16
9		18 hPa	1800	8084	0 °C	その他,not specified	no data			estimated by calculation		4C	×		その他	p.15
10		51～56 hPa	5100	5100	20 °C	その他,not specified	no data			estimated by calculation		4C	×		その他	p.15
11		52.3 hPa	5230	5230	20 °C	その他,not specified	no data			estimated by calculation		4C	×		その他	p.15
12		56 hPa	5600	5600	20 °C		no data					4A	×		その他	p.15
13		137 hPa	13700	13700	20 °C	その他,not specified	no data			estimated by calculation		4C	×		その他	p.16
14		53 hPa	5300	5300	20 °C	その他	no data			experimental result		4A	×			p.16
15		137 hPa	13700	3695.683	40 °C							4A	×		その他	p.16
16		135.5 hPa	13550	3655.22	40 °C	その他	no data			experimental result		4A	×			p.16

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	１，２－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク	評価Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
17	Mackay	7200 Pa	7200	5104.099	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×	6720 (calculated-Antoine eq.) log (P/mmHg) = 6.98047 – 1308.138/(222.845 + t/°C); temp range 44.8–96.2°C (Antoine eq. from reported exptl. data of Dreisbach & Shrader 1949, Boublik et al. 1973)	Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1973) The Vapor Pressures of Pure Substances. Elsevier, Amsterdam.	p.1031
18		6620 Pa	6620	4692.935	25 °C	その他,ebulliometry, measured range 44.78–96.2°C	-	-	-	内挿（補間）	interpolated-Antoine eq.	4C	×	16500* (44.78°C, ebulliometry, measured range 44.78–96.2°C, Dreisbach & Shrader 1949)		p.1031
19		5410 Pa	5410	5410	20 °C	-	-	-	-	その他,quoted from DIPPR	-	2B	×	6620 (calculated-Antoine eq.) log (P/mmHg) = 6.96395 – 1295.9/(221.0 + t/°C); temp range 15–160°C (Antoine eq. for liquid state, Dreisbach 1959) log (P/mmHg) = 6.96546 – 1296.4/(221.0 + t/°C); temp range 15–135°C (Antoine eq.	Dreisbach, R.R. (1955–1961) Physical Properties of Chemical Compounds. Am. Chem. Soc. Adv. Chem. Series 15 (1955), 22 (1959) and 29 (1961). Washington DC.	p.1031
20		8790 Pa	8790	4467.769	30 °C	-	-	-	-	その他,quoted from DIPPR	-	2B	×	5410, 8790, 13790 (20, 30, 40°C, quoted from DIPPR, Tse et al. 1992) log (P/mmHg) = 5.4819 – 2.1918 × 10^3/(T/K) + 2.6014・log (T/K) – 1.1751 × 10^–2・(T/K) + 7.3435 × 10^–6・(T/K)^2; temp range 173–	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022.	p.1031
21		13790 Pa	13790	3719.961	40 °C	-	-	-	-	その他,quoted from DIPPR	-	4A	×	5410, 8790, 13790 (20, 30, 40°C, quoted from DIPPR, Tse et al. 1992) log (P/mmHg) = 5.4819 – 2.1918 × 10^3/(T/K) + 2.6014・log (T/K) – 1.1751 × 10^–2・(T/K) + 7.3435 × 10^–6・(T/K)^2; temp range 173–	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022.	p.1031

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	１，２－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク	評価Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
22		6930 Pa	6930	4912.695	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×	6720, 7120 (calculated-Antoine eq.) log (P/kPa) = 6.10153 – 1305.689/(222.567 + t/°C), temp range 55.78–96.2°C (Antoine eq. from reported exptl. data) log (P/kPa) = 6.73547 – 1717.264/(266.9 + t/°C), temp range 15–99.7°C (Antoine eq.	Dean, J.D., Editor (1992) Lange's Handbook of Chemistry. 14th ed. McGraw-Hill, Inc., New York.	p.1031
23		6780 Pa	6780	4806.36	25 °C	-	-	-	-	その他,Antoine eq. regression, temp range –7 to 141.6°C	-	2B	×	6720, 7120 (calculated-Antoine eq.) log (P/kPa) = 6.10153 – 1305.689/(222.567 + t/°C), temp range 55.78–96.2°C (Antoine eq. from reported exptl. data) log (P/kPa) = 6.73547 – 1717.264/(266.9 + t/°C), temp range 15–99.7°C (Antoine eq.	該当なし	p.1031
24		16500 Pa	16500	3334.731	44.78 °C	-	-	-	-	-		4A	×	6622 (selected) log (P/kPa) = 6.08885 – 1295.9/(221.0 + t/°C); temp range not specified (Antoine eq.)	Riddick, J.A., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents: Physical Properties and Methods of Purification. 4th Edition, John Wiley & Sons, New York.	p.1031
25		6620 Pa	6620	4692.935	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-Antoine eq.	4C	×	6620 (interpolated-Antoine eq.) log (P_L/kPa) = 6.08324 – 1292.64/(–52.52 + T/K); temp range 239–373 K (Antoine eq.)	Stephenson, R.M., Malanowski, S. (1987) Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds. Elsevier Science Publishing Co., Inc., New York.	p.1031
26		6720 Pa	6720	4763.826	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-Antoine eq.	4C	×	5410, 8790, 13790 (20, 30, 40°C, quoted from DIPPR, Tse et al. 1992) log (P/mmHg) = 5.4819 – 2.1918 × 10^3/(T/K) + 2.6014・log (T/K) – 1.1751 × 10^–2・(T/K) + 7.3435 × 10^–6・(T/K)^2; temp range 173–579 K (vapor pressure eq.)	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022.	p.1031
27		6720 Pa	6720	4763.826	25 °C	その他,isoteniscope method, measured range 15–99.7°C	-	-	-	estimated by calculation	calculated-Antoine eq.	4C	×	7200* (isoteniscope method, measured range 15–99.7°C, Nelson & Young 1933) log (P/mmHg) = 7.7085 – 1782.8/(T/K); temp range 15–100°C (isoteniscope, Nelson & Young 1933)	Nelson, O.A., Young, H.D. (1933) Vapor pressure of fumigants. V. α,β-Propylene dichloride. J. Am. Chem. Soc. 55, 2429.	p.1031

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	１，２－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク	評価Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
28		7120 Pa	7120	5047.387	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-Antoine eq.	4C	×	-	McGovern, E.W. (1943) Chlorohydrocarbon solvents. Ind. Eng. Chem. 35(12), 1230–1239.	p.1031
29		6622 Pa	6622	4694.353	25 °C	-	-	-	-	その他,selected	-	2B	×	6780* (Antoine eq. regression, temp range –7 to 141.6°C, Stull 1947)		p.1031
30	MOE初期評価	53.3 mmHg	7106.082	5622	25 °C	-	-	-	-	-		2B	○	20℃の値を回帰式から計算	Boublik, T., Fried, V., and Hala, E., The Vapour Pressures of Pure Substances. Second Revised Edition. Amsterdam: Elsevier, 1984. 177. [HSDB]	p.1
31		7100 Pa[53.3mmHg(=7.10×103Pa)(25℃)]	7100	5033.209	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×	-	HOWARD, P.H. and MEYLAN, W.M., ed. (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers, p.72	p.1
32	NITE初期リスク評価書	27.9 kPa	27900	27900	20 °C	-	-	-	-	-		2B	×	-	IPCS, International Programme on Chemical Safety (2000) ICSC, International Chemical Safety Cards,Geneva. (http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtasht/index.htm から引用)	p.2
33	PhysProp	53.3 mmHg	7106.082	5622	25 °C	-	-	-	-	experimental result	-	2B	○	20℃の値を回帰式から計算	BOUBLIK,T ET AL. (1984)	p.1
34	REACH登録情報	66.17～71.98 hPa	6617	4690.809	25 °C		no data	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×		その他 publication,OECD SIDS(2003)(2003.11.14),OECD SIDS 1,2-DICHLOROPROPANE,UNEP PUBLICATIONS	Exp Key Vapour pressure.001
35		5.1 kPa	5100	5100	20 °C		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		その他 review article or handbook,M. Rossberg et. al.(2006),Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Vol.A6, Chlorinated Hydrocarbons,Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2006	Exp Key Vapour pressure.001
36	SIDS	66.2 hPa	6620	5144	25 °C			2: reliable with restrictions	key study			2A	×	20℃の値を回帰式から計算	その他	p.6, Dossier p.43
37		66.17～71.98 hPa	6617	4690.809	25 °C			2: reliable with restrictions	key study			2A	×		その他	p.6, Dossier p.43

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，２－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

水溶解度

収集データ

	情報源名	水溶解度	統一表記［mg/L］	20℃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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
1	ATSDR	2700 mg/L	2700	2700	20 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	Horvath AL. 1982. Halogenated hydrocarbons: Solubility-miscibility with water. New York, NY: Marcel Dekker, Inc., 889.	p.73
2	CCD	0.26 wt%	2606.77762	2606.77762	20 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-		Propylene Dichloride
3	EHC	2.7 g/kg	2700	2700	20 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-		PART B 2.2 Physical and chemical properties
4	EPI Suite	2960 mg/L[2B以上の値を用いて推定（2C）]	2960	2763.17906	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
5	HSDB	2800 mg/L	2800	2613.81803	25 °C								2B	×		Horvath, A.L. (1982) Halogenated Hydrocarbons. Solubility-Miscibility with Water. Marcel Dekker, Inc., New York and Basel.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
6	IUCLID	2.7 g/L	2700	2700	20 °C		その他,not specified	no data					4A	×		その他	p.174
7		2.8 g/L	2800	2800	20 °C								4A	×		その他	p.174
8		3 g/L	3000	3000	20 °C		その他,not specified	no data					4A	×		その他	p.174
9		3 g/L	3000			6[pH: ca. 6 at 2 g/l H2O and 20 degree C.]							4A	×		その他	p.174
10		[not soluble]	単位換算不可			6	その他						3	×			p.174
11	IUPAC	0.27 * Mass Fraction w1	2700	2700	20 °C		-	-	-	-	-		2B	○	-		Table 12. Recommended solubility of 1,2-dichloropropane (1) in water (2)
12	Mackay	2650 mg/L	2650	2650	20 °C		-	-	-	-	その他,limiting activity coeff. γ∞ by equilibrium air stripping-GC	-	2B	×	-	Hovorka, Š., Dohnal, V. (1997) Determination of air-water partition of volatile halogenated hydrocarbons by the inert gas stripping method. J. Chem. Eng. Data 42, 924–922.	p.1031
13		2420 mg/L	2420	2259.08558	25 °C		その他,headspace-GC	-	-	-	-		2B	×	-	McNally, M.E., Grob, R.L. (1983) Determination of solubility limits of organic priority pollutants by gas chromatographic headspace analysis. J. Chromatogr. 260, 23–32.	p.1031
14		2070 mg/L	2070	1807.96792	30 °C		その他,headspace-GC	-	-	-	-		2B	×	-	McNally, M.E., Grob, R.L. (1984) Headspace determination of solubility limits of the base neutral and volatile components from environmental protection agency's list of priority pollutants. J. Chromatogr. 284, 105–116.	p.1031

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，２－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

水溶解度

収集データ

	情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
15		2600 mg/L	2600	2427.11674	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	Dean, J.A., Editor (1985) Lange's Handbook of Chemistry. 13th Edition, McGraw-Hill Book Company, New York.	p.1031
16		2740 mg/L	2740	2557.80764	25 °C		-	-	-	-	その他,selected	-	2B	×	-	Riddick, J.A., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents: Physical Properties and Methods of Purification. 4th Edition, John Wiley & Sons, New York.	p.1031
17		3000 mg/L	3000	3000	20 °C		その他,shake flask-GC/TC, measured range 0–90.4°C	-	-	-	-		2B	×	3000*, 2900 (20°C, 29.7°C, shake flask-GC/TC, measured range 0–90.4°C, Stephenson 1992)	Stephenson, R.M. (1992) Mutual solubilities: Water-ketones, water-ethers, and water-gasoline-alcohols. J. Chem. Eng. Data 37, 80–95.	p.1031
18		2900 mg/L	2900	2542.87657	29.7 °C		その他,shake flask-GC/TC, measured range 0–90.4°C	-	-	-	-		2B	×	3000*, 2900 (20°C, 29.7°C, shake flask-GC/TC, measured range 0–90.4°C, Stephenson 1992)	Stephenson, R.M. (1992) Mutual solubilities: Water-ketones, water-ethers, and water-gasoline-alcohols. J. Chem. Eng. Data 37, 80–95.	p.1031
19		3005 mg/L	3005	3005	20 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ∞-GC	-	2B	×	3005, 3129, 3261 (20, 30, 40°C, infinite dilution activity coeff. γ∞-GC, Tse et al. 1992)	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022.	p.1031
20		3129 mg/L	3129	2732.91382	30 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ∞-GC	-	2B	×	3005, 3129, 3261 (20, 30, 40°C, infinite dilution activity coeff. γ∞-GC, Tse et al. 1992)	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022.	p.1031
21		3261 mg/L	3261	2509.25983	40 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ∞-GC	-	4A	×	3005, 3129, 3261 (20, 30, 40°C, infinite dilution activity coeff. γ∞-GC, Tse et al. 1992)	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022.	p.1031
22		3287 mg/L	3287	3287	20 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ∞-UNIFAC,	-	2B	×	3287, 3706, 4152 (20, 30, 40°C, infinite dilution activity coeff. γ∞-UNIFAC, Tse et al. 1992)	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022.	p.1031

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，２－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

水溶解度

収集データ

	情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
23		2740 mg/L	2740	2700	25 °C		-	-	-	-	その他,recommended, temp range 278.15–313.15 K, IUPAC-NIST Series	-	2B	○	2740* (recommended, temp range 278.15–313.15 K, IUPAC-NIST Series, Horvath & Getzen 1999) S/(wt%) = 3.3285 – 0.021464・(T/K) + 3.7632 × 10^–5・(T/K)^2, temp range 275–313 K (Horvath & Getzen 1999)	Horvath, A.L., Getzen, F.W. (1999a) IUPAC-NIST Solubility Data Series 67. Halogenated ethanes and ethenes with water. J. Phys. Chem. Ref. Data 28, 395–620.	p.1031
24		3706 mg/L	3706	3236.87396	30 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ∞-UNIFAC,	-	2B	×	3287, 3706, 4152 (20, 30, 40°C, infinite dilution activity coeff. γ∞-UNIFAC, Tse et al. 1992)	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022	p.1031
25		4152 mg/L	4152	3194.86256	40 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ∞-UNIFAC,	-	4A	×	3287, 3706, 4152 (20, 30, 40°C, infinite dilution activity coeff. γ∞-UNIFAC, Tse et al. 1992)	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022	p.1031
26		2683 mg/L	2683	2683	20 °C		-	-	-	-	その他,activity coeff. γ∞-differential pressure transducer	-	2B	×	2683, 2717, 3003 (20, 30, 40°C, activity coeff. γ∞-differential pressure transducer, Wright et al. 1992)	Wright, D.A., Sandler, S.I., DeVoll, D. (1992) Infinite dilution activity coefficients and solubilities of halogenated hydrocarbons in water at ambient temperatures. Environ. Sci. Technol. 26, 1828–1831	p.1031
27		2717 mg/L	2717	2373.06707	30 °C		-	-	-	-	その他,activity coeff. γ∞-differential pressure transducer	-	2B	×	2683, 2717, 3003 (20, 30, 40°C, activity coeff. γ∞-differential pressure transducer, Wright et al. 1992)	Wright, D.A., Sandler, S.I., DeVoll, D. (1992) Infinite dilution activity coefficients and solubilities of halogenated hydrocarbons in water at ambient temperatures. Environ. Sci. Technol. 26, 1828–1831	p.1031
28		3003 mg/L	3003	2310.73513	40 °C		-	-	-	-	その他,activity coeff. γ∞-differential pressure transducer	-	4A	×	2683, 2717, 3003 (20, 30, 40°C, activity coeff. γ∞-differential pressure transducer, Wright et al. 1992)	Wright, D.A., Sandler, S.I., DeVoll, D. (1992) Infinite dilution activity coefficients and solubilities of halogenated hydrocarbons in water at ambient temperatures. Environ. Sci. Technol. 26, 1828–1831	p.1031
29		2800 mg/L	2800	2613.81803	25 °C		その他,shake flask-interferometer	-	-	-	-		2B	×	-	Gross, P.M. (1929a) The determination of the solubility of slightly soluble liquids in water and the solubilities of dichloroethanes and dichloropropanes. J. Am. Chem. Soc. 51, 2362–2366	p.1031

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，２－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

水溶解度

収集データ

	情報源名	水溶解度	統一表記［mg/L］	20℃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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
30		2773 mg/L	2773	2588.61335	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	Seidell, A. (1940) Solubilities. Van Nostrand, New York.	p.1031
31		2700 mg/L	2700	2700	20 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	McGovern, E.W. (1943) Chlorohydrocarbon solvents. Ind. Eng. Chem. 35(12), 1230–1239.	p.1031
32		2750 mg/L	2750	2567.1427	25 °C		その他,measured by Dow Chemical	-	-	-	-		2B	×	-	Dreisbach, R.R. (1955–1961) Physical Properties of Chemical Compounds. Am. Chem. Soc. Adv. Chem. Series 15 (1955), 22 (1959) and 29 (1961). Washington DC.	p.1031
33		2096 mg/L	2096	1956.62949	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	×	-	Jones, C.J., Hudson, B.C., McGugan, Smith, A.J. (1977–1978) The leaching of some halogenated organic compounds from domestic waste. J. Haz. Materials 2, 227–233.	p.1031
34		3520 mg/L	3520	3285.94266	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	×	-	Chiou, C.T., Peters, L.J., Freed, A.H. (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science 206, 831–832.	p.1031
35		2800 mg/L	2800	2613.81803	25 °C		-	-	-	-	その他,summary of literature data,	-	2B	×	-	Horvath, A.L. (1982) Halogenated Hydrocarbons. Solubility-Miscibility with Water. Marcel Dekker, Inc., New York and Basel.	p.1031
36	Merck	[Slightly sol in water]	単位換算不可				-	-	-	-	-		3	×	-		Monograph Number: 0007854
37	MOE初期評価	2800 mg/L	2800	2613.81803	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	Horvath AL; Halogenated Hydrocarbons. NY, NY: Marcel Dekker p. 740 (1982). [HSDB]	p.1
38		2600 mg/L	2600	2600	20 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	IPCS, International Chemical Safety Cards(1991). [財団法人化学物質評価研究機構(1999)：化学物質安全性(ハザード)評価シート]	p.1
39		2.8 g/L	2800	2613.81803	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	HOWARD, P.H. and MEYLAN, W.M., ed. (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers, p.72	p.1
40		2.59 g/L	2590	2590	20 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	YALKOWSKY, S.H. and HE, Y. (2003) Handbook of Aqueous Solubility Data, Boca Raton, London, New York, Washington DC, CRC Press, p.60	p.1
41	NITE初期リスク評価書	2.8 g/L	2800	2613.81803	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY (http://esc.syrres.com./interkow/physdemo.htm から引用)	p.2
42	PhysProp	2800 mg/L	2800	2613.81803	25 °C		-	-	-	-	experimental result	-	2B	×	-	BOUBLIK,T ET AL. (1984)	p.1

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	１，２－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

水溶解度

収集データ

	情報源名	水溶解度	統一表記［mg/L］	20℃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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
43	REACH登録情報	1.297～2.820 kg/m3	単位換算不可		25 °C	[pH not available.]		no data	1: reliable without restriction	key study	experimental result		3	×		その他 publication,OECD SIDS(2003)(2003.11.14),OECD SIDS 1,2-DICHLOROPROPANE,UNEP PUBLICATIONS	Exp Key Water solubility.001
44		2700 mg/L[soluble (1000-10000 mg/L)]	2700	2700	20 °C	7		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		その他 review article or handbook,Verschueren, K.(1983),Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd ed.,Van Nostrand Reinhold Company Inc., New York	Exp Key Water solubility.001
45	SIDS	2800 mg/L	2800	2613.81803	25 °C				2: reliable with restrictions	key study			2A	×		Mackay, D., Shiu, W. Y., & Ma, K. C. Illustrated handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. lewis publishers, 1993	p.6, Dossier p.46
46	既存点検事業	0.26 w/v %	2600	2600	20 °C		-	-	-	-	-		4A	×	-		K0019
47		1000 ppm[可溶]	1000				-	-	-	-	-		4A	×	-		K0019

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2−ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
1	ATSDR	1.99[estimated]	1.99			-	-	−	-	-		2B	×	-	EPA. 1988b. U.S. Environmental Protection Agency. PC Gems CLOGPS (Octanol/Water Partition Coefficient). Graphical Exposure Modeling Systems. Washington, DC: Office of Toxic Substances, U.S. EPA	p.73
2	EHC	2.28	2.28			-	-	−	-	-		2B	×	-	NTP (1983) Carcinogenesis bioassay of 1,2-dichloropropane (propylene dichloride) in F344/N rats and B6C3F1 mice (gavage study). Research Triangle Park, North Carolina, National Toxicology Program (NTP Technical Report No. 82-092; NIH publication No. 82-2510)	PART B 2.2 Physical and chemical properties
3	EPI Suite	2.25	2.25			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
4	HSDB	1.98	1.98									2B	O		Sangster J; LOGKOW Databank. Sangster Res. Lab., Montreal Quebec, Canada (1994).	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT:
5	IUCLID	1.99	1.99			その他,Pomona–MedChem–Strukturfragment–Methode				estimated by calculation		4C	×		その他	p.16
6		2	2			その他,Hansch & Leo (1979)				estimated by calculation		4C	×		その他	p.16
7		2.02	2.02			その他,Hansch & Leo (1979)				estimated by calculation		4C	×		その他	p.16
8		2.02	2.02			その他,Computer Kalkulation nach Fragment–Methode				estimated by calculation		4C	×		その他	p.17
9		2.16	2.16			その他,Rekker (1977)				estimated by calculation		4C	×		その他	p.17
10	Mackay	2	2	25 °C		-	-	−	-	-		2B	×	-	Hansch, C., Leo, A.J. (1979) Substituents Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, New York.	p.1031

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2−ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
11		1.98	1.98	25 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff.-GC.	-	2B	×	-	Tse, G., Sandler, S.I. (1994) Determination of infinite dilution activity coefficients and 1-octanol/water partition coefficients of volatile organic pollutants. J. Chem. Eng. Data 39, 354–357	p.1031
12		1.99	1.99	25～50 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coefficient determined by relative GC technique, measured range 25–50° C	-	2B	×	-	Bhatia, S.R., Sandler, S.I. (1995) Temperature dependence of infinite dilution activity coefficients in octanol and octanol/water partition coefficients of some volatile halogenated organic compounds. J. Chem. Eng. Data 40, 1196–1198.	p.1031
13	MOE初期評価	1.98	1.98			-	-	-	-	-		2B	○	-	Sangster J; LOGKOW Databank. Sangster Res. Lab., Montreal Quebec, Canada (1994). [HSDB]	p.1
14		1.98	1.98			-	-	-	-	-		2B	×	-	TSE, G. and SANDLER, S.I. (1994) Determination of Infinite Dilution Activity Coefficients and 1-Octanol/Water Partition Coefficients of Volatile Organic Pollutants, J. Chem. Eng. Data, 39: 354-357	p.1
15		1.99	1.99			-	-	-	-	-		2B	×	-	VERSCHUEREN, K., ed. (1996) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd ed., New York, Albany, Bonn, Boston, Detroit, London, Madrid, Melbourne, Mexico City, Paris, San Francisco, Singapore, Tokyo, Toronto, Van Nostrand Reinhold, pp 732-733	p.1
16	NITE初期リスク評価書	1.98	1.98			-	-	-	-	experimental result	-	2B	○	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2002) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY	p.2
17		2.25	2.25			-	-	-	-	その他（推定値）,推定値	-	4C	×	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2002) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY	p.2
18	PhysProp	1.98	1.98			-	-	-	-	experimental result	-	2B	○	-	SANGSTER (1994)	p.1
19	REACH登録情報	1.99～2.28	1.99	[Temperature and pH not available]	[Temperature and pH not available]		no data	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×		その他 publication,OECD SIDS(2003)(2003.11.14),OECD SIDS 1,2-DICHLOROPROPANE,UNEP PUBLICATIONS	Exp Key Partition coefficient.001

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2ージクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
20		1.98	1.98	20 °C	7	その他,calculation method	no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×		その他 other company data(2009)	Calc Key Partition coefficient.001
21		2.25	2.25	20 °C[As the value for log Pow is a calculated value, information on temperature and pH is not available; the standard values of 20˚C and pH 7 were filled in for completeness]	7[As the value for log Pow is a calculated value, information on temperature and pH is not available; the standard values of 20˚C and pH 7 were filled in for complete	その他,Estimation	no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×		その他 review article or handbook,P. H. Howard, W. M. Meylan (eds)(1997),Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals,CRC Lewis Publishers, Boca Raton	Exp Key Partition coefficient.004
22	SIDS	2	2					2: reliable with restrictions	key study			2A	×		Mackay, D., Shiu, W. Y., & Ma, K. C. Illustrated handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. lewis publishers, 1993.	p.6, Dossier p.44

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
1	ATSDR	logKoc	1.67	46.77351413			-	-	-	-	-	-		2B	○		Chiou CT, Peters LJ, Freed VH. 1979. A Physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science 206:831-832.	p.73
2	EPI Suite	Koc	54.38 L/kg[2B以上の値を用いて推定（2C）]	54.38				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×			
3	HSDB	Koc	47	47										2B	○		Chiou CT, Peters LJ, Freed VH. 1979. A Physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science 206:831-832.	ENVIRONMENTAL FATE:
4	IUCLID	logKoc	1.921[log Koc = 1.377 + 0.544 (log Pow)]	83.36811846								estimated by calculation		4C	×		その他	p.40
5		logKoc	[Auf der Basis des n–Octanol/Wasser–Verteilungskoeffizienten Pow von 105 wurde nach der Formel Koc = 0.48 x Pow ein Bodensorptionskoeffizient von 50 berechnet.]	算出不可								estimated by calculation		3	×		その他	p.40
6	Mackay	logKoc	1.7	50.11872336			-	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-MCI χ.	4C	×	-	Sabljic, A. (1984) Predictions of the nature and strength of soil sorption of organic pollutants from molecular topology. J. Agric. Food Chem. 32, 243–246.	p.1031
7		logKoc	1.43	26.91534804			soil.	その他,equilibrium sorption isotherm.	-	-	-	-		2B	×	-	Chiou, C.T., Peters, L.J., Freed, A.H. (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science 206, 831–832.	p.1031
8		logKoc	1.67	46.77351413			silt loam soil.	-	-	-	-	その他,quoted from Chiou et al. 1979; Howard 1990	-	2B	○	-	Chiou, C.T., Peters, L.J., Freed, A.H. (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science 206, 831–832.	p.1031

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
9	NITE初期リスク評価書	Koc	47	47			-	-	-	-	-	experimental result	-	2B	○	-	Gangolli, S. (1999) The Dictionary of Substances and their Effects, 2nd ed., The Royal Society of Chemistry, Cambrige. → Chiou CT, Peters LJ, Freed VH. 1979. A Physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science 206:831-832	p.2
10	REACH登録情報	logKoc	1.72[estimated by EUSES]	52.48074602								estimated by calculation		4C	×			Calc NS Adsorption / desorption.001
11		logKoc	1.78[QSAR value KOCWIN Kow method.]	60.25595861			N.A. Majority of training set data is on water-soil partitioning.		no	2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR		4C	×		その他 study report(2010)	QSAR Key Adsorption / desorption.005
12	SIDS	Koc	67.7[the chemical is expected to have very high mobility in soil.|Non-corrected Log Koc = 1.8306]	67.7				KOCWIN		2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation	PCKocWIN V1.66	4C	×		その他	p.6, Dossier p.82

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2−ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
1	ATSDR	0.00207 atm･m^3/mol	209.74275			-	-	-		2B	×	-	Mackay D, Yeun ATK. 1983. Mass transfer coefficient correlations for volatilization of organic solutes from water. Environ Sci Technol 17:211- 217	p.73
2		0.00167 atm･m^3/mol	169.21275			-	-	-		2B	×	-	Chiou CT, Freed VH, Peters LJ, et al. 1980. Evaporation of solutes from water. Environ Inter 3:231-236	p.73
3	EPI Suite	226 Pa･m^3/mol	226					(Q)SAR		2C	×			
4	HSDB	2.82E-3 atm･m^3/mol	285.7365							2B	○		WARNER,HP ET AL. (1987)	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
5	IUCLID	212.78 Pa･m^3/mol	212.78					estimated by calculation		4C	×		その他	p.43
6		192.52～273.51 Pa･m^3/mol	192.52					experimental result		4A	×		その他	p.43
7		361.73 Pa･m^3/mol	361.73					experimental result		4A	×		その他	p.43
8		124 Pa･m^3/mol	124					experimental result		4A	×		その他	p.43
9		128 Pa･m^3/mol	128					experimental result		4A	×		その他	p.43
10		362 Pa･m^3/mol	362					experimental result		4A	×		その他	p.43
11		290 Pa･m^3/mol	290					experimental result		4A	×		その他	p.43
12		274 Pa･m^3/mol	274					experimental result		4A	×		その他	p.44
13		213 Pa･m^3/mol	213					estimated by calculation		4C	×		その他	p.44
14	Mackay	298 Pa･m^3/mol	298			-	-	その他（推定値）,calculated-1/K_AW, C_W/C_A, reported as exptl	-	4C	×	298 (calculated-1/K_AW, C_W/C_A, reported as exptl., Hine & Mookerjee 1975)	Hine, J., Mookerjee, P.K. (1975) The intrinsic hydrophilic character of organic compounds. Correlations in terms of structural contributions. J. Org. Chem. 40, 292–298	p.1031
15		150 Pa･m^3/mol	150			-	-	その他（推定値）,computed value.	-	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.1031
16		213 Pa･m^3/mol	213			-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ∞-GC	-	2B	×	213, 324, 486 (20, 30, 40°C, infinite dilution activity coeff. γ∞-GC, Tse et al. 1992)	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022	p.1031

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2−ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
17		324 Pa･m^3/mol	324			-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ∞-GC	-	2B	×	213, 324, 486 (20, 30, 40°C, infinite dilution activity coeff. γ∞-GC, Tse et al. 1992)	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022	p.1031
18		486 Pa･m^3/mol	486			-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ∞-GC	-	2B	×	213, 324, 486 (20, 30, 40°C, infinite dilution activity coeff. γ∞-GC, Tse et al. 1992)	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022	p.1031
19		216 Pa･m^3/mol	216			-	-	その他,activity coeff. γ∞-differential pressure transducer.	-	2B	×	216, 347, 497 (20, 35, 50°C, activity coeff. γ∞-differential pressure transducer, Wright et al. 1992)	Wright, D.A., Sandler, S.I., DeVoll, D. (1992) Infinite dilution activity coefficients and solubilities of halogenated hydrocarbons in water at ambient temperatures. Environ. Sci. Technol. 26, 1828–1831	p.1031
20		347 Pa･m^3/mol	347			-	-	その他,activity coeff. γ∞-differential pressure transducer.	-	2B	×	216, 347, 497 (20, 35, 50°C, activity coeff. γ∞-differential pressure transducer, Wright et al. 1992)	Wright, D.A., Sandler, S.I., DeVoll, D. (1992) Infinite dilution activity coefficients and solubilities of halogenated hydrocarbons in water at ambient temperatures. Environ. Sci. Technol. 26, 1828–1831	p.1031
21		497 Pa･m^3/mol	497			-	-	その他,activity coeff. γ∞-differential pressure transducer.	-	2B	×	216, 347, 497 (20, 35, 50°C, activity coeff. γ∞-differential pressure transducer, Wright et al. 1992)	Wright, D.A., Sandler, S.I., DeVoll, D. (1992) Infinite dilution activity coefficients and solubilities of halogenated hydrocarbons in water at ambient temperatures. Environ. Sci. Technol. 26, 1828–1831	p.1031
22		3.37 Pa･m^3/mol	3.37			-	-	その他,infinite dilution activity coefficient determined by relative GC technique.	-	2B	×	3.37, 5.93 (35, 50°C, from infinite dilution activity coefficient determined by relative GC technique, Bhatia & Sandler 1995)	Bhatia, S.R., Sandler, S.I. (1995) Temperature dependence of infinite dilution activity coefficients in octanol and octanol/water partition coefficients of some volatile halogenated organic compounds. J. Chem. Eng. Data 40, 1196–1198	p.1031

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2−ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
23		5.93 Pa･m^3/mol	5.93			-	-	その他,infinite dilution activity coefficient determined by relative GC technique.	-	2B	×	3.37, 5.93 (35, 50°C, from infinite dilution activity coefficient determined by relative GC technique, Bhatia & Sandler 1995)	Bhatia, S.R., Sandler, S.I. (1995) Temperature dependence of infinite dilution activity coefficients in octanol and octanol/water partition coefficients of some volatile halogenated organic compounds. J. Chem. Eng. Data 40, 1196–1198	p.1031
24		222 Pa･m^3/mol	222			-	-	-		2B	×	-	Hovorka, Š., Dohnal, V. (1997) Determination of air-water partition of volatile halogenated hydrocarbons by the inert gas stripping method. J. Chem. Eng. Data 42, 924–932	p.1031
25		226.8 Pa･m^3/mol	226.8			-	-	-		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.1031
26		227.6 Pa･m^3/mol	227.6			-	-	-		2B	×	227.6* (EPICS-SPME, measured range 2–70°C, Gorgenyi et al. 2002) ln K_AW = 9.49 – 3494.7/(T/K); temp range 2–70°C.	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.1031
27		31.21 Pa･m^3/mol	31.21			-	-	estimated by calculation	calculated-group contribution.	4C	×	31.21, 2261 (calculated-group contribution, calculated-bond contribution; Hine & Mookerjee 1975)	Hine, J., Mookerjee, P.K. (1975) The intrinsic hydrophilic character of organic compounds. Correlations in terms of structural contributions. J. Org. Chem. 40, 292–298	p.1031
28		232 Pa･m^3/mol	232			-	-	その他,selected from reported experimental determined values.	-	2B	×	232 (20°C, selected from reported experimental determined values, Staudinger & Roberts 1996, 2001) log K_AW = 4.878 – 1730/(T/K) (summary of literature data)	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.1031
29		2261 Pa･m^3/mol	2261			-	-	estimated by calculation	calculated-bond contribution.	4C	×	31.21, 2261 (calculated-group contribution, calculated-bond contribution; Hine & Mookerjee 1975)	Hine, J., Mookerjee, P.K. (1975) The intrinsic hydrophilic character of organic compounds. Correlations in terms of structural contributions. J. Org. Chem. 40, 292–298	p.1031

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2−ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
30		280 Pa･m^3/mol	280			-	-	-		2B	×	280* (24.9°C, equilibrium cell-concn ratio-GC/FID, measured range 1.9–24.9°C, Leighton & Calo 1981) ln (k_H/atm) = 19.60 – 4333/(T/K); temp range:1.9–24.9°C.	Leighton Jr., 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, 382–385.	p.1031
31		210 Pa･m^3/mol	210			-	-	estimated by calculation	calculated-P/C.	4C	×	-	Mackay, D., Yuen, T.K. (1983) Mass transfer coefficient correlations for volatilization of organic solutes from water. Environ. Sci. Technol. 17, 211–217	p.1031
32		286 Pa･m^3/mol	286			-	-	-		2B	○	-	Warner, H.P., Cohen, J.M., Ireland, J.C. (1987) Determination of Henry's Law Constants of Selected Priority Pollutants. EPA/600/D-87/229, U.S. Environmental Protection Agency, Cincinnati, Ohio. PB87-212684, U.S. Department of Commerce, National Technical Information	p.1031
33		362 Pa･m^3/mol	362			-	-	-		2B	×	362 ln [H/(atm・m^3/mol)] = 9.843 – 4708/(T/K).	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.1031
34		233 Pa･m^3/mol	233			-	-	-		2B	×	233 (20–25°C and low ionic strength, Pankow & Rosen 1988; Pankow 1990)	Pankow, J.F., Rosen, M.E. (1988) The determination of volatile compounds in water by purging directly to a capillary column with whole column cryotrapping. Environ. Sci. Technol. 22, 398–405	p.1031
35	NITE初期リスク評価書	286 Pa･m^3/mol	286			-	-	experimental result	-	2B	○	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY (http://esc.syrres.com./interkow/physdemo.htm から引用)	p.2
36		0.00282 atm･m^3/mol	285.7365			-	-	experimental result	-	2B	×	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY (http://esc.syrres.com./interkow/physdemo.htm から引用)	p.2
37	PhysProp	0.00282 atm･m^3/mol	285.7365			-	-	experimental result	-	2B	○	-	WARNER,HP ET AL. (1987)	p.1

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2－ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
38	REACH登録情報	0.00282 atm･m^3/mol	285.7365			2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	○		その他 EPA Report(1987)	Exp Key Henry's Law constant.001
39	SIDS	192.52～273.51 Pa･m^3/mol	192.52			4: not assignable	key study	experimental result		4A	×		その他	p.6, Dossier p.79

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2ージクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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	備考	文献	ページ番号等
1	MOE初期評価	その他	[解離基なし]	算出不可			-	-	-	-	-		-	財団法人化学物質評価研究機構(1999)：化学物質安全性(ハザード)評価シート	p.1
2		pKa	[解離基なし]	算出不可			-	-	-	-	-		-		p.1
3	NITE初期リスク評価書	その他	[解離基なし]	算出不可			-	-	-	-	-		-		p.2

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2−ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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	IUCLID	not readily biodegradable	0%			OECD TG 301D	no data			experimental result			その他	p.46
2	NITE初期リスク評価書	not readily biodegradable	0%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		-	通商産業公報 (1978 年12 月16 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
3		not readily biodegradable	1%	TOC removal		化審法TG	-	-	-	experimental result		-	通商産業公報 (1978 年12 月16 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		not readily biodegradable	2%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result		-	通商産業公報 (1978 年12 月16 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	REACH登録情報		11.7 %[St. dev no data]	その他,ThODNH4		OECD TG 301D	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result			その他 study report(2011)	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
6			0.80%	TOC removal		OECD TG 301C	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result			その他 publication,Chemicals Inspection & Testing Institute, Japan(1992),Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan,MITI (1992): Edited by Chemicals Inspection & Testing Institute, Japan, October 1992, 2 -18.	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
7			1.50%	Test mat. analysis		OECD TG 301C	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result			その他 publication,Chemicals Inspection & Testing Institute, Japan(1992),Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan,MITI (1992): Edited by Chemicals Inspection & Testing Institute, Japan, October 1992, 2 -18.	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
8	SIDS	not readily biodegradable	0%			OECD TG 301D	no data	3: not reliable		experimental result			その他	Dossier p.83-84
9	既存点検事業		1.50%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result		-		K0019
10			0%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		-		K0019
11			0.80%	TOC removal		化審法TG	-	-	-	experimental result		-		K0019
12			0.60%	TOC removal		化審法TG	-	-	-	experimental result		-		K0019
13			0%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		-		K0019
14			0%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result		-		K0019

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2−ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite		1			BCF		9.696 L/kg (wet)[2B以上の値を用いて推定（2C）]	9.696	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	×			
2	IUCLID		1			BCF		0.5～7	0.5	OECD TG 305C				experimental result		1B	○		その他	p.51
3	NITE初期リスク評価書	低濃縮性	1	0.04 mg/L		その他	下限	0.5～6.9	0.5	化審法TG	-	-	-	-		1B	×	-	通商産業公報 (1978 年12 月16 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.7
4		低濃縮性	1	0.4 mg/L		その他	下限	1.2～3.2	1.2	化審法TG	-	-	-	-		1B	○	-	通商産業公報 (1978 年12 月16 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.7
5	REACH登録情報		1			BCF		0.5～7	0.5	OECD TG 305C	no data	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	○		その他 publication(2003)(2003.11.14),OECD SIDS 1,2-DICHLOROPROPANE,UNEP PUBLICATIONS	Exp Key Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
6			1	0.04 ppm		BCF	定常状態	0.5～6.9[Basis: whole body w.w.|Time of plateau not specified in report]	0.5	OECD TG 305C	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1B	×		その他 publication(1992)	Exp Key Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
7			2	0.4 ppm		BCF	定常状態	1.2～3.2[Basis: whole body w.w.|Time of plateau not specified in report]	1.2	OECD TG 305C	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1B	○		その他 publication(1992)	Exp Key Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
8	SIDS	その他	1	0.04～0.4 mg/L		BCF		0.5～7	0.5	OECD TG 305C		2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1B	○		その他	p.4, Dossier p.89
9	既存点検事業	-	1	0.04 ppm w/v	2 週	Rawデータ	-	2.5[参考値]	2.5	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0019
10		-	1	0.04 ppm w/v	2 週	Rawデータ	-	6.9[参考値]	6.9	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0019
11		-	1	0.04 ppm w/v	3 週	Rawデータ	-	3.8[参考値]	3.8	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0019
12		-	1	0.04 ppm w/v	3 週	Rawデータ	-	2.8[参考値]	2.8	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0019
13		-	1	0.04 ppm w/v	4 週	Rawデータ	-	3.8[参考値]	3.8	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0019
14		-	1	0.04 ppm w/v	4 週	Rawデータ	-	0.5[参考値]	0.5	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0019
15		-	1	0.04 ppm w/v	6 週	Rawデータ	-	3.5[参考値]	3.5	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0019
16		-	1	0.04 ppm w/v	6 週	Rawデータ	-	2.5[参考値]	2.5	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0019
17		-	2	0.4 ppm w/v	2 週	Rawデータ	-	2.5	2.5	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0019
18		-	2	0.4 ppm w/v	2 週	Rawデータ	-	2.4	2.4	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0019
19		-	2	0.4 ppm w/v	3 週	Rawデータ	-	2.2[参考値]	2.2	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	○	-		K0019
20		-	2	0.4 ppm w/v	3 週	Rawデータ	-	1.2[参考値]	1.2	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	○	-		K0019

基本情報

優先評価化学物質通し番号	12000
物質名称	1，2−ジクロロプロパン
CAS番号	78-87-5

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Ⅱにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
21		-	2	0.4 ppm w/v	4 週	Rawデータ	-	3.2	3.2	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	○	-		K0019
22		-	2	0.4 ppm w/v	4 週	Rawデータ	-	1.9[参考値]	1.9	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	○	-		K0019
23		-	2	0.4 ppm w/v	6 週	Rawデータ	-	2.5	2.5	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	○	-		K0019
24		-	2	0.4 ppm w/v	6 週	Rawデータ	-	2.9	2.9	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	○	-		K0019