

1  
2  
3  
4  
5  
6  
7  
8  
9  
10  
11  
12  
13  
14

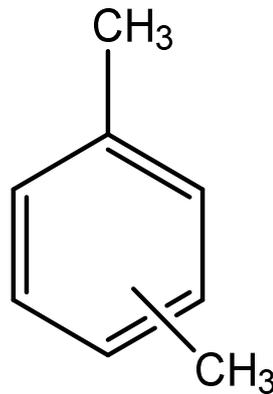
# 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

## 生態影響に係る評価

### 物理化学的性状等の詳細資料

# キシレン

優先評価化学物質通し番号 125



15  
16  
17  
18  
19  
20  
21  
22

平成 29 年 3 月

経済産業省

23

## 目 次

24	1 評価対象物質の性状.....	3
25	1-1 物理化学的性状及び濃縮性.....	5
26	(参考 1-1-1) <i>o</i> -キシレン.....	7
27	(参考 1-1-2) <i>m</i> -キシレン.....	10
28	(参考 1-1-3) <i>p</i> -キシレン.....	13
29	1-2 分解性.....	16
30	(参考 1-2-1) <i>o</i> -キシレン.....	19
31	(参考 1-2-2) <i>m</i> -キシレン.....	22
32	(参考 1-2-3) <i>p</i> -キシレン.....	25
33	1-3 性状データの暴露評価結果等への感度解析.....	28
34	1-4 出典.....	30
35		

## 37 1 評価対象物質の性状

38 本章では、5章のモデル推計に用いる以下の物理化学的性状データ、環境中における分解性に  
39 係るデータを示す。

40 評価対象のキシレン(CAS1330-20-7)は、3種のキシレンの異性体の混合物を指す。また、キシ  
41 レンの一般的な製品である「混合キシレン」は、3種のキシレンの異性体の他、エチルベンゼン  
42 等も含有している。NITE(2005)によるとその割合は、およそ *o*-キシレンが10%、*m*-キシレンが  
43 50%、*p*-キシレンが20%、エチルベンゼンが20%の割合で含有している。また、キシレンの平  
44 成27年度の国内出荷量<sup>1</sup>は、キシレン(3種の異性体の混合物)が3,683,653t、*p*-キシレンが  
45 3,843,997t、*o*-キシレンが117,710tであった(*m*-キシレンの出荷数量は記されていない)。

46 このため、本章では、キシレンに加えて、参考値として *o*-、*m*-、*p*-の各異性体の物理化学的性  
47 状データ、環境中における分解性に係るデータも示す。

48	・ <i>o</i> -キシレン	CAS 95-47-6
49	・ <i>m</i> -キシレン	CAS 108-38-3
50	・ <i>p</i> -キシレン	CAS 106-42-3

51 また、化審法における混合キシレンの届出については、エチルベンゼンが混合している場合は、  
52 キシレンとエチルベンゼンを分けて届出することとなっている<sup>2</sup>ため、エチルベンゼンは含まれて  
53 いない。

54

<sup>1</sup> 経済産業省経済産業政策局調査統計部(編)(2015):平成27年化学工業統計年報

<sup>2</sup> 優先評価化学物質の届出について(キシレン)平成25年3月経済産業省化学物質安全室

55

表 1 - 1 キシレン及び各異性体の物理化学的性状等の一覧

対象物質	キシレン	o-キシレン	m-キシレン	p-キシレン
CAS 登録番号	1330-20-7	95-47-6	108-38-3	106-42-3
分子量	106.16	106.16	106.16	106.16
融点 ( )	(13.3)	-25.2	-47.8	13.3
沸点 ( )	138.5	144	139.1	138.3
蒸気圧 (Pa)	795	680	820	820
水に対する溶解度 (mg/L)	(151)	166	160	151
1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)	(3.15)	3.12	3.2	3.15
ヘンリー係数 (Pa・m <sup>3</sup> /mol)	(654)	537	606	654
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc) (L/kg)	(368)	537	192	368
生物濃縮係数(BCF) (L/kg)	(23.6)	21.4	23.6	23.6
生物蓄積係数(BMF)	(1)	1	1	1
解離定数	-	-	-	-

56 括弧内の値は参考値であることを示す

57

58

表 1 - 2 キシレン及び各異性体の分解半減期の一覧 (単位: 日)

対象物質			キシレン	o-キシレン	m-キシレン	p-キシレン
CAS 登録番号			1330-20-7	95-47-6	108-38-3	106-42-3
大気	総括分解	半減期	NA	NA	NA	NA
	機序別半減期	OH ラジカルとの反応	0.86	1.4	0.89	1.2
		オゾンとの反応	(2.9×10 <sup>4</sup> )	1.6×10 <sup>4</sup>	4,000	2.9×10 <sup>4</sup>
		硝酸ラジカルとの反応	(470)	304	470	239
水中	総括分解	半減期	NA	NA	NA	NA
	機序別半減期	生分解	28	28	28	28
		加水分解	-	-	-	-
		光分解	NA	NA	NA	NA
土壌	総括分解	半減期	NA	NA	NA	NA
	機序別半減期	生分解	28	28	28	28
		加水分解	-	-	-	-
底質	総括分解	半減期	NA	NA	NA	NA
	機序別半減期	生分解	112	112	112	112
		加水分解	-	-	-	-

59 括弧内の値は参考値であることを示す

60

61 1-1 物理化学的性状及び濃縮性

62 下表にモデル推計に採用したキシレンの物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。なお、表中  
 63 の下線部は、評価 において精査した結果、評価 から変更した値を示している。また、キシレ  
 64 ンの物理化学的性状で適切な値が得られなかった場合、参考値として、各異性体の中で国内出荷  
 65 量の割合が一番高い *p*-キシレンの値を採用する。

66

67 表 1-3 モデル推計に採用したキシレンの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	-	106.16	-	106.16
融点		<u>(13.3)</u>	<i>p</i> -キシレンの参考値	-54 <sup>3)</sup>
沸点		138.5 <sup>10)</sup>	測定値か推計値か不明	138.5 <sup>10)</sup>
蒸気圧	Pa	795 <sup>10,12)</sup>	20 での値の2つの平均値	795 <sup>10,12)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	<u>(151)</u>	<i>p</i> -キシレンの参考値	99 <sup>10,12)</sup>
1-オクタールと水との間の分配係数(logPow)	-	<u>(3.15)</u>	<i>p</i> -キシレンの参考値	3.16 <sup>10)</sup>
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	<u>(654)</u>	<i>p</i> -キシレンの参考値	672 <sup>10)</sup>
有機炭素補正 土壌吸着係数(Koc)	L/kg	<u>(368)</u>	<i>p</i> -キシレンの参考値	761 <sup>6,11)</sup>
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	<u>(23.6)</u>	<i>p</i> -キシレンの参考値	60.03 <sup>16)</sup>
生物蓄積係数(BMF)	-	(1)	logPow と BCF から設定 ( <i>p</i> -キシレンの参考値) <sup>17)</sup>	1
解離定数(pKa)	-	-	解離性の基を有さない物質	- <sup>18)</sup>

68 平成 28 年度第 2 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  
 69 (平成 28 年 11 月 17 日開催)において了承された値

- 70 1) OECD(2003)                      7) MOE(2012)                      13) CCD(2007)  
 71 2) EHC                                      8) Mackay(2006)                      14) Merck  
 72 3) IUCLID-1(2000)                      9) MITI(1998)                      15) IUPAC  
 73 4) ECHA                                      10) PhysProp                      16) EPI Suite  
 74 5) CRC                                      11) HSDB                      17) MHLW, METI, MOE(2014)  
 75 6) NITE(2005)                      12) ATSDR(2007)                      18) 評価Iにおいて解離定数は考慮しない

76

77 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

78 融点

79 評価 で採用した値は、IUCLID-1 (2003) に記載された値 (-54 )である。他の信頼性の定ま  
 80 った情報源<sup>3)</sup>によると、推計値であることが分かった。評価 では、参考値として、*p*-キシレンの  
 81 採用値(13.3 )を採用値とする。

82

83 沸点

84 評価 で採用した値は、138.5 (PhysProp) である。本値は、測定値か推計値か不明であるが、  
 85 他の信頼性の定まった情報源においても、範囲の値がほとんどであり、また各異性体の値  
 86 (138.3 ~144 )と比較しても差異のないことから、評価 でも評価 の値 (138.5 )を採用値と  
 87 する。

<sup>3)</sup> 「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のこと。

88

89 蒸気圧

90 評価 で採用した値は、ATSDR 及び PhysProp に記載された 20 での値の平均値 (795Pa)で  
91 ある。各異性体の値 (680~820Pa)と比較しても差異のないことから、評価 でも評価 の値  
92 (795Pa) を採用値とする。

93

94 水に対する溶解度

95 評価 で採用した値は、ATSDR、HSDB、PhysProp に記載された 25 での測定値 (106mg/L)  
96 を 20 の値に換算 (99mg/L)した値である。評価 の値は各異性体の参考値(151~166mg/L)と異  
97 なること及び引用文献を精査したところ、「有効数字 1 桁若しくは誤差 20%以上」という判定で  
98 あったので、評価 では参考値として *p*-キシレンの値(151mg/L) を採用値とする。

99

100 logPow

101 評価 で採用した値は、PhysProp に記載された測定値と記載された値 (3.16)である。引用文献  
102 を精査したところ、本値は各異性体のキシレン及びエチルベンゼンの logPow 値を平均した値で  
103 あった。評価 では参考値として、*p*-キシレンの値(3.15) を採用値とする。

104

105 ヘンリー係数

106 評価 で採用した値は、PhysProp に記載された測定値 (672 Pa・m<sup>3</sup>/mol)である。引用文献を  
107 精査したところ、キシレンの値が見つからなかった。評価 では参考値として、*p*-キシレンの値  
108 (654 Pa・m<sup>3</sup>/mol) を採用値とする。

109

110 Koc

111 評価 で採用した値は、NITE (2005)、HSDB に記載された値の平均値 (761L/kg)である。評  
112 価 で採用している 2 つのデータは共に範囲のデータとなっており、土壌ごとの値ではないので  
113 除外する。評価 では参考値として、*p*-キシレンの値 (368L/kg) を採用値とする。

114

115 BCF

116 評価 で採用した値は、BCFBAFWIN による推計値 (60.03L/kg)である。評価 の値は各異性  
117 体の参考値(21.4~23.6L/kg)と異なるため、評価 では参考値として *p*-キシレンの値 (23.6L/kg)  
118 を採用値とする。

119

120 BMF

121 評価 で採用した値は、logPow 及び BCF から化審法における優先評価化学物質に関するリス  
122 ク評価の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。)に従って設定した値 (1) である。  
123 BMF の実測値がなく、logPow 及び BCF は *p*-キシレンの参考値を用いているため、評価 では  
124 参考値として (1) を採用値とする。

125

126 以下、参考として各異性体の物理化学的性状及び濃縮性について示す。

127

128 (参考 1-1-1) *o*-キシレン

129 下表に物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。*o*-体単体では評価は未実施であるが、信頼  
130 性基準に基づき参考値を定めている。表中の下線部は、評価において精査した結果、参考値か  
131 ら変更した値を示している。

132

133

表 1 - 4 *o*-キシレンの物理化学的性状等データのまとめ

項目	単位	採用値	詳細	(参考)
分子量	-	106.16	-	
融点		-25.2 <sup>1,2,4,5,7,8,10-12)</sup>	信頼性の定まった情報源からの測定値	-25.2 <sup>1)</sup>
沸点		<u>144</u> <sup>1-8,10-14)</sup>	信頼性の定まった情報源からの4つの測定値の平均	144.4 <sup>2,5)</sup>
蒸気圧	Pa	<u>680</u> <sup>1,2,6,7,8)</sup>	20 の測定値及び回帰式から20 に内挿した値を含めた13の値の平均値	665 <sup>1)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	166 <sup>6,8,10,11,12,15)</sup>	25 での測定値を20 に補正	166 <sup>1)</sup>
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	-	3.12 <sup>1-7),10-12)</sup>	信頼性の定まった情報源からの測定値	3.12 <sup>4)</sup>
ヘンリー係数	Pa·m <sup>3</sup> /mol	<u>537</u> <sup>8)</sup>	信頼性の定まった情報源からの3つの測定値の平均	524 <sup>6)</sup>
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	537 <sup>4)</sup>	信頼性の定まった情報源からの測定値	537 <sup>4)</sup>
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	<u>21.4</u> <sup>2)</sup>	信頼性の定まった情報源からの測定値	53.16 <sup>16)</sup>
生物蓄積係数(BMF)	-	1	logPow と BCF から設定 <sup>17)</sup>	1
解離定数(pKa)	-	-	解離性の基を有さない物質 <sup>18)</sup>	-

134 1) OECD(2003)

135 2) EHC

136 3) IUCLID-1(2000)

137 4) ECHA

138 5) CRC

139 6) NITE(2005)

140 7) MOE(2012)

141 8) Mackay(2006)

142 9) MITI(1998)

143

10) PhysProp

11) HSDB

12) ATSDR(2007)

13) CCD(2007)

14) Merck

15) IUPAC

16) EPI Suite

17) MHLW, METI, MOE(2014)

18) 評価 I においては解離定数は考慮しない

144 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

145 融点

146 参考値は、OECD (2003) に記載された測定値 (-25.2 )である。他の信頼性の定まった  
147 情報源においてもこの値を記載しているため値は変更しない。

148

149 沸点

150 参考値は、144.45 (CRC)、144.4 (EHC) の2つの平均値 (144.4 )である。他の信  
151 頼性の定まった情報源からは、144.5 (ATSDR (2007), CRC, HSDB, Mackay (2006),  
152 MOE (2012), PhysProp, ECHA)、144 (CCD (2007), Merck, MOE (2012), NITE (2005),  
153 OECD (2003))、144.4 (CRC, EHC, IUCLID-2 (2000), MOE (2012))であった。評価 に

154 おいては、上記の値を含めた平均値 (144 )を採用値とする。

155

156 蒸気圧

157 参考値は、OECD (2003) に記載された 20 での測定値 (665Pa)である。他の信頼性の  
158 定まった情報源からは、20 での測定値として、660Pa (EHC)、800Pa (MOE (2012))、670Pa  
159 (MOE (2012))、700Pa (NITE (2005))及び 20 を含む範囲の複数の温度での測定値に基づ  
160 く回帰式から 20 を内挿し、653Pa, 653Pa, 675Pa, 765Pa, 654Pa, 664Pa, 651Pa, 654Pa  
161 (Mackay (2006))が得られた。評価 においては、参考値の採用値及び上記の値を含めた 13  
162 の測定値の平均値 (680Pa) を採用値とする。

163

164 水に対する溶解度

165 参考値は、OECD (2003) に記載された 25 での測定値 (178mg/L)を 20 の値に換算  
166 (166mg/L)した値である。他の信頼性の定まった情報源から、ATSDR (2007), HSDB,  
167 IUPAC, Mackay (2006), NITE (2005), PhysProp が採用している同文献の 25 の測定値  
168 178mg/L (情報源によっては 179mg/L とも記されている)のデータが得られた。情報源  
169 において値が異なるため、元文献を確認したところ、178mg/L であることが判明したため、  
170 評価 では 178mg/L を 20 に補正した値 (166mg/L)を採用値とする。

171

172 logPow

173 参考値は、OECD (2003)に記載された測定値 (3.12)である。他の信頼性の定まった情報  
174 源においてもこの値を記載しているため値は変更しない。

175

176 ヘンリー係数

177 参考値は、NITE (2005)に記載された測定値 (524 Pa・m<sup>3</sup>/mol)であるが、引用文献を精査  
178 したところ、25 での測定値であり、値も誤っていた (正しくは 525 Pa・m<sup>3</sup>/mol)。他の信  
179 頼性の定まった情報源から、20 の測定値 480 Pa・m<sup>3</sup>/mol, 594 Pa・m<sup>3</sup>/mol (Mackay  
180 (2006))の平均値 (537 Pa・m<sup>3</sup>/mol)を採用値とする。

181

182 Koc

183 参考値は、ECHA に記載された OECD TG 121 の試験に基づいて行われている測定値  
184 (537L/kg)である。他の信頼性の定まった情報源では、490L/kg (OC=0.2%, natural  
185 sediment from River Leie, 18.6 ) (Mackay (2006))、234L/kg (OC=0.62%, sandy loam)  
186 (IUCLID-2 (2000)) が得られたが、参考値の採用データは OECD TG に基づいて行ってい  
187 るため、値は変更しない。

188

189

190 BCF

191 参考値は、BCFBAFWIN による推計値 (53.16L/kg)である。他の情報源では、化審法に  
192 おける生物濃縮性の判定はなかったが、14.1L/kg (goldfish, EHC), 21.4L/kg (eel (*Anguilla*  
193 *japonica*), EHC)の測定値が得られた。技術ガイダンスに基づき、データの最大値  
194 (21.4L/kg)を採用値とする。

195

196 BMF

197 参考値は、logPow 及び BCF 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  
198 の技術ガイダンス(以下、「技術ガイダンス」という。)に従って設定した値(1)である。BMF  
199 の測定値は得られなかったため、評価 においてもこの値 (1) を採用値とする。

200

201

202 (参考 1-1-2) *m*-キシレン

203 下表に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。*m*-体単体では評価は未実施  
 204 であるが、信頼性基準に基づき参考値を定めている。表中の下線部は、評価において精  
 205 査した結果、参考値から変更した値を示している。

206

207

表 1 - 5 *m*-キシレンの物理化学的性状等データのまとめ

項目	単位	採用値	詳細	(参考)
分子量	-	106.16	-	
融点		<u>-47.8<sup>1-5,7,8,10,12)</sup></u>	信頼性の定まった情報源からの 9つの測定値の平均	-47.9 <sup>1)</sup>
沸点		139.1 <sup>2-5)</sup>	信頼性の定まった情報源からの 測定値	139.1 <sup>2)</sup>
蒸気圧	Pa	<u>820<sup>1-2),6-8)</sup></u>	20の測定値及び複数の温度に おける測定値に基づく回帰式から 20に内挿した値を含めた12 の値の平均値	798 <sup>1)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	160 <sup>8)</sup>	20での測定値	160 <sup>9)</sup>
1-オクタノールと水との間の 分配係数(logPow)	-	3.2 <sup>1-7),10-12)</sup>	信頼性の定まった情報源からの 測定値	3.2 <sup>1)</sup>
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	606 <sup>8)</sup>	20での測定値	728 <sup>10-12)</sup>
有機炭素補正土壌吸 着係数(Koc)	L/kg	<u>192<sup>2-8)</sup></u>	信頼性の定まった情報源からの 3土壌での測定値の平均	537 <sup>4)</sup>
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	<u>23.6<sup>2)</sup></u>	信頼性の定まった情報源からの 測定値( <i>m</i> -キシレン及び <i>p</i> -キシ レンの混合物の値)	60.03 <sup>16)</sup>
生物蓄積係数(BMF)	-	1	logPowとBCFから設定 <sup>17)</sup>	1
解離定数(pKa)	-	-	解離性の基を有さない物質	- <sup>18)</sup>

208

209

210

211

212

213

214

215

216

217

- |                   |                           |
|-------------------|---------------------------|
| 1) OECD(2003)     | 10) PhysProp              |
| 2) EHC            | 11) HSDB                  |
| 3) IUCLID-1(2000) | 12) ATSDR(2007)           |
| 4) ECHA           | 13) CCD(2007)             |
| 5) CRC            | 14) Merck                 |
| 6) NITE(2005)     | 15) IUPAC                 |
| 7) MOE(2012)      | 16) EPI Suite             |
| 8) Mackay(2006)   | 17) MHLW, METI, MOE(2014) |
| 9) MITI(1998)     | 18) 評価Iにおいては解離定数は考慮しない    |

218 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

219 融点

220 参考値は、OECD(2003)に記載された測定値(-47.9)である。他の信頼できる情報源  
 221 では、-47.8(ATSDR(2007),CRC,Mackay(2006),MOE(2012),PhysProp)または  
 222 -47.9(EHC,IUCLID-3(2000),ECHA)であった。2つの値の平均値(-47.8)を採用値と  
 223 する。

224

225 沸点

226 参考値は、EHCに記載された測定値(139.1)である。他の信頼できる情報源からは、

227 多くの文献においてこの値が記載されており、評価 においてもこの値 (139.1 ) を採用  
228 値とする。

229

230 蒸気圧

231 参考値は、OECD (2003) に記載された 20 での測定値 (798Pa)である。他の信頼でき  
232 る情報源からは、20 での測定値として、790Pa (EHC)、800Pa (NITE (2005))、800Pa  
233 (MOE (2003))、また 20 を含む範囲の複数の温度での測定値に基づく回帰式から、812Pa,  
234 824Pa, 824Pa, 833Pa, 833Pa, 834Pa, 839Pa, 851Pa (Mackay (2006))が得られた。評価  
235 においては、参考値の採用値及び上記の値を含めた 12 の測定値の平均値 (820Pa) を採用  
236 値とする。

237

238 水に対する溶解度

239 参考値は、OECD TG 105 の試験に基づいて行われている MITI(1998)に記載された 25  
240 での測定値 (160 mg/L) を 20 に補正した値 (149 mg/L) である。他の信頼できる情報源  
241 からは、20 の測定値として 160 mg/L (Mackay (2006))が得られた。評価 においては 20  
242 の測定値 (160 mg/L) を採用値とする。

243

244 logPow

245 参考値は、OECD (2003) に記載された測定値(3.2)である。他の信頼できる情報源からは、  
246 この値が記載されているため、値は変更しない。

247

248 ヘンリー係数

249 参考値は、ATSDR (1990), HSDB, PhysProp に記載された測定値 (728 Pa・m<sup>3</sup>/mol)であ  
250 ったが、元文献を精査したところ、25 での値であった。他の信頼できる情報源からは、  
251 20 の測定値として、606 Pa・m<sup>3</sup>/mol (Mackay (2006))が得られたので、評価 においては  
252 その測定値 (606 Pa・m<sup>3</sup>/mol)を採用値とする。

253

254 Koc

255 参考値は、ECHA に記載された OECD TG 121 の試験に基づいて行われている測定値  
256 (537L/kg)である。本文献について精査したところ、*o*-キシレンの値であることが分かった  
257 ため、除外する。他の信頼できる情報源からは、129L/kg (pH=5.6, OC=0.2%, Forest soil)、  
258 158L/kg (pH=7.4, OC=3.7%, Agricultural soil)、289L/kg (pH=7.4, OC=2.2%, Forest soil)  
259 (EHC, Mackay (2006))が得られた。上記の 3 つの平均値 (192L/kg) を採用値とする。

260

261 BCF

262 参考値は、BCFBAFWIN による推計値 (60.03L/kg)である。他の信頼できる情報源から

263 は、化審法における生物濃縮性の判定はなかったが、14.8L/kg (goldfish, EHC), 23.6L/kg  
264 (eel (*Anguilla japonica*), EHC)の値が得られた。ここで、23.6L/kgのデータは *m*-キシレン  
265 と *p*-キシレンの混合物の値である。技術ガイダンスに基づき、データの最大値 (23.6L/kg)  
266 を採用値とする。

267

268 BMF

269 参考値は、logPow 及び BCF 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  
270 の技術ガイダンス(以下、「技術ガイダンス」という。)に従って設定した値 (1)である。BMF  
271 の測定値は得られなかったため、値は変更しない。

272

273 (参考 1-1-3) p-キシレン

274 下表に物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。なお、表中の下線部は、評価 において  
 275 て精査した結果、評価 から変更した値を示している。

276

277 表 1 - 6 p-キシレンの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	-	106.16	-	
融点		13.3 <sup>1-3,5)</sup>	信頼性の定まった情報源からの測定値	13.3 <sup>1)</sup>
沸点		<u>138.3</u> <sup>1,2,5,7,10-12)</sup>	信頼性の定まった情報源からの 8 つの測定値の平均	138.3 <sup>2,5)</sup>
蒸気圧	Pa	<u>820</u> <sup>1),6-8)</sup>	20 の測定値及び複数の温度における測定値に基づく回帰式から 20 に内挿した値を含めた 10 の値の平均値	865 <sup>1)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	<u>151</u> <sup>8,10-12)</sup>	信頼性の定まった情報源からの 20 での測定値	149.4 <sup>9)</sup>
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	-	<u>3.15</u> <sup>1-8,10-12)</sup>	信頼性の定まった情報源からの測定値	3.15 <sup>1)</sup>
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	<u>654</u> <sup>8)</sup>	信頼性の定まった情報源からの測定値	699 <sup>10-12)</sup>
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	<u>368</u> <sup>4,8)</sup>	信頼性の定まった情報源からの 6 土壌の測定値の平均	537 <sup>4)</sup>
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	<u>23.6</u> <sup>2)</sup>	信頼性の定まった情報源からの測定値 (m-キシレン及び p-キシレンの混合物の値)	55.64 <sup>13)</sup>
生物蓄積係数(BMF)	-	1	logPow と BCF から設定 <sup>17)</sup>	1
解離定数(pKa)	-	-	解離性の基を有さない物質	- <sup>18)</sup>

278 1) OECD(2003)

279 2) EHC

280 3) IUCLID-1(2000)

281 4) ECHA

282 5) CRC

283 6) NITE(2005)

284 7) MOE(2012)

285 8) Mackay(2006)

286 9) MITI(1998)

287

10) PhysProp

11) HSDB

12) ATSDR(2007)

13) CCD(2007)

14) Merck

15) IUPAC

16) EPI Suite

17) MHLW, METI, MOE(2014)

18) 評価 I においては解離定数は考慮しない

288 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

289 融点

290 評価 で採用した値は、OECD (2003) に記載された測定値 (13.3 )である。CRC (2013)、  
 291 EHC, IUCLID-4 (2000)にもこの値が記載されており、評価 においてもこの値 (13.3 )  
 292 を採用値とする。

293

294 沸点

295 評価 で採用した値は、138.3 (CRC、EHC) である。他の情報源からは、138.3

296 (OECD (2003))、138.23 (CRC, HSDB)、138.4 (ATSDR (2006), MOE (2005), ECHA)  
297 であった。評価 においては、評価 の採用値を及び上記の値を含めた 8 つの平均値  
298 (138.3 )を採用値とする。

299

#### 300 蒸気圧

301 評価 で採用した値は、OECD (2003)に記載された 20 での測定値 (865Pa)である。他  
302 の情報源からは、20 での測定値として、860Pa (EHC)、870Pa (MOE (2003))、900Pa  
303 (NITE (2005))、また 20 を含む範囲の複数の温度での測定値に基づく回帰式から、880Pa,  
304 784Pa, 883Pa, 882Pa, 867Pa, 435Pa (Mackay (2006))が得られた。評価 においては、評  
305 価 の採用値及び上記の値を含めた 10 の測定値の平均値 (820Pa) を採用値とする。

306

#### 307 水に対する溶解度

308 評価 で採用した値は、MITI (1998) に記載された OECD TG 105 の試験に基づいて行  
309 われている 25 での測定値 (160mg/L)を 20 の値に換算 (149mg/L)した値である。他の  
310 情報源からは、ATSDR (2007), HSDB, Mackay (2006), NITE (2005), PhysProp が採用し  
311 ている同文献の 25 の測定値 162mg/L (情報源によっては 163mg/L とも記されている)の  
312 データが得られた。情報源において値が異なるため、元文献を確認したところ、162mg/L  
313 であることが判明したため、評価 では 162mg/L を 20 に補正した値 151mg/L を採用値  
314 とする。

315

#### 316 logPow

317 評価 で採用した値は、OECD (2003) に記載された測定値 (3.15)である。他の情報源に  
318 おいても、この値を採用しており、評価 においてもこの値 (3.15) を採用値とする。

319

#### 320 ヘンリー係数

321 評価 で採用した値は、PhysProp に記載された測定値 (699 Pa・m<sup>3</sup>/mol)であるが、測  
322 定温度が不明であった。他の信頼できる情報源では、20 の測定値として、654 Pa・m<sup>3</sup>/mol  
323 (Mackay (2006))が得られた。評価 においてはこの測定値 (654 Pa・m<sup>3</sup>/mol) を採用値と  
324 する。

325

#### 326 Koc

327 評価 で採用した値は、ECHA に記載された OECD TG 121 の試験に基づいて行われて  
328 いる測定値 (537L/kg)である。本文献について精査したところ、*o*-キシレンの値であること  
329 が分かったため、除外する。他の情報源では、575L/kg (OC=0.2%, 18.6 ), 74.95L/kg  
330 (OC=4.1%, pH=5), 453.3L/kg (OC=0.23%, pH=5), 429.2L/kg (OC=0.065%, pH=5.5),  
331 525L/kg (pH=4.97), 148L/kg (pH=4.43) (Mackay (2006))が得られた。評価 においては上

332 記の6つの平均値 (368 Pa·m<sup>3</sup>/mol) を採用値とする。

333

334 BCF

335 評価 で採用した値は、BCFBAFWIN による推計値 (55.64L/kg)である。他の情報源で  
336 は、化審法における生物濃縮性の判定はなかったが、14.8L/kg (goldfish, EHC), 23.6L/kg  
337 (eel (*Anguilla japonica*), EHC)の値が得られた。ここで、23.6L/kgのデータは *m*-キシレン  
338 と *p*-キシレンの混合物の値である。評価 においては技術ガイダンスに基づき、得られた  
339 データの最大値 (23.6L/kg)を採用値とする。

340

341 BMF

342 評価 で採用した値は、logPow 及び BCF から化審法における優先評価化学物質に関する  
343 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。) に従って設定した値 (1)  
344 である。BMF の測定値は得られなかったため、評価 においてもこの値 (1) を採用値とす  
345 る。

346

347

348 1-2 分解性

349 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。また、キシレンの分解性でデー  
 350 タが得られず各異性体でデータが存在した場合、各異性体で一番半減期が長いデータを参  
 351 考値として採用する。

352

353

表 1-7 キシレンの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	0.86	25 での反応速度定数の測定値 <sup>1)</sup> から OH ラジカル濃度 $5 \times 10^5$ molecule/cm <sup>3</sup> と して算出
		オゾンとの反応	( $2.9 \times 10^4$ )	p-キシレンの採用値
		硝酸ラジカルとの反応	(470)	m-キシレンの採用値
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	28	好気性生分解の値より <sup>2)</sup>
		加水分解	-	加水分解の基を持たない
		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	28	好気性生分解の値より <sup>2)</sup>
		加水分解	-	水中加水分解の項を参照
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	112	水中生分解半減期の4倍と仮定
		加水分解	-	水中加水分解の項を参照

354 平成 28 年度第 2 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  
 355 (平成 28 年 11 月 17 日開催)において了承された値

356 1) PhysProp

357 2) Howard(1991)

358 NA：情報が得られなかったことを示す

359 -：無視できると考えられることを示す

360 ( )：括弧内の値は参考値であることを示す

361

362 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  
 363 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。

364

365 大気

366 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、機序別の半減期について  
 367 は、OH ラジカルとの反応の情報のみ得られた。

368 -1 OH ラジカルとの反応の半減期

369 PhysProp の 25 における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値  $1.87 \times 10^{-11}$   
 370 cm<sup>3</sup>/molecule/s を半減期算出に採用する。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの  $5$   
 371  $\times 10^5$  molecule/cm<sup>3</sup> とした場合、半減期は 0.86 日と算出される。評価 ではこの値 (0.86

372 日)を用いる。

373 -2 オゾンとの反応の半減期

374 キシレンとしてのデータは得られなかったが、各異性体のデータは存在する。各異性体  
375 の中で半減期が最長の *p*-キシレンの値 ( $2.9 \times 10^4$  日) を参考値として採用する

376 -3 NO<sub>3</sub> ラジカルとの反応の半減期

377 キシレンとしてのデータは得られなかったが、各異性体のデータは存在する。各異性体  
378 の中で半減期が最長の *m*-キシレンの値 (470 日) を参考値として採用する。

379

380 水中

381 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、機序別の半減期に関する情  
382 報が得られた。

383 -1 生分解の半減期

384 Howard (1991)において、順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  
385 生分解の半減期を 672 時間と設定している。評価 Ⅰ では生分解による半減期を 28 日とする。

386 -2 加水分解の半減期

387 本物質は、加水分解性の基を持たないため、評価 Ⅰ では加水分解しないとする。

388

389 土壌

390 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  
391 に関する情報が得られた。

392 -1 生分解の半減期

393 Howard (1991)において、順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  
394 の生分解の半減期を 672 時間と設定している。評価 Ⅰ では生分解による半減期を 28 日とす  
395 る。

396 -2 加水分解の半減期

397 水中加水分解の項と同様に、評価 Ⅰ では加水分解しないとする。

398

399 底質

400 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  
401 する情報も得られなかった。

402 -1 生分解の半減期

403 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  
404 ンスに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 112 日とする。

405 -2 加水分解の半減期

406 水中加水分解の項と同様に、評価 Ⅰ では加水分解しないとする。

407

408 以下、参考として各異性体の分解性について示す。  
409  
410

411 (参考 1-2-1) o-キシレン  
 412 下表に分解に係るデータを示す。

413  
 414

表 1 - 8 o-キシレンの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	1.4
		オゾンとの反応	$1.6 \times 10^4$
		硝酸ラジカルとの反応	304
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	28
		加水分解	-
		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	28
		加水分解	-
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	112
		加水分解	-

415 1) NIST  
 416 2) Mackay(2006)  
 417 3) Howard(1991)  
 418 NA: 情報が得られなかったことを示す  
 419 -: 分解しないことを示す

420  
 421

422 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  
 423 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。

424  
 425

大気

426 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、機序別の半減期について  
 427 は、情報が得られた。

428 -1 OH ラジカルとの反応の半減期

429 NIST の 295K (22 )における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値  $1.14 \times 10^{-11}$   
 430  $\text{cm}^3/\text{molecule}/\text{s}$  を半減期算出に採用する。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの  $5$   
 431  $\times 10^5 \text{ molecule}/\text{cm}^3$  とした場合、半減期は 1.4 日と算出される。評価 ではこの値 (1.4 日)

432 を用いる。

433 -2 オゾンとの反応の半減期

434 NIST の 296K (23 )におけるオゾンとの反応速度定数の測定値  $7.01 \times 10^{-22}$   
435  $\text{cm}^3/\text{molecule}/\text{s}$  を半減期算出に採用する。大気中オゾン濃度を技術ガイダンスの  $7 \times 10^{11}$   
436  $\text{molecule}/\text{cm}^3$  とした場合、半減期は  $1.6 \times 10^4$  日と算出される。評価 ではこの値 ( $1.6 \times 10^4$   
437 日) を用いる。

438 -3  $\text{NO}_3$  ラジカルとの反応の半減期

439 NIST の 296K (23 )における  $\text{NO}_3$  ラジカルとの反応速度定数の測定値  $1.10 \times 10^{-16}$   
440  $\text{cm}^3/\text{molecule}/\text{s}$  を半減期算出に採用する。大気中  $\text{NO}_3$  ラジカル濃度を技術ガイダンスの  $2.4$   
441  $\times 10^8 \text{ molecule}/\text{cm}^3$  とした場合、半減期は 304 日と算出される。評価 ではこの値 (304  
442 日) を用いる。

443

444 水中

445 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、機序別の半減期に関する情  
446 報が得られた。

447 -1 生分解の半減期

448 Howard (1991)、Mackay (2006) において、順化した好気的な土壌サンプルを用いた試  
449 験結果から水中での生分解の半減期を 672 時間と設定している。評価 では生分解による  
450 半減期を 28 日とする。

451 -2 加水分解の半減期

452 本物質は、加水分解性の基を持たないため、評価 では加水分解しないとする。

453

454 土壌

455 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  
456 に関する情報が得られた。

457 -1 生分解の半減期

458 Howard (1991)、Mackay (2006) において、順化した好気的な土壌サンプルを用いた試  
459 験結果から土壌中での生分解の半減期を 672 時間と設定している。評価 では生分解によ  
460 る半減期を 28 日とする。

461 -2 加水分解の半減期

462 水中加水分解の項と同様に、評価 では加水分解しないとする。

463

464 底質

465 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  
466 する情報も得られなかった。

467 -1 生分解の半減期

468 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、技術ガイド  
469 ンスに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 112 日とする。

470 -2 加水分解の半減期

471 水中加水分解の項と同様に、評価 では加水分解しないとする。

472

473

474 (参考 1-2-2) *m*-キシレン  
 475 下表に分解に係るデータを示す。

476  
 477

表 1 - 9 *m*-キシレンの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	0.89
		オゾンとの反応	4,000
		硝酸ラジカルとの反応	470
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	28
		加水分解	-
		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	28
		加水分解	-
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	112
		加水分解	-

478 1) NIST  
 479 2) Mackay(2006)  
 480 3) Howard(1991)  
 481 NA: 情報が得られなかったことを示す  
 482 -: 分解しないことを示す

483  
 484

485 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  
 486 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。

487  
 488

大気

489 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、機序別の半減期について  
 490 は、情報が得られた。

491 -1 OH ラジカルとの反応の半減期

492 NIST の 298K (25 )における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値  $1.81 \times 10^{-11}$   
 493  $\text{cm}^3/\text{molecule}/\text{s}$  を半減期算出に採用する。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの  $5$   
 494  $\times 10^5 \text{ molecule}/\text{cm}^3$  とした場合、半減期は 0.89 日と算出される。評価 ではこの値 (0.89

495 日)を用いる。

496 -2 オゾンとの反応の半減期

497 NIST の 296K (23 )におけるオゾンとの反応速度定数の測定値  $2.91 \times 10^{-21}$   
498  $\text{cm}^3/\text{molecule}/\text{s}$  を半減期算出に採用する。大気中オゾン濃度を技術ガイダンスの  $7 \times 10^{11}$   
499  $\text{molecule}/\text{cm}^3$  とした場合、半減期は 4000 日と算出される。評価 ではこの値 (4000 日) を  
500 用いる。

501 -3  $\text{NO}_3$  ラジカルとの反応の半減期

502 NIST の 296K (23 )における  $\text{NO}_3$  ラジカルとの反応速度定数の測定値  $7.11 \times 10^{-17}$   
503  $\text{cm}^3/\text{molecule}/\text{s}$  を半減期算出に採用する。大気中  $\text{NO}_3$  ラジカル濃度を技術ガイダンスの  $2.4$   
504  $\times 10^8 \text{ molecule}/\text{cm}^3$  とした場合、半減期は 470 日と算出される。評価 ではこの値 (470  
505 日) を用いる。

506

507 水中

508 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、機序別の半減期に関する情  
509 報が得られた。

510 -1 生分解の半減期

511 Howard (1991)、Mackay (2006) において、順化した好気的な土壌サンプルを用いた試  
512 験結果から水中での生分解の半減期を 672 時間と設定している。評価 では生分解による  
513 半減期を 28 日とする。

514 -2 加水分解の半減期

515 本物質は、加水分解性の基を持たないため、評価 では加水分解しないとする。

516

517 土壌

518 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  
519 に関する情報が得られた。

520 -1 生分解の半減期

521 Howard (1991)、Mackay (2006) において、順化した好気的な土壌サンプルを用いた試  
522 験結果から土壌中での生分解の半減期を 672 時間と設定している。評価 では生分解によ  
523 る半減期を 28 日とする。

524 -2 加水分解の半減期

525 水中加水分解の項と同様に、評価 では加水分解しないとする。

526

527 底質

528 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  
529 する情報も得られなかった。

530 -1 生分解の半減期

- 531 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、技術ガイド  
532 ンスに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 112 日とする。
- 533 -2 加水分解の半減期
- 534 水中加水分解の項と同様に、評価 では加水分解しないとする。
- 535
- 536

537 (参考 1-2-3) *p*-キシレン  
 538 下表に分解に係るデータを示す。

539  
 540

表 1 - 10 *p*-キシレンの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	1.2
		オゾンとの反応	$2.9 \times 10^4$
		硝酸ラジカルとの反応	239
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	28
		加水分解	-
		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	28
		加水分解	-
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	112
		加水分解	-

541 1) NIST  
 542 2) Mackay(2006)  
 543 3) Howard(1991)  
 544 4) MOE(2012)  
 545 NA: 情報が得られなかったことを示す  
 546 -: 分解しないことを示す

547  
 548

549 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  
 550 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。

551  
 552

大気

553 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、機序別の半減期について  
 554 は、情報が得られた。

555 -1 OH ラジカルとの反応の半減期

556 NIST の 296K (23 )における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値  $1.30 \times 10^{-11}$   
 557  $\text{cm}^3/\text{molecule}/\text{s}$  を半減期算出に採用する。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの 5

558  $\times 10^5$  molecule/cm<sup>3</sup>とした場合、半減期は 1.2 日と算出される。評価 ではこの値 (1.2 日)  
559 を用いる。

560 -2 オゾンとの反応の半減期

561 NIST の 297K (24 )におけるオゾンとの反応速度定数の測定値  $4.00 \times 10^{-22}$   
562 cm<sup>3</sup>/molecule/s を半減期算出に採用する。大気中オゾン濃度を技術ガイダンスの  $7 \times 10^{11}$   
563 molecule/cm<sup>3</sup>とした場合、半減期は  $2.9 \times 10^4$  日と算出される。評価 ではこの値 ( $2.9 \times 10^4$   
564 日) を用いる。

565 -3 NO<sub>3</sub> ラジカルとの反応の半減期

566 NIST の 296K (23 )における NO<sub>3</sub> ラジカルとの反応速度定数の測定値  $1.40 \times 10^{-16}$   
567 cm<sup>3</sup>/molecule/s を半減期算出に採用する。大気中 NO<sub>3</sub> ラジカル濃度を技術ガイダンスの  $2.4$   
568  $\times 10^8$  molecule/cm<sup>3</sup>とした場合、半減期は 239 日と算出される。評価 ではこの値 (239  
569 日) を用いる。

570

571 水中

572 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、機序別の半減期に関する情  
573 報が得られた。

574 -1 生分解の半減期

575 Howard (1991)、Mackay (2006) において、順化した好気的な土壌サンプルを用いた試験  
576 結果から水中での生分解の半減期を 672 時間と設定している。評価 では生分解による半  
577 減期を 28 日とする。

578 -2 加水分解の半減期

579 MOE (2012)において、「加水分解性の基を持たない」と記されているため、評価 では  
580 加水分解しないとする。

581

582 土壌

583 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  
584 に関する情報が得られた。

585 -1 生分解の半減期

586 Howard (1991)、Mackay (2006) において、順化した好気的な土壌サンプルを用いた試  
587 験結果から土壌中での生分解の半減期を 672 時間と設定している。評価 では生分解によ  
588 る半減期を 28 日とする。

589 -2 加水分解の半減期

590 水中加水分解の項と同様に、評価 では加水分解しないとする。

591

592 底質

593 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

594 する情報も得られなかった。

595 -1 生分解の半減期

596 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  
597 ンスに従って、水中の生分解半減期の4倍である112日とする。

598 -2 加水分解の半減期

599 水中加水分解の項と同様に、評価 では加水分解しないとする。

600

601 1-3 性状データの暴露評価結果等への感度解析

602 技術ガイダンス 章に従って、性状データの暴露評価結果等に対する感度解析を行った。  
603 キシレンの採用値と各キシレンの異性体の参考値を感度解析の対象とした。変動させた項  
604 目ごとの数理モデルの入力値は先述した表 1-1 及び表 1-2 に示している。

605

606 感度解析には PRAS-NITE<sup>4</sup>及び MNSEM3-NITE<sup>5</sup>を用いた。PRAS-NITE については、  
607 生態影響に係るリスク懸念箇所数を、MNSEM3-NITE については、環境媒体別存在比率を  
608 感度解析の目的変数とした。また、排出量は平成 25 年度の PRTR 情報を、有害性情報は評  
609 価 の水生生物の毒性値 (PNEC : 0.0026 mg/L) を用いた。それぞれの数理モデルを用い  
610 た感度解析の結果を図 1-1 MNSEM3-NITE を用いた感度解析結果及び表 1-11 に示す。

611

612 MNSEM3-NITE においては、採用値及び各異性体いずれも環境媒体別存在比率の大気  
613 分配比率が高いが、*o*-キシレンは他の異性体及び採用値と比べ、土壌・水中の分配比率が高  
614 くなった。PRAS-NITE においては、リスク懸念箇所数の変化はなかった。

615

616 表 1-11 PRAS-NITE を用いた感度解析結果

617

リスク懸念判定 (生態)	リスク懸念箇所数 (水生生物)	リスク懸念なし 箇所数(水生生物)
採用値	3	18,806
<i>o</i> -キシレン	3	18,806
<i>m</i> -キシレン	3	18,806
<i>p</i> -キシレン	3	18,806

618

619

620

621

622

623

624

625

626

627

628

629

630

631

632

633

<sup>4</sup> PRAS-NITE : PACSs Risk Assessment System (<http://www.safe.nite.go.jp/risk/pras-nite.html>)

<sup>5</sup> MNSEM という日本版の多媒体モデルをベースにし、一部改良を加えたもの。

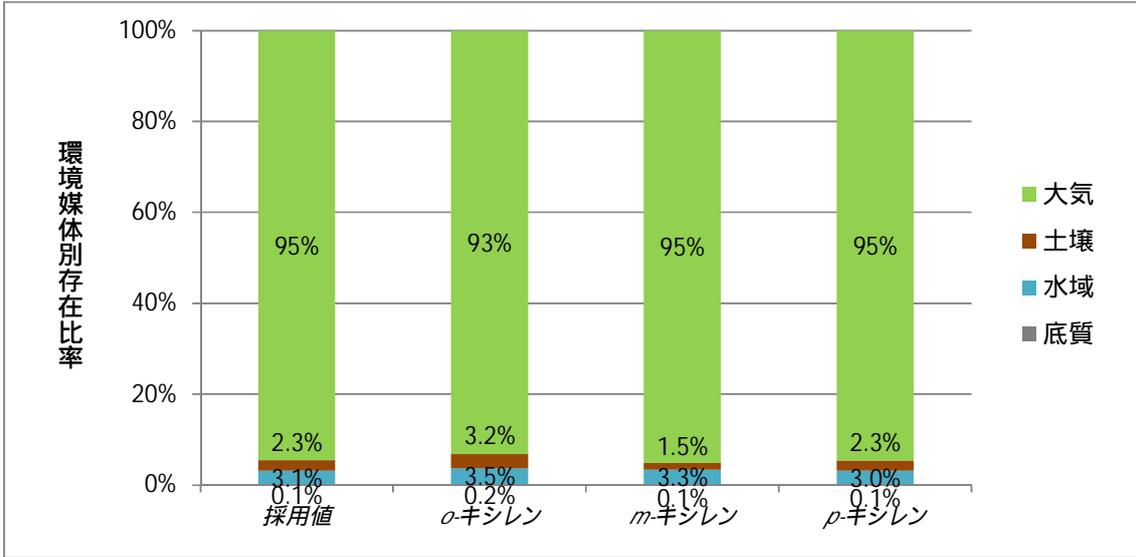


図 1-1 MNSEM3-NITE を用いた感度解析結果

634  
635  
636  
637

638 1 - 4 出典  
639 ATSDR(2007): Agency for Toxic Substances and Disease Registry. “Toxicological Profile  
640 for Xylene”, Toxicological Profiles. 1989.

641 CCD(2007): Richard J. Lewis Sr., Gessner Goodrich Hawley. Hawley’s Condensed  
642 Chemical Dictionary. 15th ed., 2007.

643 CRC: Haynes, W.M., ed CRC Handbook of Chemistry and Physics. 94<sup>th</sup> ed., CRC Press,  
644 2013-2014.

645 EHC: International Programme on Chemical Safety, Environmental Health Criteria  
646 190, XYLENES (1990): World Health Organization, Geneva.

647 ECHA: ECHA. Information on Chemicals – Registered substances.  
648 <http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>,  
649 (2015-02-23 閲覧).

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

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

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

655 IUCLID-1(2000): EU ECB. IUCLID Dataset, Xylene. 2000.

656 IUCLID-2(2000): EU ECB. IUCLID Dataset, *o*-Xylene. 2000.

657 IUCLID-3(2000): EU ECB. IUCLID Dataset, *m*-Xylene. 2000.

658 IUCLID-4(2000): EU ECB. IUCLID Dataset, *p*-Xylene. 2000.

659 IUPAC: The IUPAC Solubility Data Series.

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

663 Merck(2006): The Merck Index. 14th ed.

664 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  
665 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.

- 666 MITI(1998): MITI. *m*-キシレン及び *p*-キシレン(試料 No.K-19) の物理化学正常の測定試験  
667 報告書. 既存化学物質点検, 1998.
- 668 MOE(2002): MOE. 化学物質の環境リスク評価 第 1 巻, キシレン. 2002.
- 669 MOE(2012): MOE. 化学物質の環境リスク評価 第 10 巻, キシレン. 2012
- 670 NIST: NIST. Chemistry WebBook. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>, (2016-09-02 閲  
671 覧).
- 672 NITE(2005): NITE. 化学物質の初期リスク評価書, キシレン. Ver. 1.0, No. 62, 2005.
- 673 OECD(2003): OECD. SIDS Initial Assessment Report, Xylenes. 2003.
- 674 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2015-02-23 閲覧).

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
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
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUCLID	IUCLID
IUPAC	The IUPAC Solubility Data Series
Mackay	OASIS Catalogic
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」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
REACH登録情報	REACH登録情報
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

基本情報

優先通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

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IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 IUCLID	融点	-54 °C	-54					calculate	推計値	4A	×			p.29
2	融点	-47.9~ 13.3 ° C[Value is variable and dependent on compositio n]	-17.3		no data					4A	×			p.29
3	融点	<-34 °C	-34		no data					4A	×			p.29
4 REACH登録 情報	融点	-25.2 °C	-25.2		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	o-キシレンの値	Lide D (editor in chief).Handbook of chemistry and physics, 89th edition.2008,CRC Press, Boca Raton.	Read across Subs Key Melting point/freezing point.001
5	融点	13.2 °C	13.2		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	p-キシレンの値	Lide D. (Ed).CRC handbook of chemistry and physics. 89th ed..2008,CRC Press, Boca Raton, USA.	Read across Subs Key Melting point/freezing point.002
6	融点	-94.96 ° C[Sublimati on: no]	-94.96		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	エチルベンゼンの値	Lide D (editor in chief).Handbook of Chemistry and Physics, 89th edition.2008,CRC Press, Boca Raton.	Read across Subs Key Melting point/freezing point.003
7	融点	-49.7 ° C[Sublimati on: no]	-49.7		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	m-キシレンの値	Lide D (editor in chief).Handbook of Chemistry and Physics, 89th edition.2008,CRC Press, Boca Raton.	Read across Subs Key Melting point/freezing point.004
8			13.3								○	p-キシレンの値を採用		

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

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IIIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	137~140 ° C	138.5									4A	×			p.2613
2 ATSDR	137~140 ° C	138.5									4A	×			p.187
3 CCD	137.2~ 140.5 ° C[Grade: Nitration]	138.85									4A	×			
4 CCD	134~138 ° C[Grade: 4 degrees]	136									4A	×	4 degrees (bp range 138- 134C)		
5 CCD	137~142 ° C[Grade: 5 degrees hi gh in m- isomer]	139.5									4A	×			
6 CCD	135~145 ° C[Grade: 10 degrees]	140									4A	×	4 degrees (bp range 138- 134C)		
7 CCD	40~160 ° C[Grade: industrial 9 0% 40C, complete 160C]	100									4A	×			
8 HSDB	137.2~ 140.5 ° C[Grade dependent: Nitration]	138.85									4A	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
9 HSDB	134~138 ° C[Grade dependent: 4 degrees]	136									4A	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
10 HSDB	137~142 ° C[Grade dependent: 5 degrees hi gh in m- isomer]	139.5									4A	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
11 HSDB	135~145 ° C[Grade dependent: 10 degrees]	140									4A	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
12 HSDB	40 ° C[Grade dependent: industrial (bp 90% 40 deg C)]	40									4A	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

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IIIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
13 HSDB	160 ° C[Grade dependent: industrial (bp complete)]	160									4A	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
14 IUCLID	137~143 ° C	140	177.63851	1.013 hPa	その他,ASTM D 86				推計値		4A	×			p.29
15 IUCLID	138~144 ° C	141			その他,DIN 53171	no data					4A	×			p.29
16 IUCLID	138.3~ 141.4 ° C[Value is variable and dependent on compositio n]	139.85	-199.0196	10130 hPa		no data					4A	×			p.29
17 Merck	137~140 ° C	138.5									4A	×			
18 PhysProp	138.5 °C	138.5									4A	○			
19 REACH登録 情報	144.5 °C	144.5	144.5094	1013 hPa		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	o-キシレンの値	Lide D (editor in chief).Handbook of chemistry and physics, 89th edition.2008,CRC Press, Boca Raton.	Read across Subs Key Boiling point.001
20 REACH登録 情報	136.16 °C	136.16	136.16921	1013 hPa		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	p-キシレンの値	Lide D (editor in chief).Handbook of Chemistry and Physics, 89th edition.2008,CRC Press, Boca Raton.	Read across Subs Key Boiling point.002
21 REACH登録 情報	139 °C	139	139.00927	1013 hPa		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	エチルベンゼンの値	Lide D (editor in chief).Handbook of Chemistry and Physics, 89th edition.2008,CRC Press, Boca Raton.	Read across Subs Key Boiling point.003
22 REACH登録 情報	138.4 °C	138.4	138.40926	1013 hPa		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	m-キシレンの値	Lide D. (Ed).CRC handbook of chemistry and physics. 89th ed..2008,CRC Press, Boca Raton, USA.	Read across Subs Key Boiling point.004

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

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IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	18 mmHg	2399.8026	746.2109	37.7 °C							4A	×			p.2613
2 ATSDR	6.72 mmHg	895.92632	835.57079	21 °C							2B	○		Lewis 2001	p.187
3 HSDB	6.61~8.8 mmHg(for the individual isomers)	1027.2488	728.21941	25 °C							2B	×		Daubert TE, Danner RP; Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation Washington, DC: Taylor and Francis (1989)	ENVIRONMENTAL FATE & EXPOSURE:
4 IUCLID	7 hPa	700	700	20 °C	その他,DIN 51754	no data			experimental result		4A	×			p.30
5	88~120 hPa	10400	7372.5873	25 °C	その他,unknown	no data			estimated by calculation		4C	×			p.30
6	0.049 hPa	4.9	0.549439	55 °C					calculation		4A	×			p.30
7 PhysProp	7.99 mmHg	1065.2457	755.15549	25 °C					experimental result		2B	○		DAUBERT,TE & DANNER,RP.1989.	
8 REACH登録 情報	0.186 psi	1282.4254	816.31756	26.6 °C[80 °F]		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	o-キシレンの値	Zwolinski and Wilhoit.Handbook of vapour pressures and heats of vapourisation of hydrocarbons and related compounds.1971,Thermodynamics Research Centre, Texas A&M University, Texas.	Read across Subs Key Vapour pressure.002
9	0.202 psi	1392.7415	886.53843	26.6 °C[80 °F]		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	p-キシレンの値	Zwolinski and Wilhoit.Handbook of vapour pressures and heats of vapourisation of hydrocarbons and related compounds.1971,Thermodynamics Research Centre, Texas A&M University, Texas.	Read across Subs Key Vapour pressure.003
10	0.194 psi[lowest temperature reported in handbook as a cut off of 0.2 PSI was used]	1337.5834	589.31637	32.2 °C[90 °F]		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	エチルベンゼンの値	Zwolinski and Wilhoit.Handbook of vapour pressures and heats of vapourisation of hydrocarbons and related compounds.1971,Thermodynamics Research Centre, Texas A&M University, Texas.	Read across Subs Key Vapour pressure.004
11	0.207 psi	1427.2153	754.53152	29.4 °C[85 °F]		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	m-キシレンの値	Zwolinski and Wilhoit.Handbook of vapour pressures and heats of vapourisation of hydrocarbons and related compounds.1971,Thermodynamics Research Centre, Texas A&M University, Texas.	Read across Subs Key Vapour pressure.005

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

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IIにお けるキース タディ	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	106 mg/L	106	98.9516824	25 °C								2B	×			p.187
2 CCD	[insoluble in water]	単位換算不可										3	×			
3 HSDB	106 mg/L	106	98.9516824	25 °C								2B	×	本データは、引用文献に、「有効数字1桁若しくは誤差20%以上」との記載があるため除外	Yalkowsky, S.H., He, Yan., Handbook of Aqueous Solubility Data: An Extensive Compilation of Aqueous Solubility Data for Organic Compounds Extracted from the AQUASOL dATABASE. CRC Press LLC, Boca Raton, FL, 2003, p. 490	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
4 IUCLID	0.02 vol%	単位換算不可		20 °C						推計値		3	×			p.30
5	0.19 g/L[of very low solubility]	190	177.366223	25 °C		その他,nicht bekannt	no data					4A	×			p.30
6	146~175 mg/L	160.5	149.827783	25 °C	[pH is not applicable.]	その他,unknown	no data					4A	×			p.30
7 Merck	[Practically insol in water]	単位換算不可										3	×			
8 PhysProp	106 mg/L	106	98.9516824	25 °C						experimental result		2B	×		YALKOWSKY,SH & HE,Y.2003.	
9 REACH登録情報	170.5 mg/L[moderately soluble (100-1000 mg/L)]	170.5	159.162848	25 °C	7[pH not stated so assumed standard]		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×		Yalkowsky SH and He Y.Aqueous solubility data.2003,CRC Press, Boca Raton.	Read across Subs Key Water solubility.002
10	156 mg/L[moderately soluble (100-1000 mg/L)]	156	145.627004	25 °C	7[pH not stated so assumed standard]		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×		Yalkowsky SH and He Y.Handbook of aqueous solubility data..2003,CRC Press.	Read across Subs Key Water solubility.003
11	146 mg/L[moderately soluble (100-1000 mg/L)]	146	136.29194	25 °C	7[pH not stated so assumed standard]		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×		Yalkowsky SH and He Y.Handbook of aqueous solubility data..2003,CRC Press.	Read across Subs Key Water solubility.004
12	177 mg/L[moderately soluble (100-1000 mg/L)]	177	165.230639	25 °C	7[The pH values are not reported. Neutral pHs are assumed.]		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×		Yalkowsky SH and He Y.Handbook of aqueous solubility data..2003,CRC Press.	Read across Subs Key Water solubility.005

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

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IIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
13	208 mg/L[moder ately soluble (100-1000 mg/L)]	208	194.169339	25 °C	7[The pH values are not reported. Neutral pHs are assumed.]		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×		Yalkowsky SH and He Y.Handbook of aqueous solubility data..2003,CRC Press.	Read across Subs Key Water solubility.005
14	187 mg/L[moder ately soluble (100-1000 mg/L)]	187	174.565704	25 °C	7[The pH values are not reported. Neutral pHs are assumed.]		no data	2: reliable with restrictions	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×		Yalkowsky SH and He Y.Handbook of aqueous solubility data..2003,CRC Press.	Read across Subs Key Water solubility.005
15			151										○	p-キシレンの値を採用		

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

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IIIにお けるキース タデー	備考	文献	ページ番号等
1 IUCLID	2.77~ 3.15[Value is variable and dependent on compositio n]	2.96				no data			estimated by calculation		4C	×			p.30
2 NITE初期リ スク評価書	3.09[メチ ル基の位置 を特定しな いキシレ ン]	3.09							estimated by calculation		4C	×		SRC, Syracuse Research Corporation.KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY..2003.	p.2
3 PhysProp	3.16	3.16							experimental result		2B	○		HANSCH,C ET AL..1995.	
4 REACH登録 情報	3.12	3.12	20 °C[pH and temperatu re not stated so assumed standard]	7[pH and temperat ure not stated so assumed standard]		no data	2: reliable with restriction s	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×		Hansch, Leo and Hoekman.Exploring QSAR, hydrophobic, electronic and steric constants.1995,American Chemical Society, Washington DC.	Read across Subs Key Partition coefficient.002
5	3.2	3.2	20 °C[pH and temperatu re not stated, so assumed standard]	7[pH and temperat ure not stated, so assumed standard]		no data	2: reliable with restriction s	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×		Hansch C, Leo A, Hoekman D..Exploring QSAR hydrophobic, electronic, and steric constants..1995,American Chemical Society, Washington DC.	Read across Subs Key Partition coefficient.003
6	3.15	3.15	20 °C[pH and temperatu re not stated so assumed standard]	7[pH and temperat ure not stated so assumed standard]		no data	2: reliable with restriction s	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×		Hansch C, Leo A, Hoekman D..Exploring QSAR hydrophobic, electronic, and steric constants..1995,American Chemical Society.	Read across Subs Key Partition coefficient.004
7	3.15	3.15	20 °C[pH and temperatu re not stated so assumed standard]	7[pH and temperat ure not stated so assumed standard]		no data	2: reliable with restriction s	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×		Hansch C, Leo A, Hoekman D..Exploring QSAR hydrophobic, electronic, and steric constants..1995,American Chemical Society, Washington DC.	Read across Subs Key Partition coefficient.005
8		3.15										○	p-キシレンの値を採用		

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

◀ 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 HSDB	Koc	39~365	202										2B	×			ENVIRONMENTAL FATE:
2 IUCLID	Koc	48~68[o- xylene]	58										4A	×			p.37
3	Koc	25.4[p-xylene]	25.4			surface sediment (2 - 10 cm) collected from the central Tamar estuary in the U.K							4A	×			p.37
4 NITE初期リス ク評価書	Koc	39~2600	1319.5								experimental result		2B	×		SRC, Syracuse Research Corporation.PcKocWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY, 2003.	p.3
5 REACH登録情 報	Koc	537	537			soil	OECD TG 121	no	1: reliable without restriction	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	o-キシレンの値	Hodson J and Williams NA.The estimation of the adsorption coefficient (Koc) for soils by high performance liquid chromatography. 1988,Chemo sphere 17 67-77	Read across Subs Key Adsorption / desorption.002
6			368											○	p-キシレンの値を採用		

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

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 <sup>3</sup> /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IIIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1 HSDB	5.18E-3~7.18E-3 atm・m <sup>3</sup> /mol[for the individual isomers]	626.1885							2B	×			ENVIRONMENTAL FATE:
2 IUCLID	7.68E-3 atm・m <sup>3</sup> /mol	778.176							4A	×			p.37
3 PhysProp	0.00663 atm・m <sup>3</sup> /mol	671.78475					experimental result		2B	×		SANEMASA,I ET AL..1982.	
4 REACH登録情 報	665 Pa・ m <sup>3</sup> /mol[Bond contribution method]	665			2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR		4C	×		USEPA.HENRYWIN v3.2.2008,USEPA OPPT Risk Assessment Division.	QSAR Key Henry's Law constant.001
5	623 Pa・ m <sup>3</sup> /mol[Group Contribution method]	623			2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR		4C	×		USEPA.HENRYWIN v3.2.2008,USEPA OPPT Risk Assessment Division.	QSAR Key Henry's Law constant.001
6		654								○	p-キシレンの値を採用		

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

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
------	----	---	------	------------	----	-------	-----	-------------	--------------------------	------	---------	----	----	--------

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

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 ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等	
1 EPI Suite		1					60.03 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C) 1	60.03					(Q)SAR			×				
2								23.6								○	p-キシレンの値を採用			

参考情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

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 NITE初期リスク評価書		39%	O <sub>2</sub> consumption		化審法TG				experimental result			通商産業省.通商産業公報 (1975年8月27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) 1975	p.7
	2	100%	DOC removal		化審法TG				experimental result			通商産業省.通商産業公報 (1975年8月27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) 1975	p.7
	3	100%	Test mat. analysis		化審法TG				experimental result			通商産業省.通商産業公報 (1975年8月27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) 1975	p.7
4 REACH登録情報	5	68%	その他,% ThOD		OECD TG 301F	yes	1: reliable without restriction	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			1995,1995.8.2.	Read across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.004
	6	87.80%	その他,% ThOD		OECD TG 301F	yes	1: reliable without restriction	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			1995,1995.8.2.	Read across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.004
	7	100%	その他,BOD		OECD TG 301C	yes	4: not assignable	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			MITI.Biodegradation and Bioconcentration of Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law.2001,National Institute of Technology and Evaluation.	Read across Subs Supporting Biodegradation in water: screening tests.007
	8	100%	その他,GC analysis		OECD TG 301C	yes	4: not assignable	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			MITI.Biodegradation and Bioconcentration of Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law.2001,National Institute of Technology and Evaluation.	Read across Subs Supporting Biodegradation in water: screening tests.007
	9	14.85%	その他,%ThOD		OECD TG 301F	yes	2: reliable with restrictions	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			1996,1996.3.5.	Read across Subs Supporting Biodegradation in water: screening tests.009
	10	63.90%	その他,%ThOD		OECD TG 301F	yes	2: reliable with restrictions	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			1996,1996.3.5.	Read across Subs Supporting Biodegradation in water: screening tests.009

参考情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	キシレン
CAS番号	1330-20-7

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
10		69.67%	その他,%ThOD		OECD TG 301F	yes	2: reliable with restrictions	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			1996,1996.3.5.	Read across Subs Supporting Biodegradation in water: screening tests.009
11		38%	その他,BOD		OECD TG 301C	yes	4: not assignable	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			MITI.Biodegradation and Bioconcentration of Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law.2001,National Institute of Technology and Evaluation.	Read across Subs Supporting Biodegradation in water: screening tests.010
12		92%	その他,GC analysis		OECD TG 301C	yes	4: not assignable	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			MITI.Biodegradation and Bioconcentration of Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law.2001,National Institute of Technology and Evaluation.	Read across Subs Supporting Biodegradation in water: screening tests.010
13		81~126 % [Ethylbenzene was observed to biodegrade by 81-126 % over two weeks based on BOD.]	O_2 consumption		OECD TG 302C	no data	2: reliable with restrictions	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			1992	Read across Subs Supporting Biodegradation in water: screening tests.011
14	既存点検事業	39%	O_2 consumption		化審法TG				experimental result				
15		100%	Test mat. analysis		化審法TG				experimental result				
16		100%	TOC removal		化審法TG				experimental result				
17		39%	O_2 consumption		化審法TG				experimental result				
18		100%	Test mat. analysis		化審法TG				experimental result				
19		100%	TOC removal		化審法TG				experimental result				

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
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
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUCLID	IUCLID
IUPAC	The IUPAC Solubility Data Series
Mackay	OASIS Catalogic
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」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
REACH登録情報	REACH登録情報
SIDS	OECD: SIDSレポート

基本情報

優先通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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III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	-26~-23 °C	-24.5							2B	×			p.2612
2 ATSDR	融点	-25.2 °C	-25.2							2B	○		Lide 2005	p.187
3 CRC	融点	-25.16± 0.02 °C	-25.16							2B	×			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
4 CRC	融点	-25.2 °C	-25.2							2B	○			24 Enthalpy of Fusion (Section 6) etc.
5 EHC	融点	-25.2 °C	-25.2							2B	○			2.2 Physical and chemical properties
6 EPI Suite	融点	-40.69 °C	-40.69	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
7 HSDB	融点	-25.2 °C	-25.2							2B	○		Lide, D.R. CRC Handbook of Chemistry and Physics 88TH Edition 2007-2008. CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, FL 2007, p. 3-520	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
8 IUCLID	融点	-25 °C	-25		no data					4A	×			p.21
9 Mackay	融点	-25.2 °C	-25.2							2B	○		(Weast 1982-83; Lide 2003)	p.450
10 Merck	融点	-25 °C	-25							2B	×			
11 MOE初期評価	融点	-25.2 °C	-25.2							2B	○			p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
12	融点	-25 °C	-25							2B	×			p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
13	融点	-25 °C	-25							2B	×			p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
14	融点	-25.182 °C	-25.182							2B	×			p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
15 NITE初期リスク評価書	融点	-25 °C[o-体]	-25							2B	×		Merck.The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.,2001.	p.2
16 PhysProp	融点	-25.2 °C	-25.2							2B	○			
17 REACH登録情報	融点	-25.2 °C[Sublimation: no]	-25.2		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	○		Lide D (editor in chief).CRC Press, Boca Raton.2008,Handbook of chemistry and physics. 89th edition.	Exp Key Melting point/freezing point.001
18 SIDS	融点	-25.2 °C	-25.2				key study			2A	○			p.3

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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IIIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	143~145 °C	144									4A	×			p.2612
2 ATSDR	144.5 °C	144.5									4A	○		Slide 2005	p.187
3 CCD	144 °C	144									4A	○			
4 CRC	144.4±0.4 °C	144.4	144.4	760 mmHg							2B	○			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
5 CRC	417.6±0.4 K	144.45	144.45	101.325 kPa							2B	○		Christou, G..Ph.D. Dissertation, Univ. Melbourne.1988. Ambrose, D..J. Chem. Thermodyn..1987,19, 1007. Kay, W. B., and Hissong, D. W..Proc. - Am. Pet. Inst., Div. Refin..1967,47, 653. Ambrose, D., Broderick, B. E., and Townsend, R..J. Chem. Soc..1967,A 633. Simon, M..Bull. Soc. Chim. Belg..1957,66, 375. Akhundov, T. S., and Imanov, Sh. Yu..Teplofiz. Svoistva Zhidk. 1979, 49	18 Critical Constants of Organic Compounds (Section 6)
6 CRC	144.5 °C	144.5	144.5	760 mmHg							2B	○			23 Enthalpy of Vaporization (Section 6) etc.
7 EHC	144.4 °C	144.4	144.40939	101.3 kPa							2B	○			2.2 Physical and chemical properties
8 EPI Suite	148.29 °C	148.29			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
9 HSDB	144.5 °C	144.5									4A	○		Lide, D.R. CRC Handbook of Chemistry and Physics 88TH Edition 2007-2008.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
10 IUCLID	144.4 °C	144.4	144.40939	1013 hPa		no data					4A	○			p.21
11 Mackay	144.5 °C	144.5									4A	○		(Lide 2003)	p.450
12 Merck	144 °C	144									4A	○			
13 MOE初期評価	144.4 °C	144.4									4A	○		日本化学会編 (1996) 化学防災指針集成, 丸善	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
14 MOE初期評価	144.5 °C	144.5									4A	○		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
15 MOE初期評価	144 °C	144									4A	○		O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM). Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
16	144.429 °C	144.429									4A	×		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: 123.	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
17 NITE初期リスク評価書	144 °C[o-体]	144									4A	○		Merck.The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ..2001.	p.2
18 PhysProp	144.5 °C	144.5									4A	○			
19 REACH登録情報	144.5 °C	144.5	144.5094	1013 hPa		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	○		Lide D (editor in chief).Handbook of chemistry and physics, 89th edition.2008,CRC Press, Boca Raton.	Exp Key Boiling point.001
20 SIDS	144 °C	144						key study			4A	○			p.3

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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IIIにおけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	<0.1 atm	10132.5	9384.4752	21.1 °C							2B	×			p.2612
2	7 mmHg	933.25658	933.25658	20 °C							2B	×			p.2612
3	16 mmHg	2133.1579	663.29858	37.7 °C							4A	×			p.2612
4 ATSDR	6.61 mmHg	881.26086	624.72814	25 °C							2B	×	AICHE 1996		p.187
5 CRC	100 Pa	100	801.38328	-7 °C					外挿 (補外)		4C	×	Lide, D.R., and Kehiaian, H.V..CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL 1994.	20 Vapor Pressure (Section 6)	
6	1 kPa	1000	619.74788	27 °C					外挿 (補外)		4C	×	Lide, D.R., and Kehiaian, H.V..CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL 1994.	20 Vapor Pressure (Section 6)	
7	10 kPa	10000	407.16542	74.2 °C							4A	×	Lide, D.R., and Kehiaian, H.V..CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL 1994.	20 Vapor Pressure (Section 6)	
8	100 kPa	100000	225.47569	143.9 °C							4A	×	Lide, D.R., and Kehiaian, H.V..CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL 1994.	20 Vapor Pressure (Section 6)	
9	0.88 kPa	880	623.83431	25 °C							2B	×			33 Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
10 EHC	0.66 kPa	660	660	20 °C							2B	○			2.2 Physical and chemical properties
11 EPI Suite	692 Pa[2B以上の値を用いて推定(2C) 1]	692	490.56062	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
12 HSDB	6.61 mmHg	881.26086	624.72814	25 °C					外挿 (補外)		4C	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE:
13 IUCLID	0.67 hPa	67	67	20 °C	その他	no data			experimental result		4A	×			p.21
14	1.2 hPa	120	60.993438	30 °C	その他	no data			experimental result		4A	×			p.22
15	3.2 hPa	320	47.645767	50 °C	その他	no data			experimental result		4A	×			p.22
16 Mackay	146.7 Pa	146.7	627.80731	0.60 °C[measured range – 17 to 0.60 °C]	その他,mercury manometer				外挿 (補外)		4A	×	Linder 1931		p.450
17	108000 Pa	108000	220.05743	146.85 °C[measured range 146.85–346.85°C]	その他,ebulliometry				外挿 (補外)		4A	×	Ambrose et al. 1967		p.451
18	882 Pa	882	651	25 °C					外挿 (補外)	Antoine eq	4C	×	Zwolinski & Wilhoit 1971		p.451
19	882 Pa	882	651	25 °C					外挿 (補外)	Antoine eq	4C	×	Boublik et al. 1984		p.451
20 Mackay	885 Pa	885	653	25 °C					内挿 (補間)	Antoine eq	4C	○	Boublik et al. 1984		p.451
21	882 Pa	882	651	25 °C					外挿 (補外)	Antoine eq	4C	×	Dean 1985, 1992		p.451

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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IIIにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
22	Mackay	880 Pa	880	653	25 °C					内挿 (補 間)	Antoine eq	2B	○		Riddick et al. 1986	p.451
23	Mackay	885 Pa	885	675	25 °C					内挿 (補 間)	Antoine eq	4C	○		Stephenson & Malanowski 1987	p.451
24	Mackay	767 Pa	767	765	20 °C	その他,Hg manometer				内挿 (補 間)	Antoine eq	2B	○		Kassel 1936	p.450
25		987 Pa	987	501.67103	30 ° C[measure d range 10 -50°C]	その他,Hg manometer				experiment al result		2B	×		Rintelen et al. 1937	p.450
26	Mackay	880 Pa	880	654	25 °C	その他,Hg manometer measurements				内挿 (補 間)	Antoine eq	2B	○		Pitzer & Scott 1943	p.451
27		6354 Pa	6354	651	63.460 ° C[measure d range 63.460- 145.367°C]	その 他,ebulliometry				外挿 (補 外)	Antoine eq	4A	×		Willingham et al. 1945	p.451
28		6401 Pa	6401	651	63.608 ° C[measure d range 63.608- 145.400°C]	その 他,ebulliometry				外挿 (補 外)	Antoine eq	4A	×		Forziati et al. 1949	p.451
29		266.6 Pa[summar y of literature data]	266.6	262.89711	20.2 °C							2B	×		Stull 1947	p.451
30		892 Pa	892	651	25 °C					外挿 (補 外)	Antoine eq	4C	×		Dreisbach 1955	p.451
31		1333 Pa[compile d data]	1333	589.00436	32.155 ° C[temp range 32.155- 172.095°C]					外挿 (補 外)		4A	×		Bond & Thodos 1960	p.451
32	Mackay			664						内挿 (補 間)	Antoine eq		○		Stuckey&Saylor1940	
33	Mackay			651						内挿 (補 間)	Antoine eq		○		Zwolinski&Wilhoit1971	
34	Mackay			654						内挿 (補 間)	Antoine eq		○		Yaws1994	
35	MOE初期評 価	0.80 kPa[0.80 kPa (6 mmHg)]	800	800	20 °C							2B	○		Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd. Ed. (1996) Van Nostrand Reinhold Co.	p.1、 1. 物質に関する 基本的事項(2) 物理化学 的性状
36		1.47 kPa[1.47 kPa (11 mmHg)]	1470	747.16962	30 °C							2B	×		Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd. Ed. (1996) Van Nostrand Reinhold Co.	p.1、 1. 物質に関する 基本的事項(2) 物理化学 的性状
37		880 Pa[6.6 mmHg (=880 Pa)]	880	623.83431	25 °C							2B	×		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM)	p.1、 1. 物質に関する 基本的事項(2) 物理化学 的性状

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
38	880 Pa[6.61 mmHg (=880 Pa)]	880	623.83431	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: 123	p.1-2、 1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
39 MOE初期評価	670 Pa[5 mmHg (=670 Pa)]	670	670	20 °C							2B	○		Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM)	p.2、 1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
40 NITE初期リスクリスク評価書	0.7 kPa[0.7 mmHg]	700	700	20 °C							2B	○		IPCS, International Programme on Chemical Safety. ICSC, International Chemical Safety Programme on Chemical Safety (2002) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva ( <a href="http://www.ilo.org/public/english/protction/safework/cis/products/icsc/dtas.html">http://www.ilo.org/public/english/protction/safework/cis/products/icsc/dtas.html</a> )	p.2
41 PhysProp	6.61 mmHg	881.26086	624.72814	25 °C					experimental result		2B	×		DAUBERT, TE & DANNER, RP. 1987.	
42 REACH登録情報	0.194 psi[lowest temperature reported in handbook as a cut off of 0.2 PSI was used]	1337.5834	589.31637	32.2 °C[90 °F]		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		Zwolinski and Wilhoit. Handbook of vapour pressures and heats of vapourisation of hydrocarbons and related compounds. 1971, Thermodynamics Research Centre, Texas A&M University, Texas.	Exp Key Vapour pressure.001
43 SIDS	665 Pa	665	665	20 °C				key study			2A	○			p.3

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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IIIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	178 mg/L	178	166.164146	25 °C								2B	○		Sanemasa 1982	p.187
2 CCD	[insoluble in water]	単位換算不可										3	×			
3 CRC	[insoluble]	単位換算不可										3	×			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
4	0.171 g/kg	171	159.629601	25 °C								2B	×		Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C.J. Phys. Chem. Ref. Data.2000,29, 41.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
5	0.21 g/kg	210	152.124275	45 °C								4A	×		Solubility Data Series, International Union of Pure and Applied Chemistry, Vol. 38, Pergamon Press, Oxford.1988.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
6 EHC	142 mg/L	142										4A	×			2.2 Physical and chemical properties
7 EPI Suite	245.7 mg/L[2B以上の値を用いて推定(2C)1]	245.7	229.362532	25 °C		WSKOWWIN					(Q)SAR	2C	×			
8 HSDB	1.78E+2 mg/L	178	166.164146	25 °C								2B	○		Sanemasa 1982	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
9 IUCLID	142 mg/L	142	191.760477	0 °C		その他	no data					4A	×			p.22
10	167 mg/L	167	179.323087	15 °C		その他	no data					4A	×			p.22
11	1.8 g/L	1800	1800	20 °C			no data					4A	×			p.22
12	175 mg/L	175	175	20 °C		その他	no data					4A	×			p.23
13	129.6 mg/L	129.6	120.982434	25 °C		その他	no data					4A	×			p.23
14	178 mg/L	178	166.164146	25 °C		その他	no data					4A	×			p.23
15	196 mg/L	196	160.515604	35 °C		その他	no data					4A	×			p.23
16 IUPAC	0.0175 g(1)/100g sln	175	163.695694	298 K								2B	×		McAuliffe, C., Nature (London) 1963, 200, 1092-3.	Table 2. Recommended (R) and Tentative Solubility Values of o-Xylene (1) in Water (2)
17	0.01705 g(1)/100g sln	170.5	159.486376	298 K								2B	×		Sutton, C.; Calder, J.A., Environ. Sci. Technol. 1974, 8, 654-7.	Table 2. Recommended (R) and Tentative Solubility Values of o-Xylene (1) in Water (2)
18	0.0167 g(1)/100g sln	167	156.212462	298 K								2B	×		Price, L.C., Am. Assoc. Petrol. Geol. Bull. 1976, 60, 213-44.	Table 2. Recommended (R) and Tentative Solubility Values of o-Xylene (1) in Water (2)
19 IUPAC	0.0179 g(1)/100g sln	179	167.43731	298 K								2B	○		Sanemasa et al. 1982	Table 2. Recommended (R) and Tentative Solubility Values of o-Xylene (1) in Water (2)
20 Mackay	204 mg/L	204	190.435313	25 °C		その他,shake flask-UV				experimental result		2B	×		Andrews & Keefer 1949	p.450
21 Mackay	179 mg/L	179	167.097652	25 °C[measured range 15-45°C]		その他,vapor saturation-UV spec				experimental result		2B	○		Sanemasa et al. 1982	p.450
22	221 mg/L	221	206.304923	25 °C		その他,generator column-HPLC/UV				experimental result		2B	×		Tewari et al. 1982c	p.450
23	221 mg/L	221	206.304923	25 °C		その他,generator column-HPLC/UV				experimental result		2B	×		Wasik et al. 1983	p.450

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
24	176 mg/L	176	164.297133	25 °C		その他,shake flask-purge and trap-GC				experiment al result		2B	×		Coutant & Keigley 1988	p.450
25	173 mg/L[IUPAC recommended value]	173	161.496614	25 ° C[temp range 0- 45°C]								2B	×		Shaw 1989b	p.450
26	175 mg/L	175	163.363627	25 °C		その他,shake flask-GC				experiment al result		2B	×		McAuliffe 1963	p.450
27	175 mg/L	175	163.363627	25 °C		その他,shake flask-GC				experiment al result		2B	×		McAuliffe 1966	p.450
28	176 mg/L	176	164.297133	25 °C		その他,shake flask-GC				experiment al result		2B	×		Hermann 1972	p.450
29	213 mg/L	213	198.836871	25 °C		その他,shake flask-GC				experiment al result		2B	×		Polak & Lu 1973	p.450
30	170.5 mg/L	170.5	159.162848	25 °C		その他,shake flask-GC				experiment al result		2B	×		Sutton & Calder 1975	p.450
31	167 mg/L	167	155.895575	25 °C		その他,shake flask-GC				experiment al result		2B	×		Price 1976	p.450
32	167 mg/L	167	155.895575	25 °C		その他,shake flask-GC				experiment al result		2B	×		Krzyzanowska & Szeliga 1978	p.450
33	240 mg/L	240	240	20 °C		その他,shake flask-UV				experiment al result		2B	×		Ben-Naim & Wiff 1979	p.450
34	Merck [Insol in water]	単位換算不 可										3	×			
35	MOE初期評 価	146 mg/L	146	136.29194	25 °C							2B	×			p.1、1. 物質に関する基本的 事項(2) 物理化学的性状
36		171 mg/1000g	171	159.629601	25 °C							3	×		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis (CD-ROM)	p.2、1. 物質に関する基本的 事項(2) 物理化学的性状
37		178 mg/L	178	166.164146	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: 123	p.2、1. 物質に関する基本的 事項(2) 物理化学的性状
38		175 mg/L	175	175	20 °C							2B	×		Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM)	p.2、1. 物質に関する基本的 事項(2) 物理化学的性状
39	NITE初期リ スク評価書	178 mg/L[o-体]	178	166.164146	25 °C							2B	○	PhysPropからの引用	SRC, Syracuse Research Corporation.PhysProp Database, North Syracuse, NY. (http://esc.syrres.com./interkow/phys demo.htm から引用) 2002	p.3
40	PhysProp	178 mg/L	178	166.164146	25 °C					experiment al result		2B	○		SANEMASA, I ET AL., 1982.	
41	REACH登録 情報	170.5 mg/L[moderate ly soluble (100- 1000 mg/L)]	170.5	159.162848	25 °C	7		no data	2: reliable with restrictions	key study experiment al result		4A	×		Yalkowsky SH and He Y. Aqueous solubility data.2003,CRC Press, Boca Raton.	Exp Key Water solubility.001
42	SIDS	178 mg/L	178	166.164146	25 °C					key study		2A	×			p.3

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1	ATSDR	3.12	3.12									2B	○		Hansch 1995	p.187
2	CRC	3.12	3.12	25 °C								2B	○		Sangster, J..J. Phys. Chem. Ref. Data.1989,18, 1111.	38 Octanol-Water Partition Coefficients (Section 16)
3	EHC	3.12	3.12									2B	○			2.2 Physical and chemical properties
4	EPI Suite	3.09	3.09			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
5	HSDB	3.12	3.12									2B	○		Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR -Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995., p. 43	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT:
6	IUCLID	3.12	3.12			その他,slow-stirring method according to De Bruijn, J. et al., Environ. Toxicol. Chem. 8, 499-512 (1989)	no data			experimental result		4A	○			p.22
7		3.13	3.13	25 °C		その他,generator column, HPLC analysis	no data			experimental result		4A	×			p.22
8	Mackay	3.15	3.15	25 °C		その他,π substituent constant				estimated by calculation		4C	×		Hansch et al. 1968	p.452
9		3.16	3.16	25 °C		その他,MCI χ				estimated by calculation		4C	×		Doucette & Andren 1988	p.452
10		3.42	3.42	25 °C		その他,TSA				estimated by calculation		4C	×		Doucette & Andren 1988	p.452
11		3.25	3.25	25 °C		その他,RP-HPLC-k' capacity factor correlations				estimated by calculation		4C	×		Sherblom & Eganhouse 1988	p.452
12		3.35	3.35	25 °C		その他,RP-HPLC-k' capacity factor correlations				estimated by calculation		4C	×		Sherblom & Eganhouse 1988	p.452
13		3.12[recom mended]	3.12	25 °C								2B	×		Sangster 1989	p.452
14		3.18	3.18	25 °C		その他,normal phase HPLC-k' correlation				estimated by calculation		4C	×		Govers & Evers 1992	p.452
15	Mackay	3.12[recom mended]	3.12	25 °C								2B	○		Hansch et al. 1995	p.452
16		2.73	2.73	25 °C		その他,shake flask-LSC				experimental result		2B	×		Banerjee et al. 1980	p.452
17		3.19	3.19	25 °C		その他,HPLC-k' correlation				estimated by calculation		4C	×		Hammers et al. 1982	p.452
18		3.13	3.13	25 °C		その他,generator column-HPLC/UV				experimental result		2B	×		Tewari et al. 1982b,c	p.452

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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IIIにおけ るキースタ デー	備考	文献	ページ番号等
19		3.13	3.13	25 °C		その他,generator column-HPLC/UV				experimental result		2B	×		Wasik et al. 1983	p.452
20		3.13[quote d exp]tll	3.13	25 °C						experimental result		2B	×		Doucette & Andren 1988	p.452
21		3.14	3.14	25 °C		その他,π const				estimated by calculation		4C	×		Doucette & Andren 1988	p.452
22		3.14	3.14	25 °C		その他,f const				estimated by calculation		4C	×		Doucette & Andren 1988	p.452
23		3.06	3.06	25 °C		その他,MW				estimated by calculation		4C	×		Doucette & Andren 1988	p.452
24	MOE初期評 価	3.12	3.12							experimental result		3	○		分配係数計算用プログラム,"C Log P", アダム ネット(株)	p.1、 1. 物質に関する基本的 事項(2) 物理化学的性状
25	MOE初期評 価	3.12	3.12									2B	○		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD- ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM). 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: 123. Hansch, C. et al. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book: 43.	p.2、 1. 物質に関する基本的 事項(2) 物理化学的性状
26		2.77	2.77									2B	×		Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).	p.2、 1. 物質に関する基本的 事項(2) 物理化学的性状
27	NITE初期リ スク評価書	3.12[o-体]	3.12							experimental result		2B	○		SRC, Syracuse Research Corporation.KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY..2003.	p.2
28	PhysProp	3.12	3.12							experimental result		2B	○		HANSCH,C ET AL..1995.	
29	REACH登録 情報	3.12	3.12	20 °C	7		no data	2: reliable with restriction s	key study	experimental result		4A	○		Hansch, Leo and Hoekman.Exploring QSAR, hydrophobic, electronic and steric constants.1995,American Chemical Society, Washington DC.	Exp Key Partition coefficient.001
30	SIDS	3.12	3.12						key study			2A	○			p.3

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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IIIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	logKoc	2.11	128.8249552										2B	×			p.187
2 EHC	Koc	219	219										2B	×		Pussemier et al., 1990	4.1.3 Adsorption
3 EPI Suite	Koc	509.9 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定 (2C) 1	509.9				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×			
4 HSDB	Koc	24~251	137.5										2B	×			ENVIRONMENTAL FATE:
5 IUCLID	Koc	221	221				その他,calculated from sediment -water partition coefficient				estimated by calculation		4C	×			p.46
6	Koc	537	537				その他,HPCL						4A	×			p.47
7	Koc	234	234			sandy loam (70% sand, 12% silt, 18% clay; 0.62% o.c.)	その他,GC- analysis						4A	×			p.47
8	Koc	234	234			sandy loam (70% sand, 12% silt, 18% clay; 0.62% o.c.)	その他,GC- analysis						4A	×			p.47
9	Koc	155	155								estimated by calculation		4C	×			p.48
10 Mackay	logKoc	1.68~1.83	56.88529308										2B	×		Nathwani & Philip 1977	p.452
11	logKoc	2.45	281.8382931				その他,RP- HPLC-k' correlation including MCI related to non- dispersive intermolecular interactions				estimated by calculation		4C	×		Hong et al. 1996	p.452
12	logKoc	2.45	281.8382931				その他,hydrogen- bonding indicator variable				estimated by calculation		4C	×		Hong et al. 1996	p.452
13	logKoc	2.4	251.1886432	2.3		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%	その他,EPICS- GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.452

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
14	logKoc	2.7	501.1872336	3.8		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.452
15	logKoc	2.58	380.1893963	6.2		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.452
16	logKoc	2.68	478.6300923	8		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.452
17	logKoc	2.73	537.0317964	13.5		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.452
18	logKoc	2.69	489.7788194	18.6		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.452
19	logKoc	2.68	478.6300923	25		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.452
20	logKoc	2.35	223.8721139			sediment 4.02% OC from Tamar estuary	その他,batch equilibrium-GC				experimental result		2B	×		Vowles & Mantoura 1987	p.452
21	logKoc	2.73	537.0317964				その他,HPLC-k' correlation, cyanopropyl column				その他(推定値)	HPLC-k' correlation, cyanopropyl column	2B	×		Hodson & Williams 1988	p.452

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
22	logKoc	2.37	234.4228815				その他,RP-HPLC-k' correlation, humic acid-silica column				その他(推定値)	RP-HPLC-k' correlation, humic acid-silica column	2B	×		Szabo et al. 1990a,b	p.452
23	logKoc	2.4	251.1886432				その他,RP-HPLC-k' correlation, humic acid-silica column				その他(推定値)	RP-HPLC-k' correlation, humic acid-silica column	2B	×		Szabo et al. 1990a,b	p.452
24	logKoc	3.13	1348.962883			average of 5 soils	その他,sorption isotherms by batch equilibrium method				experimental result		2B	×		Xing et al. 1994	p.452
25	logKoc	2.36	229.0867653				その他,RP-HPLC-k' correlation on 3 different stationary phases				estimated by calculation		4C	×		Szabo et al. 1995	p.452
26	logKoc	2.65	446.6835922				その他,RP-HPLC-k' correlation on 3 different stationary phases				estimated by calculation		4C	×		Szabo et al. 1995	p.452
27	logKoc	2.65	446.6835922				その他,RP-HPLC-k' correlation on 3 different stationary phases				estimated by calculation		4C	×		Szabo et al. 1995	p.452
28	MOE初期評価	Koc	75[24 ~251の幾何平均値]	75									2B	×			p.3、1. 物質に関する基本的事項(3) 環境運命に関する基礎的事項
29	NITE初期リスク評価書	Koc	39~2600 無次元	1319.5							experimental result		2B	×		SRC, Syracuse Research Corporation.PcKocWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY, 2003.	p.3
30	REACH登録情報	Koc	537	537		soil	OECD TG 121	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	○		Hodson J and Williams NA.The estimation of the adsorption coefficient (Koc) for soils by high performance liquid chromatography. 1988,Chemosphere 17, 67-77	Exp Key Adsorption / desorption.001

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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 <sup>3</sup> /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	0.00518 atm·m <sup>3</sup> /mol	524.8635							2B	×		Sanemasa 1982	p.187
2 CRC	0.551 kPa m <sup>3</sup> /mol	551							2B	×		Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C.J. Phys. Chem. Ref. Data.2000,29, 41.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
3 EPI Suite	397 Pa·m <sup>3</sup> /mol	397					(Q)SAR		2C	×			
4 HSDB	5.18E-3 atm·m <sup>3</sup> /mol	524.8635							2B	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: p.48
5 IUCLID	536 Pa·m <sup>3</sup> /mol	536					estimated by calculation		4C	×			
6 Mackay	542 Pa·m <sup>3</sup> /mol	542					estimated by calculation		4C	×		Hine & Mookerjee 1975	p.451
7	485 Pa·m <sup>3</sup> /mol	485					その他(測定値)		2B	×		Li et al. 1993	p.452
8	506 Pa·m <sup>3</sup> /mol	506	25				experimental result		2B	×		Robbins et al. 1993	p.452
9	372 Pa·m <sup>3</sup> /mol	372					experimental result		2B	×		Zhang & Pawliszyn 1993	p.452
10	429 Pa·m <sup>3</sup> /mol	429	25				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1995	p.452
11	189 Pa·m <sup>3</sup> /mol	189	6						2B	×		Dewulf et al. 1995	p.452
12	496 Pa·m <sup>3</sup> /mol	496	25						2B	×		Dewulf et al. 1995	p.452
13	412 Pa· m <sup>3</sup> /mol[selected from literature experimentally measured data]	412	20				experimental result		2B	×		Staudinger & Roberts 1996	p.452
14	731 Pa·m <sup>3</sup> /mol	731					experimental result		2B	×		Turner et al. 1996	p.452
15	464.4 Pa·m <sup>3</sup> /mol	464.4					その他(測定値)		2B	×		Dohnal & Hovorka 1999	p.452
16	390 Pa· m <sup>3</sup> /mol[selected from literature experimentally measured data]	390	20				experimental result		2B	×	複数の文献から平均値を算出しているた め除外。	Staudinger & Roberts 2001	p.452
17	506 Pa·m <sup>3</sup> /mol	506					estimated by calculation		4C	×		Hine & Mookerjee 1975	p.451
18	647 Pa·m <sup>3</sup> /mol	647					その他(測定値)		2B	×		Leighton & Calo 1981	p.451
19	526 Pa·m <sup>3</sup> /mol	526					その他(測定値)		2B	×		Sanemasa et al. 1982	p.451
20 Mackay	594 Pa·m <sup>3</sup> /mol	594	20				experimental result		2B	○		Yurteri et al. 1987	p.451
21 Mackay	493 Pa·m <sup>3</sup> /mol	480	20				experimental result		2B	○		Ashworth et al. 1988	p.451
22	424 Pa·m <sup>3</sup> /mol	424					estimated by calculation		4C	×		Yaws et al. 1991	p.451
23	592 Pa·m <sup>3</sup> /mol	592					その他(推定値)		2B	×		Anderson 1992	p.451
24	1067 Pa·m <sup>3</sup> /mol	1067	40				experimental result		2B	×		Kolb et al. 1992	p.451
25 NITE初期リス ク評価書	524 Pa·m <sup>3</sup> /mol[524 Pa·m <sup>3</sup> /mol (5.18×10- 3 atm·m <sup>3</sup> /mol)]o-体]	524					experimental result		2B	×		SRC, Syracuse Research Corporation.PhysProp Database, North Syracuse, NY. (http://esc.syrres.com./interkow/p hvsdemo.htm から引用) 2002	p.3
26 PhysProp	0.00518 atm·m <sup>3</sup> /mol	524.8635					experimental result		2B	×		SANEMASA, I ET AL..1982.	

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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
------	----	---	------	------------	----	-------	-----	-------------	--------------------------	------	---------	----	----	--------

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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 ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1			BCF		53.16 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C) 1	53.16	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	×			
2 EHC		1			BCF		21.4L/kg	21.4						eel ( <i>Anguilla japonica</i> )		○		Ogata M & Miyake Y (1979) Disappearance of aromatic hydrocarbons and organic sulphur compounds from fish reared in crude oil suspensions. Water Res. 13: 75-78.	
3 EHC		1			BCF		14.1L/kg	14.1						goldfish		×		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.	

参考情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	o-キシレン
CAS番号	95-47-6

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 REACH登録情報		14.85%	その他,%ThOD		OECD TG 301F	yes	2: reliable with restrictions	key study	experimental result			1996,1996.3.5.	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
2		63.90%	その他,%ThOD		OECD TG 301F	yes	2: reliable with restrictions	key study	experimental result			1996,1996.3.5.	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
3		69.67%	その他,%ThOD		OECD TG 301F	yes	2: reliable with restrictions	key study	experimental result			1996,1996.3.5.	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001

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
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
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUCLID	IUCLID
IUPAC	The IUPAC Solubility Data Series
Mackay	OASIS Catalogic
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」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
REACH登録情報	REACH登録情報
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

基本情報

優先通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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III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	-48 °C	-48							2B	×			p.2612
2 ATSDR	融点	-47.8 °C	-47.8							2B	○			p.187
3 CRC	融点	-47.85± 0.03 °C	-47.85							2B	×			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
4 CRC	融点	-47.8 °C	-47.8							2B	○			24 Enthalpy of Fusion (Section 6) etc.
5 EHC	融点	-47.9 °C	-47.9							2B	○			2.2 Physical and chemical properties
6 EPI Suite	融点	-40.69 °C	-40.69	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
7 HSDB	融点	-47.4 °C	-47.4							2B	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
8 IUCLID	融点	-47.9 °C	-47.9		no data					4A	○			p.6
9	融点	-47.4 °C	-47.4							4A	×			p.6
10 Mackay	融点	-47.8 °C	-47.8							2B	○		(Lide 2003)	p.459
11 Merck	融点	-47.4 °C	-47.4							2B	×			
12 MOE初期評価	融点	-47.8 °C	-47.8							2B	○		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM)	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
13	融点	-47.4 °C	-47.4							2B	×		O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM).	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
14	融点	-47.872 °C	-47.872							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: 186	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
15	融点	-48 °C	-48							2B	×		Verschuieren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM)	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
16	融点	-53 °C	-53							2B	×		Verschuieren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM)	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
17 NITE初期リスク評価書	融点	-47.4 °C[m-体]	-47.4							2B	×		Merck.The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ..2001.	p.2
18 PhysProp	融点	-47.8 °C	-47.8							2B	○			

基本情報

優先通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
19	REACH登録 情報	融点	-47.9 ° C[Sublimat ion: no]	-47.9		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	○		Lide D (editor in chief).Handbook of Chemistry and Physics, 89th edition.2008.CRC Press. Boca Raton.	Exp Key Melting point/freezing point.001
20	SIDS	融点	-47.9 °C	-47.9				key study			2A	○			p.3
21	既存点検事 業	融点	-47.4 ° C[225.8K(- 47.4°C)]	-47.4							4A	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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IIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	138~139 °C	138.5									4A	×			p.2612
2 ATSDR	139.1 °C	139.1									4A	○		Lide 2005	p.187
3 CCD	138.8 °C	138.8									4A	×			
4 CRC	139.1±0.4 °C	139.1	139.1	760 mmHg							2B	○			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
5	412.3±0.4 K	139.15	412.3	101.325 kPa							2B	×		Christou, G..Ph.D. Dissertation, Univ. Melbourne.1988. Ambrose, D..J. Chem. Thermodyn..1987,19, 1007. Ambrose, D., Broderick, B. E., and Townsend, R..J. Chem. Soc..1967,A 633. Simon, M..Bull. Soc. Chim. Belg..1957,66, 375. Ambrose, D., and Grant, D. G..Trans. Faraday Soc..1957,53, 771. Glaser, F., and Ruland, H..Chem.-Ing.-Tech..1957,29, 772. Akhundov, T. S., and Asadullaeva, N. N..Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Neft	18 Critical Constants of Organic Compounds (Section 6)
6	139.07 °C	139.07	139.07	760 mmHg							2B	×			23 Enthalpy of Vaporization (Section 6)
7	139.12 °C	139.12	139.12	760 mmHg							2B	×			33 Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15) etc.
8 EHC	139.1 °C	139.1	139.1093	101.3 kPa							2B	○			2.2 Physical and chemical properties
9 EPI Suite	148.29 °C	148.29			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
10 HSDB	139.07 °C	139.07									4A	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT: p.6
11 IUCLID	139.1 °C	139.1	139.1093	1013 hPa		no data					4A	○			p.6
12	139.3 °C	139.3	139.7918	1000 hPa							4A	×			p.6
13 Mackay	139.12 °C	139.12									4A	×		(Lide 2003)	p.459
14 Merck	139.3 °C	139.3									4A	×			
15 MOE初期評価	139.12 °C	139.12									4A	×		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM)	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
16	139.3 °C	139.3									4A	×		O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM).	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
17	139 °C	139									4A	×		Verschuereen, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM)	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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IIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
18	NITE初期リ スク評価書	139.3 ° C[m-体]	139.3									4A	×		Merck.The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station.	p.2
19	PhysProp	139.1 °C	139.1									4A	○			
20	REACH登録 情報	139.1 °C	139.1	139.1093	1013 hPa		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	○		Lide D (editor in chief).Handbook of Chemistry and Physics, 89th edition,2008.CRC Press, Boca Raton.	Exp Key Boiling point.001
21	SIDS	139.1 °C	139.1						key study			4A	○			
22	既存点検事 業	138~139 ° C[411~ 412K(138 ~139°C)]	138.5									4A	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	16 mmHg	2133.1579	663.29858	37.7 °C							4A	×			p.2612
2 ATSDR	8.29 mmHg	1105.2424	783.50927	25 °C							2B	×			p.187
3 CRC	10 Pa	10	1141.8953	-35 °C					外挿 (補 外)		4C	×		Lide, D.R., and Kehiaian, H.V..CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL,1994.	20 Vapor Pressure (Section 6)
4	100 Pa	100	1036.8501	-10 °C					外挿 (補 外)		4C	×		Lide, D.R., and Kehiaian, H.V..CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL,1994.	20 Vapor Pressure (Section 6)
5	1 kPa	1000	790.40686	23.4 °C							2B	×		Lide, D.R., and Kehiaian, H.V..CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL,1994.	20 Vapor Pressure (Section 6)
6	10 kPa	10000	508.44308	69.8 °C							4A	×		Lide, D.R., and Kehiaian, H.V..CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL,1994.	20 Vapor Pressure (Section 6)
7	100 kPa	100000	270.50252	138.7 °C							4A	×		Lide, D.R., and Kehiaian, H.V..CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL,1994.	20 Vapor Pressure (Section 6)
8	1.13 kPa	1130	801.05997	25 °C							2B	×			33 Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
9 EHC	0.79 kPa	790	790	20 °C							2B	○			2.2 Physical and chemical properties
10 EPI Suite	883 Pa[2B 以上の値を 用いて推定 (2C) ]	883	625.96102	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
11 HSDB	8.29 mmHg	1105.2424	783.50927	25 °C					その他 (推 定値)	ATMOSPHERIC FATE:に "estimated vapor pressure"との記 載あり	4C	×			CHEMICAL/PHYSIC AL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE:
12 IUCLID	6.6 hPa	660	660	20 °C							4A	×			p.6
13	13.33 hPa	1333	757.73797	28.3 °C		no data					4A	×			p.6
14 Mackay	1812.7 Pa	1812.7	10226.135	-2.80 ° C[measure d range – 8.40 to – 2.80°C]	その他,mercury manometer				外挿 (補外)		4A	×		Linder 1931	p.459
15	1100 Pa	1100	821	25 °C					外挿 (補 外)	Antoine eq	4C	×		Zwolinski & Wilhoit 1971	p.460
16	1104 Pa	1104	819	25 °C					外挿 (補 外)	Antoine eq	4C	×		Boublik et al. 1984	p.460
17 Mackay	1142 Pa	1142	851	25 °C					内挿 (補 間)	Antoine eq	4C	○		Boublik et al. 1984	p.460
18	1106 Pa	1106	821	25 °C					外挿 (補 外)	Antoine eq	4C	×		Dean 1985, 1992	p.460
19 Mackay	1100 Pa[selected lit. value]	1100	824	25 °C					内挿 (補 間)	Antoine eq	2B	○		Riddick et al. 1986	p.460
20 Mackay	1110 Pa	1110	824	25 °C					内挿 (補 間)	Antoine eq	4C	○		Stephenson & Malanowski 1987	p.460
21 Mackay	833 Pa	833	833	20 °C	その他,Hg manometer				experimental result	Antoine eq	2B	○		Kassel 1936	p.459
22	1213 Pa	1213	616.542	30 ° C[measure d range 10 –50°C]	その他,Hg manometer				experimental result		2B	×		Rintelen et al. 1937	p.459
23 Mackay	1113 Pa	1113	833	25 ° C[measure d range 0– 60°C]	その他,Hg manometer				experimental result	Antoine eq	2B	○		Pitzer & Scott 1943	p.460

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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IIIにおけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
24	6355 Pa	6355	818	59.203 °C[measured range 59.203–140.041°C]	その他,ebulliometry				外挿(補外)	Antoine eq	4A	×		Willingham et al. 1945	p.460
25	266.6 Pa[summary of literature data]	266.6	334.34056	16.8 °C[temp range –6.9 to 139.1°C]							2B	×		Stull 1947	p.460
26	6400 Pa	6400	565.10518	59.335 °C[measured range 59.335–140.078°C]	その他,ebulliometry				外挿(補外)	Antoine eq	4A	×		Forziati et al. 1949	p.460
27	1115 Pa	1115	821	25 °C					外挿(補外)	Antoine eq	4C	×		Dreisbach 1955	p.460
28	124200 Pa	124200	253.06604	146.85 °C[measured range 146.85–316.85°C]	その他,ebulliometry				外挿(補外)		4A	×		Ambrose et al. 1967	p.460
29 Mackay			834						内挿(補間)	Antoine eq		○		Stuckey&Saylor1940	p.460
30 Mackay			812						内挿(補間)	Antoine eq		○		Weast1972–73	p.460
31 Mackay			839						内挿(補間)	Antoine eq		○		Yaws1994	p.460
32 MOE初期評価	1.13E+3 Pa[8.5 mmHg (=1.13 × 10 <sup>3</sup> Pa)]	1130	801.05997	25 °C							2B	×		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).	p.1
33	1.1E+3 Pa[8.29 mmHg (=1.1 × 10 <sup>3</sup> Pa)]	1100	779.79289	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: 186.	p.2
34 MOE初期評価	800 Pa[6 mmHg (=800 Pa)]	800	800	20 °C							2B	○		Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).	p.2
35 NITE初期リスク評価書	0.8 kPa[m-体]	800	800	20 °C							2B	○		IPCS, International Programme on Chemical Safety.ICSC, International Chemical Safety IPSC, International Programme on Chemical Safety (2002) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva ( <a href="http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtash/index.htm">http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtash/index.htm</a> から引用), 2002.	p.2
36 PhysProp	8.29 mmHg	1105.2424	783.50927	25 °C					experimental result		2B	×		CHAO,J ET AL..1983.	
37 REACH登録情報	0.207 psi	1427.2153	754.53152	29.4 °C[85 °F]		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		Zwolinski and Wilhoit.Handbook of vapour pressures and heats of vapourisation of hydrocarbons and related compounds.1971,Thermodynamics Research Centre, Texas A&M University, Texas.	Exp Key Vapour pressure.001
38 SIDS	798 Pa	798	798	20 °C				key study			2A	○			p.3

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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IIIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	161 mg/L	161	150.294536	25 °C								2B	×			p.187
2 CCD	[insoluble in water]	単位換算不可										3	×			
3 CRC	[insoluble]	単位換算不可										3	×			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
4	0.203 g/kg	203	274.136457	0 °C								4A	×		Solubility Data Series, International Union of Pure and Applied Chemistry, Vol. 38, Pergamon Press, Oxford, 1988.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
5	0.161 g/kg	161	150.294536	25 °C								2B	×		Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C.J. Phys. Chem. Ref. Data.2000,29, 41.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
6	0.22 g/kg	220	169.284625	40 °C								4A	×		Solubility Data Series, International Union of Pure and Applied Chemistry, Vol. 38, Pergamon Press, Oxford, 1988.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
7 EHC	146 mg/L	146										4A	×			2.2 Physical and chemical properties
8 EPI Suite	205.9 mg/L[2B以上の値を用いて推定(2C) 1]	205.9	192.208976	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
9 HSDB	1.61E+2 mg/L	161	150.294536	25 °C								2B	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
10 IUCLID	146 ppm vol.	単位換算不可		25 °C			no data					3	×			p.7
11	[INSOLUBLE]	単位換算不可										3	×			p.7
12 IUPAC	0.0195 g(1)/100g sln	195	195.410029	293 K						内挿(補間)		4C	×	複数の実験データから回帰式を求めて曲線から溶解度を求めているため除外。		Table 2. Recommended (R) and Tentative Values of the Solubility of m-Xylene (1) in Water (2)
13	0.016 g(1)/100g sln	160	160.336434	293 K								2B	×	複数の実験データから回帰式を求めて曲線から溶解度を求めているため除外。		Table 2. Recommended (R) and Tentative Values of the Solubility of m-Xylene (1) in Water (2)
14	0.016 g(1)/100g sln	160	160.336434	293 K						内挿(補間)		4C	×	複数の実験データから回帰式を求めて曲線から溶解度を求めているため除外。		Table 2. Recommended (R) and Tentative Values of the Solubility of m-Xylene (1) in Water (2)
15 Mackay	173 mg/L	173	161.496614	25 °C		その他,shake flask-UV				experimental result		2B	×		Andrews & Keefer 1949	p.459
16	162 mg/L	162	151.228043	25 °C[measured range 15-45°C]		その他,vapor saturation-UV spec				experimental result		2B	×		Sanemasa et al. 1982	p.459
17	159 mg/L	159	148.427524	25 °C		その他,generator column-HPLC/UV				experimental result		2B	×		Tewari et al. 1982c	p.459
18	160 mg/L	160	149.36103	25 °C		その他,generator column-HPLC/UV				experimental result		2B	×		Wasik et al. 1983	p.459
19	170 mg/L[IUPAC recommended value]	170	170	20 °C[temp range 0-70°C]						calculation		2B	×	複数の実験データから回帰式を求めて曲線から溶解度を求めているため除外。	Shaw 1989b	p.459

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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IIIにおけるキースタディー	備考	文献	ページ番号等
20	196 mg/L	196	193.285049	21 °C [measured range 0.4-39.6°C]		その他,shake flask-UV				experimental result		2B	×		Bohon & Claussen 1951	p.459
21	157 mg/L	157	146.560511	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×		Hermann 1972	p.459
22	162 mg/L	162	151.228043	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×		Polak & Lu 1973	p.459
23	206 mg/L	206	192.302326	25 °C		その他,shake flask-UV				experimental result		2B	×		Vesala 1974	p.459
24	146 mg/L	146	136.29194	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×		Sutton & Calder 1975	p.459
25 Mackay	160 mg/L	160	160	20 °C [measured range 20-70°C]		その他,synthetic method-GC				experimental result		2B	○		Chernoglazova & Simulin 1976	p.459
26	134 mg/L	134	125.089863	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×		Price 1976	p.459
27	134 mg/L	134	125.089863	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×		Krzyzanowska & Szeliga 1978	p.459
28 Merck	[Insol in water]	単位換算不可										3	×			
29 MOE初期評価	161 mg/1000g	161	150.294536	25 °C								3	×		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).	p.2
30	161 mg/L	161	150.294536	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: 186.	p.2
31 NITE初期リスク評価書	161 mg/L[m-体]	161	150.294536	25 °C								2B	×		SRC, Syracuse Research Corporation.PhysProp Database, North Syracuse, NY. (http://esc.syrres.com./interkow/physd emo.htm から引用) 2002	p.3
32 PhysProp	161 mg/L	161	150.294536	25 °C						experimental result		2B	×		SANEMASA, I ET AL.: 1982.	
33 REACH登録情報	146 mg/L [moderately soluble (100-1000 mg/L)]	146	136.29194	25 °C	7 [data not reported. pH not stated so assumed standard]		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		Yalkowsky, S.H. and He, Y..Handbook of aqueous solubility data..2003,CRC Press.	Exp Key Water solubility.001
34 SIDS	161 mg/L	161	150.294536	25 °C					key study			2A	×			p.3
35 既存点検事業	160 mg/L	160	149.36103	25±1 °C		OECD TG 105				experimental result		1B	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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IIIにおけ るキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1	ATSDR	3.2	3.2									2B	○		Hansch et al. 1995	p.187
2	CRC	3.2	3.2	25 °C								2B	○		Sangster, J..J. Phys. Chem. Ref. Data.1989,18, 1111.	38 Octanol-Water Partition Coefficients (Section 16)
3	EHC	3.2	3.2									2B	○			2.2 Physical and chemical properties
4	EPI Suite	3.09	3.09			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
5	HSDB	3.2	3.2									2B	○		Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society. 1995. p. 43	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT: p.7
6	IUCLID	3.2	3.2	25 °C			no data					4A	○			
7	Mackay	3.2	3.2	25 °C								2B	×		Hansch et al. 1968; Leo et al. 1971; Hansch & Leo 1979; Hansch & Leo 1985	p.461
8	Mackay	3.20[recommended]	3.2	25 °C								2B	○		Sangster 1989, 1993	p.461
9		3.31	3.31	25 °C		その他,normal phase HPLC-k' correlation				estimated by calculation		4C	×		Govers & Evers 1992	p.461
10	Mackay	3.20[recommended]	3.2	25 °C								2B	○		Hansch et al. 1995	p.461
11		3.18	3.18	25 °C		その他,generator column-HPLC/UV				experimental result		2B	×		Wasik et al. 1981	p.461
12		3.29	3.29	25 °C		その他,HPLC-k' correlation				estimated by calculation		4C	×		Hammers et al. 1982	p.461
13		3.13	3.13	25 °C		その他,generator column-HPLC/UV				experimental result		2B	×		Tewari et al. 1982b,c	p.461
14		3.2	3.2	25 °C		その他,generator column-HPLC/UV				experimental result		2B	×		Wasik et al. 1983	p.461
15		3.28	3.28	25 °C		その他,HPLC-RV retention volume correlation				estimated by calculation		4C	×		Garst & Wilson 1984	p.461
16		3.37	3.37	25 °C		その他,HPLC-k' correlation				estimated by calculation		4C	×		Haky & Young 1984	p.461

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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IIIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
17		3.33	3.33	25 °C		その他,RP- HPLC-k' capacity factor correlations				estimated by calculation		4C	×		Sherblom & Eganhouse 1988	p.461
18		3.45	3.45	25 °C		その他,RP- HPLC-k' capacity factor correlations				estimated by calculation		4C	×		Sherblom & Eganhouse 1988	p.461
19	MOE初期評 価	3.2	3.2									2B	○		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM). 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: 186. Verschuere, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM). Hansch, C. et al. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book:	p.2、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
20	NITE初期リ スク評価書	3.20[m-体]	3.2							experimental result		2B	○		SRC, Syracuse Research Corporation.KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY. 2003.	p.2
21	PhysProp	3.2	3.2							experimental result		2B	○		HANSCH,C ET AL..1995.	
22	REACH登録 情報	3.2	3.2	20 ° C[data not reported. Temperat ure and pH not stated so assumed standard.]	7[data not reported. Temperat ure and pH not stated so assumed standard. ]		no data	2: reliable with restriction s	key study	experimental result		4A	○		Hansch C, Leo A, Hoekman D..Exploring QSAR hydrophobic, electronic, and steric constants..1995,American Chemical Society, Washington DC.	Exp Key Partition coefficient.001
23	SIDS	3.2	3.2						key study			2A	○			p.3

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

◀ 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IIIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	logKoc	2.22	165.9586907										2B	×			p.187
2 EHC	Koc	129	129		5.6	forest soil pH 5.6 0.2% OC					experimental result		2B	○		Seip et al. 1986	4.1.3 Adsorption
3 EHC	Koc	289	289		4.2	forest soil pH 4.2 2.2% OC					experimental result		2B	○		Seip et al. 1986	4.1.3 Adsorption
4 EHC	Koc	158	158		7.4	agricultural soil pH 7.4 3.7% OC					experimental result		2B	○		Seip et al. 1986	4.1.3 Adsorption
5 EPI Suite	Koc	598.2 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定 (2C) 1	598.2				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×			
6 HSDB	Koc	166~182	174										2B	×		Abdul AS et al; Hazard Waste & Hazard Mater 4: 211- 22(1987) Sabljic A; Environ Sci Technol 21: 358-66 (1987)	ENVIRONMENTAL FATE:
7 Mackay	logKoc	2.11	128.8249552		5.6	forest soil pH 5.6							2B	○	EHCと同じ引用	Seip et al. 1986	p.461
8 Mackay	logKoc	2.48	301.995172		4.2	forest soil pH 4.2							2B	○	EHCと同じ引用	Seip et al. 1986	p.461
9 Mackay	logKoc	2.2	158.4893192		7.4	agricultural soil pH 7.4							2B	○	EHCと同じ引用	Seip et al. 1986	p.461
10	logKoc	2.37	234.4228815				その他,RP- HPLC-k' correlation				estimated by calculation		4C	×		Szabo et al. 1990a,b	p.461
11	logKoc	2.4	251.1886432				その他,RP- HPLC-k' correlation				estimated by calculation		4C	×		Szabo et al. 1990a,b	p.461
12	logKoc	2.62	416.8693835				その他,RP- HPLC-k' correlation including MCI related to non- dispersive intermolecular interac- tions, hydrogen- bonding indicator variable				estimated by calculation		4C	×		Hong et al. 1996	p.461

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

◀ 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IIIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
13	logKoc	2.63	426.5795188				その他,RP-HPLC-k' correlation including MCI related to non-dispersive intermolecular interactions, hydrogen-bonding indicator variable				estimated by calculation		4C	×		Hong et al. 1996	p.461
14	logKoc	2.06[average]	114.8153621			soils: organic carbon OC ≥ 0.1%							2B	×	選定したデータに推計値があるので除外	Delle Site 2001	p.461
15	logKoc	2.33[average]	213.796209			soils: organic carbon OC ≥ 0.5%							2B	×	同上	Delle Site 2001	p.461
16	MOE初期評価	Koc	174[166 ~ 182の幾何平均値]	174									2B	×	HSDBから引用	HSDB	p.3、1. 物質に関する基本的事項(3) 環境運命に関する基本的事項
17	NITE初期リスク評価書	Koc	39~2600	1319.5							experimental result		2B	×	本値はキシレン全体での値でありm-キシレンのみの値ではないので除外	SRC, Syracuse Research Corporation.PcKocWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.,2003.	p.3
18	REACH登録情報	Koc	537	537		soil	OECD TG 121	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	×	o-キシレンの値であるため除外	Hodson J and Williams NA.The estimation of the adsorption coefficient (Koc) for soils by high performance liquid chromatography.1988,Chemosphere 17, 67-77.	Exp Key Adsorption / desorption.001

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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 <sup>3</sup> /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IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	0.00718 atm・ m <sup>3</sup> /mol	727.5135							2B	×		Sanemasa et al. 1982	p.187
2 CRC	0.73 kPa m <sup>3</sup> /mol	730							2B	×		Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C.J. Phys. Chem. Ref. Data.2000,29, 41.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
3 EPI Suite	549 Pa・m <sup>3</sup> /mol	549					(Q)SAR		2C	×			
4 HSDB	7.18E-3 atm・m <sup>3</sup> /mol	727.5135							2B	×		Sanemasa I et al; Bull Chem Soc Jpn 55: 1054-62 (1982)	ENVIRONMENTAL FATE:
5 Mackay	731 Pa・m <sup>3</sup> /mol	731	25				experimental result	vapor-liquid equilibrium.	2B	×		Sanemasa et al. 1982	p.460
6	658.5 Pa・m <sup>3</sup> /mol	658.5	25				その他（測定 値）	exponential saturator EXPSAT technique	2B	×		Dohnal & Hovorka 1999	p.461
7	561 Pa・ m <sup>3</sup> /mol[selected from literature experimentally measured data]	561	25				experimental result	selected from literature experimentally measured data	2B	×	複数の文献値から平均を出しているた め、除外。	Staudinger & Roberts 2001	p.461
8 Mackay	754 Pa・m <sup>3</sup> /mol	606	20				experimental result	EPICS-GC/FID	2B	○		Ashworth et al. 1988	p.460
9	675 Pa・m <sup>3</sup> /mol	675					estimated by calculation	calculated-vapor- liquid equilibrium (VLE) data.	4C	×		Yaws et al. 1991	p.460
10	665 Pa・m <sup>3</sup> /mol	665					experimental result	infinite activity coeff. γ <sub>∞</sub> in water determined by inert gas stripping-GC.	2B	×		Li et al. 1993	p.460
11	739 Pa・ m <sup>3</sup> /mol[same as p- xylene]	739	25				experimental result	(static headspace- GC, same as p- xylene	2B	×		Robbins et al. 1993	p.460
12	615 Pa・m <sup>3</sup> /mol	615					experimental result	EPICS-GC/FID	2B	×		Dewulf et al. 1995)	p.460
13	297 Pa・m <sup>3</sup> /mol	297	6				experimental result	EPICS-GC/FID, natural seawater with salinity of 35%.	2B	×		Dewulf et al. 1995	p.461
14	771 Pa・m <sup>3</sup> /mol	771	25				experimental result	EPICS-GC/FID, natural seawater with salinity of 35%.	2B	×		Dewulf et al. 1995	p.461
15	590 Pa・ m <sup>3</sup> /mol[selected from literature experimentally measured data]	590	20				experimental result	selected from literature experimentally measured data,	2B	×		Staudinger & Roberts 1996	p.461
16 NITE初期リス ク評価書	727 Pa・m <sup>3</sup> /mol[727 Pa・m <sup>3</sup> /mol (7.18×10- 3 atm・m <sup>3</sup> /mol)]m-体]	727					experimental result		2B	×		SRC, Syracuse Research Corporation.PhysProp Database, North Syracuse, NY. (http://esc.syrres.com./interkow/ph ysdemo.htm から引用) 2002	p.3
17 PhysProp	0.00718 atm・ m <sup>3</sup> /mol	727.5135					experimental result		2B	×		SANEMASA, I ET AL..1982.	

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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
------	----	---	------	------------	----	-------	-----	-------------	--------------------------	------	---------	----	----	--------

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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 の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価III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		60.03 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C) 1	60.03	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	×			
2 EHC		1			BCF		23.6L/kg	23.6						eel ( <i>Anguilla japonica</i> )		○	m-キシレン、p-キシレンを混 合した物質の測定値	Ogata M & Miyake Y (1979) Disappearance of aromatic hydrocarbons and organic sulphur compounds from fish reared in crude oil suspensions. Water Res. 13: 75-78.	
3 EHC		1			BCF		14.8L/kg	14.8						goldfish		×		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.	

参考情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	m-キシレン
CAS番号	108-38-3

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 REACH登録情報		100%	その他,BOD										
2		100%	その他,GC analysis										
3 既存点検事業		92%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
4		106%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
5		102%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
6		100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
7		100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
8		100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				

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
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
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUCLID	IUCLID
IUPAC	The IUPAC Solubility Data Series
Mackay	OASIS Catalogic
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」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
REACH登録情報	REACH登録情報
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

基本情報

優先通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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III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	12~13 °C	12.5							2B	×			p.2612
2 ATSDR	融点	13.2 °C	13.2							2B	×		Lide 2005	
3 CCD	融点	13.2 °C	13.2							2B	×			
4 CRC	融点	13.3±0.1 ° C	13.3							2B	○			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
5	融点	13.25 °C	13.25							2B	×			24 Enthalpy of Fusion (Section 6) etc.
6 EHC	融点	13.3 °C	13.3							2B	○			2.1 Identity 2.2 Physical and chemical properties
7 EPI Suite	融点	-40.69 °C	-40.69	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
8 HSDB	融点	13.25 °C	13.25							2B	×		Lide, D.R. CRC Handbook of Chemistry and Physics 88TH Edition 2007-2008. CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, FL 2007. p. 3-520	CHEMICAL/PHYSICA L PROPERTIES: > MELTING POINT:
9 IUCLID	融点	2~13 ° C[13 - 2 degree C]	7.5							4A	×			p.20
10 IUCLID	融点	13.3 °C	13.3		no data					4A	○			p.20
11 Mackay	融点	13.25 °C	13.25							2B	×		(Lide 2003)	p.467
12 Merck	融点	13~14 °C	13.5							2B	×			
13 MOE初期評 価	融点	13.25 °C	13.25							2B	×		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD- ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM)	p.1、1. 物質に関す る基本的事項(2) 物理 化学的性状
14	融点	13~14 °C	13.5							2B	×		O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM)	p.1、1. 物質に関す る基本的事項(2) 物理 化学的性状
15	融点	13.263 °C	13.263							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: 173	p.1、1. 物質に関す る基本的事項(2) 物理 化学的性状

基本情報

優先通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
16		融点	13 °C	13							2B	×		Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM)	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
17	NITE初期リス ク評価書	融点	13~14 °C(p-体)	13.5							2B	×		Merck.The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.,2001.	p.2
18	PhysProp	融点	13.25 °C	13.25							2B	×			
19	REACH登録 情報	融点	13.2 °C[Sublimation: no]	13.2		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		Lide D. (Ed).CRC handbook of chemistry and physics. 89th ed..2008,CRC Press, Boca Raton. USA	Exp Key Melting point/freezing point.001
20	SIDS	融点	13.3 °C	13.3				key study			2A	○			p.3
21	既存点検事 業	融点	13.1 °C[286.3K(13.1°C)]	13.1							4A	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	138 °C	138									4A	×			p.2612
2 ATSDR	138.4 °C	138.4									4A	○		Slide 2005	p.187
3 CCD	138.5 °C	138.5									4A	×			
4 CRC	138.3±0.5 °C	138.3	138.3	760 mmHg							2B	○			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
5	411.5±0.5 K	138.35	138.35	101.325 kPa							2B	×		Christou, G..Ph.D. Dissertation, Univ. Melbourne.1988. Ambrose, D..J. Chem. Thermodyn..1987,19, 1007. Powell, R. J., Swinton, F. L., and Young, C. L..J. Chem. Thermodyn..1970,2, 105. Ambrose, D., Broderick, B. E., and Townsend, R..J. Chem. Soc..1967,A 633. Simon, M..Bull. Soc. Chim. Belg..1957,66, 375. Ambrose, D., and Grant, D. G..Trans. Faraday Soc..1957,53, 771. Akhundov, T. S., and Imanov, Sh. Yu..Teplofiz. Svoistva Zhidk. 1970, 48	18 Critical Constants of Organic Compounds (Section 6)
6 CRC	138.23 °C	138.23	138.23	760 mmHg							2B	○			23 Enthalpy of Vaporization (Section 6) etc.
7 EHC	138.3 °C	138.3	138.30926	101.3 kPa							2B	○			2.1 Identity 2.2 Physical and chemical
8 EPI Suite	148.29 °C	148.29			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
9 HSDB	138.23 °C	138.23									4A	○		Slide, D.R. CRC Handbook of Chemistry and Physics 88TH Edition 2007-2008. CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, FL 2007. p. 3-520	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
10 IUCLID	138 °C	138									4A	×			p.20
11	138.5 °C	138.5				no data					4A	×			p.20
12 Mackay	138.37 °C	138.37									4A	×		(Slide 2003)	p.467
13 Merck	137~138 °C	137.5									4A	×			
14 MOE初期評価	138.37 °C	138.37									4A	×		Slide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM)	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
15	137~138 °C	137.5									4A	×		O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station Merck and Co. Inc. (CD-ROM)	p.1、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
16	138.359 °C	138.359									4A	×		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: 173	p.1、 1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
17	MOE初期評価 138.4 °C	138.4									4A	○		Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM)	p.1、 1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
18	NITE初期リス ク評価書 137~138 ° C[p-体]	137.5									4A	×		Merck.The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station,	p.2
19	PhysProp 138.23 °C	138.23									4A	○			
20	REACH登録 情報 138.4 °C	138.4	138.40926	1013 hPa		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	○		Lide D. (Ed).CRC handbook of chemistry and physics. 89th ed..2008,CRC Press, Boca Raton, USA.	Exp Key Boiling point.001
21	SIDS 138.3 °C	138.3						key study			4A	○			p.3
22	既存点検事 業 138 ° C[411K(13 8°C)]	138									4A	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIIにおけるキースタディ	20°Cの値	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	9 mmHg	1199.9013	1199.9013	20 °C							2B	×				p.2612
2 ATSDR	8.84 mmHg	1178.5697	835.49118	25 °C							2B	×			Chao 1983	p.187
3 CRC	1 kPa	1000	846.54616	22.4 °C							2B	×			Lide, D.R., and Kehiaian, H.V..CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL 1994	20 Vapor Pressure (Section 6)
4	10 kPa	10000	532.45254	68.9 °C							4A	×			Lide, D.R., and Kehiaian, H.V..CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL 1994	20 Vapor Pressure (Section 6)
5	100 kPa	100000	278.30034	137.9 °C							4A	×			Lide, D.R., and Kehiaian, H.V..CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL 1994	20 Vapor Pressure (Section 6)
6	1.19 kPa	1190	843.59413	25 °C							2B	×				33 Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
7 EHC	0.86 kPa	860	860	20 °C							2B	○				2.2 Physical and chemical properties
8 EPI Suite	916 Pa[2B以上の値を用いて推定(2C) 1]	916	649.35481	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×				
9 HSDB	8.84 mmHg	1178.5697	835.49118	25 °C							2B	×			Chao J et al; J Phys Chem Ref Data 12: 1033-63 (1983)	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE:
10 IUCLID	12~0 hPa	600	455.21678	24 °C							4A	×				p.21
11	11.5 hPa	1150	815.23802	25 °C	その他	no data			experimental result		4A	×				p.21
12 Mackay	154.7 Pa	154.7	683.67238	0.2 °C	その他,mercury manometer				experimental result		4A	×			Linder 1931	p.468
13	1170 Pa	1170	829.41608	25 °C					外挿(補外)	Antoine eq	4C	×	713		Zwolinski & Wilhoit 1971	p.468
14	880.3 Pa	880.3	879.37647	20.015 °C[measured range – 26.043 to 20.015]	その他,inclined-piston gauge				experimental result		2B	×			Osborn & Douslin 1974	p.468
15	1170 Pa	1170	829.41608	25 °C					外挿(補外)	Antoine eq	4C	×	887		Boublik et al. 1984	p.468
16	1167 Pa	1167	827.28937	25 °C					外挿(補外)	Antoine eq	4C	×	706		Dean 1985, 1992	p.468
17	1200 Pa	1200	850.68315	25 °C							2B	×			Riddick et al. 1986	p.468
18	1160 Pa	1160	822.32705	25 °C					experimental result	Antoine eq	2B	×	869		Riddick et al. 1986	p.468
19 Mackay	1180 Pa	1180	836.5051	25 °C					内挿(補間)	Antoine eq	4C	○	880		Stephenson & Malanowski 1987	p.468

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIIにおけ るキースタ デー	20°Cの値	備考	文献	ページ番号等
20	1165 Pa	1165	825.87156	25 ° C[measure d range 20.0– 50.071	その 他,McLeod gauge				experiment al result		2B	×			Smith 1990	p.468
21	Mackay 787 Pa	787	787	20 °C	その他,Hg manometer				experiment al result	Antoine eq	2B	○	784		Kassel 1936	p.468
22	1437 Pa	1437	730.39642	30 ° C[measure d range 10 –50°C]	その他,Hg manometer				experiment al result		2B	×			Rintelen et al. 1937	p.468
23	Mackay 1187 Pa	1187	841.46742	25 °C	その他,Hg manometer				内挿(補間)	Antoine eq	2B	○	883		Pitzer & Scott 1943	p.468
24	6354 Pa	6354	594.03449	58.288 ° C[measure d range 58.288– 139.289°C]	その 他,ebulliometry				外挿(補 外)	Antoine eq	4A	×	351		Willingham et al. 1945	p.468
25	1333 Pa	1333	809.76033	27.3 °C					その他(測 定値)	summary of literature data	2B	×			Stull 1947	p.468
26	6398 Pa	6398	593.87529	58.419 ° C[measure d range 58.419– 139.329°C]	その 他,ebulliometry				外挿(補 外)	Antoine eq	4A	×	869		Forziati et al. 1949	p.468
27	1175 Pa	1175	832.96059	25 °C					外挿(補 外)	Antoine eq	4C	×	868		Dreisbach 1955	p.468
28	126500 Pa	126500	257.75245	146.85 ° C[measure d range 146.85– 316.85°C]	その 他,ebulliometry				experiment al result		4A	×			Ambrose et al. 1967	p.468
29	Mackay								内挿(補間)	Antoine eq		○	882		Stuckey & Saylor 1940	
30	Mackay								内挿(補間)	Antoine eq		○	867		Weast 1972–73	
31	Mackay								内挿(補間)	Antoine eq		○	435		Yaws 1994	
32	MOE初期評 価	1.19E+3 Pa[8.9 mmHg (=1.19 × 10.3 Pa)]	1190	843.59413	25 °C						2B	×			Lide 2006	p.1、1. 物質に関する 基本的事項(2) 物理化学 的性状
33		1.2E+3 Pa[8.84 mmHg (=1.2 × 10.3 Pa)]	1200	850.68315	25 °C						2B	×			Howard 1997	p.2、1. 物質に関する 基本的事項(2) 物理化学 的性状
34	MOE初期評 価	870 Pa[6.5 mmHg (=870Pa)]	870	870	20 °C						2B	○			Verschueren 2001	p.2、1. 物質に関する 基本的事項(2) 物理化学 的性状

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIIにおけ るキースタ デー	20°Cの値	備考	文献	ページ番号等
35	NITE初期リス ク評価書	0.9 kPa[p- 体]	900	900	20 °C							2B	○			IPCS, International Programme on Chemical Safety. ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva (2002) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva ( <a href="http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtasht/">http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtasht/</a> )	p.2
36	PhysProp	8.84 mmHg	1178.5697	835.49118	25 °C					experimental result		2B	×			CHAO, J ET AL..1983.	
37	REACH登録 情報	0.186 psi	1282.4254	816.31756	26.6 °C[80 °F]		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×			Zwolinski and Wilhoit. Handbook of vapour pressures and heats of vapourisation of hydrocarbons and related compounds. 1971, Thermodynamics Research Centre, Texas A&M University, Texas	Exp Key Vapour pressure.001
38	SIDS	865 Pa	865	865	20 °C				key study			2A	○				p.3

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIにお けるキース タディ	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	162 mg/L	162	151.228043	25 °C								2B	○		Sanemasa 1982	p.187
2 CCD	[insoluble in water]	単位換算不可										3	×			
3 CRC	[insoluble]	単位換算不可										3	×			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
4	0.16 g/kg	160	216.068143	0 °C								4A	×		Solubility Data Series, International Union of Pure and Applied Chemistry, Vol. 38, Pergamon Press, Oxford 1988.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
5	0.181 g/kg	181	168.964665	25 °C								2B	×		Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C.J. Phys. Chem. Ref. Data.2000,29, 41.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
6	0.22 g/kg	220	169.284625	40 °C								4A	×		Solubility Data Series, International Union of Pure and Applied Chemistry, Vol. 38, Pergamon Press, Oxford 1988.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
7 EHC	185 mg/L	185										4A	×			2.2 Physical and chemical properties
8 EPI Suite	229.9 mg/L[2B以上の値を用いて推定(2C) 1]	229.9	214.61313	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
9 HSDB	1.62E+2 mg/L	162	151.228043	25 °C								2B	○		Sanemasa I et al; Bull Chem Soc Jpn 18: 1111-230 (1982)	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
10 IUCLID	0~2 vol%	単位換算不可		25 °C								3	×			p.21
11	156 mg/L	156	145.627004	25 °C								4A	×			p.21
12 IUPAC	1.96 g(1)/100g sln	19600	19641.2132	293 K								4C	×			Table 2. Tentative Values of the Solubility of p-Xylene (1) in Water (2)
13	1.6 g(1)/100g sln	16000	16033.6434	293 K								4C	×			Table 2. Tentative Values of the Solubility of p-Xylene (1) in Water (2)
14 Mackay	200 mg/L	200	186.701288	25 °C		その他,shake flask-UV						2B	×		Andrews & Keefer 1949	p.467
15	214.5 mg/L	214.5	200.237131	25 °C		その他,generator column-HPLC/UV, GC/ECD						2B	×		Tewari et al. 1982c	p.467
16	182 mg/L	182	169.898172	25 °C								2B	×		Hafkenscheid & Tomlinson 1983a	p.467
17	214 mg/L	214	199.770378	25 °C		その他,generator column-HPLC						2B	×		Wasik et al. 1983	p.467

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIにお けるキース タディ	備考	文献	ページ番号等
18	215 mg/L	215	200.703884	25 °C		その他,generator column-GC/FCD				experimental result		2B	×		Miller et al. 1985	p.467
19	190 mg/L	190	177.366223	25 °C		その他,shake flask-radiometric				experimental result		2B	×		Lo et al. 1986	p.467
20	180 mg/L[IUPAC recommended value]	180	168.031159	25 °C[temp range 0-90°C]								2B	×		Shaw 1989b	p.467
21	169 mg/L	169	147.607042	30 °C[measured range 30-100°C]		その他,equilibrium flow cell-GC				experimental result		2B	×		Chen & Wagner 1994c	p.467
22	198 mg/L	198	184.834275	25 °C[measured range 0.4-85°C]		その他,shake flask-UV				experimental result		2B	×		Bohon & Claussen 1951	p.467
23	185 mg/L	185	172.698691	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×		Polak & Lu 1973	p.467
24	156 mg/L	156	145.627004	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×		Sutton & Calder 1975	p.467
25	163 mg/L	163	152.161549	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×		Hermann 1972	p.467
26	157 mg/L	157	146.560511	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×		Price 1976	p.467
27	157 mg/L	157	146.560511	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×		Krzyzanowska & Szeliga 1978	p.467
28	191 mg/L	191	191	20 °C		その他,shake flask-UV				experimental result		2B	×		Ben-Naim & Wiff 1979	p.467
29 Mackay	163 mg/L	163	152.161549	25 °C[measured range 15-45°C]		その他,vapor saturation-UV spec.				experimental result		2B	○		Sanemasa et al. 1982	p.467
30 Merck	[Insol in water]	単位換算不可										3	×			
31 MOE初期評価	162 mg/L	162	151.228043	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: 173	p.2、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
32	198 mg/L	198	184.834275	25 °C								2B	×		Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM)	p.2、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIにお けるキース タディ	備考	文献	ページ番号等
33	181 mg/1000g	181	168.964665	25 °C								3	×		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM). 4) O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia	p.2、1. 物質に関する基本的事項(2) 物理化学的性状
34	NITE初期リス ク評価書 162 mg/L[p- 体]	162	151.228043	25 °C								2B	○		SRC, Syracuse Research Corporation. PhysProp Database, North Syracuse, NY. (http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm から引用) 2002	p.3
35	PhysProp 162 mg/L	162	151.228043	25 °C						experimental result		2B	○		SANEMASA, I ET AL..1982.	
36	REACH登録 情報 156 mg/L[moder ately soluble (100-1000 mg/L)]	156	145.627004	25 °C	7[data not reported. pH not stated, so assumed standard.]		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		Yalkowsky, S.H. And He, Y. Handbook of aqueous solubility data..2003,CRC Press.	Exp Key Water solubility.001
37	SIDS 162 mg/L	162	151.228043	25 °C					key study			2A	×			p.3
38	既存点検事 業 160 mg/L	160	149.36103	25±1 °C		OECD TG 105				experimental result		1B	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1	ATSDR	3.15	3.15									2B	○		Hansch 1995	p.187
2	CRC	3.15	3.15	25 °C								2B	○		Sangster, J..J. Phys. Chem. Ref. Data.1989,18, 1111.	38 Octanol-Water Partition Coefficients (Section 16)
3	EHC	3.15	3.15									2B	○			2.1 Identity 2.2 Physical and chemical properties
4	EPI Suite	3.09	3.09			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
5	HSDB	3.15	3.15									2B	○		Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society, 1995. p. 43	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT: p.21
6	IUCLID	3.15	3.15				no data			experimental result		4A	○			
7	Mackay	3.15	3.15	25 °C								2B	×		Leo et al. 1971; Hansch & Leo 1985	p.469
8		3.48	3.48	25 °C		その他,RP-HPLC-k' capacity factor correlations				estimated by calculation		4C	×		Sherblom & Eganhouse 1988	p.469
9	Mackay	3.15[recommended]	3.15	25 °C								2B	○		Sangster 1989, 1993	p.469
10		3.35	3.35	25 °C		その他,normal phase HPLC-k' correlation				estimated by calculation		4C	×		Govers & Evers 1992	p.469
11	Mackay	3.15[recommended]	3.15	25 °C								2B	○		Hansch et al. 1995	p.469
12		3.2	3.2	25 °C								2B	×		Hansch & Leo 1979	p.469
13		3.1	3.1	25 °C		その他,HPLC-k' correlation				estimated by calculation		4C	×		Hanai et al. 1981	p.469
14		3.28	3.28	25 °C		その他,HPLC-k' correlation				estimated by calculation		4C	×		Hammers et al. 1982	p.469
15		3.18	3.18	25 °C		その他,generator column-HPLC/UV, GC/ECD				experimental result		2B	×		Tewari et al. 1982b,c	p.469
16		3.29	3.29	25 °C		その他,HPLC-k' correlation				estimated by calculation		4C	×		Tomlinson 1983b	p.469

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIIにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
17		3.18	3.18	25 °C		その他,generator column- HPLC/UV				experimental result		2B	×		Wasik et al. 1983	p.469
18		3.29	3.29	25 °C		その他,HPLC- RV correlation				estimated by calculation		4C	×		Garst 1984	p.469
19		3.36	3.36	25 °C		その他,RP- HPLC-k' capacity factor correlations				estimated by calculation		4C	×		Sherblom & Eganhouse 1988	p.469
20	MOE初期評 価	3.15	3.15									2B	○		Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Lide, D.R. ed. (2006): Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Verschueren, K. ed. (2001): Hansch, C. et al. (1995):	p.2、1. 物質に関する基 本的事項(2) 物理化学的性 状
21	NITE初期リ スク評価書	3.15[p-体]	3.15							experimental result		2B	○		SRC, Syracuse Research Corporation.KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY, 2003.	p.2
22	PhysProp	3.15	3.15							experimental result		2B	○		HANSCH,C ET AL..1995.	
23	REACH登録 情報	3.15	3.15	20 °C	7[data not reported. Temperat ure and pH not stated, so assumed standard]		no data	2: reliable with restriction s	key study	experimental result		4A	○		Hansch C, Leo A, Hoekman D..Exploring QSAR hydrophobic, electronic, and steric constants..1995,American Chemical Society.	Exp Key Partition coefficient.001
24	SIDS	3.15	3.15						key study			2A	○			p.3

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIIにおけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	logKoc	2.31	204.1737945										2B	×		Abdul 1997	p.187
2 EPI Suite	Koc	541.4 L/kg[2B 以上の値を用いて推定 (2C) 1	541.4				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×			
3 HSDB	Koc	246~540	393										2B	×		Walton BT et al; J Environ Qual 21: 552-558 (1992)	ENVIRONMENTAL FATE:
4 Mackay	logKoc	2.24	173.7800829			aquifer material with f OC of 0.006	その他,aquifer material with f OC of 0.006 and measured partition coeff. K P = 1.04 mL/g.				その他(測定値)	aquifer material with f OC of 0.006 and measured partition coeff. K P = 1.04 mL/g.	2B	×		Schwarzenbach & Westall 1981	p.469
5 Mackay	logKoc	1.87	74.13102413		5	Webster soil OC 41.36g/ka	その他,batch equilibrium				experimental result		2B	○	元文献には74.95mL/gと記載	Pennell et al. 1992	p.469
6 Mackay	logKoc	2.22	165.9586907		5	Webster soil HP OC 2.27g/ka	その他,batch equilibrium				experimental result		2B	○	元文献には453.3mL/gと記載	Pennell et al. 1992	p.469
7	logKoc	3.53	3388.441561			sorbent: Silica gel OC 0.45 g/Kg	その他,batch equilibrium				experimental result		2B	×	元文献には3400mL/gと記載	Pennell et al. 1992	p.469
8 Mackay	logKoc	2.63	426.5795188		5.5	kaolinite OC 0.65g/ka	その他,batch equilibrium				experimental result		2B	○	元文献には429.2mL/gと記載	Pennell et al. 1992	p.469
9 Mackay	logKoc	2.72	524.8074602		4.97	Captina silt loam pH 4.97							2B	○		Walton et al. 1992	p.469
10 Mackay	logKoc	2.17	147.9108388		4.43	McLaurin sandy loam pH 4.43	その他						2B	○		Walton et al. 1992	p.469
11	logKoc	2.52	331.1311215			average 5 soils and 3 sediments	その他,sorption isotherms by batch equilibrium and column experiments				experimental result		2B	×		Schwarzenbach & Westall 1981	p.469
12	logKoc	2.43	269.1534804				その他,RP-HPLC-k' correlation including MCI related to non-dispersive intermolecular interactions				estimated by calculation		4C	×		Hong et al. 1996	p.469

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
13	logKoc	2.44	275.4228703				その他,hydrogen-bonding indicator variable				estimated by calculation		4C	×		Hong et al. 1996	p.469
14	logKoc	2.37	234.4228815				その他,HPLC-screening method				その他(測定値)	HPLC-screening method	2B	×		Müller & Kördel 1996	p.470
15	logKoc	2.49	309.0295433	2.3		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.470
16	logKoc	2.75	562.3413252	3.8		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.470
17	logKoc	2.65	446.6835922	6.2		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.470
18	logKoc	2.76	575.4399373	8		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.470
19	logKoc	2.79	616.5950019	13.5		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.470
20	Mackay	logKoc	2.76	575.4399373	18.6		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.12%				experimental result		2B	○		Dewulf et al. 1999	p.470

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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IIIにおけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
21	logKoc	2.78	602.5595861	25		natural sediment from River Leie, organic carbon f OC = 4.42%	その他,EPICS-GC/FID				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1999	p.470
22	logKoc	2.42	263.0267992			sediment 4.02% OC from Tamar estuary	その他,batch equilibrium-GC				experimental result		2B	×		Vowles & Mantoura 1987	p.469
23	logKoc	2.27[average]	186.2087137			soils: organic carbon OC ≥ 0.1%							2B	×		Delle Site 2001	p.470
24	logKoc	2.31[average]	204.1737945			soils: organic carbon OC ≥ 0.5%	その他						2B	×		Delle Site 2001	p.470
25	logKoc	2.21[average]	162.1810097			soils: organic carbon 0.1 ≤ OC < 0.5%	その他						2B	×		Delle Site 2001	p.470
26	MOE初期評価	Koc	364[246 ~540の幾何平均値]	364									2B	×		Hazardous Substances Data Bank (http://toxnet.nlm.nih.gov/, 2010.3.16 現在)	p.3、1. 物質に関する基本的事項(3) 環境運命に関する基本的事項
27	NITE初期リスク評価書	Koc	39~2600	1319.5							experimental result		2B	×	キシレン全体の値で有り、p-キシレンの値のみではないので採用しない	SRC, Syracuse Research Corporation.PcKocWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY, 2003	p.3
28	REACH登録情報	Koc	537	537		soil	OECD TG 121	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	○		Hodson J and Williams NA.The estimation of the adsorption coefficient (Koc) for soils by high performance liquid chromatography.1988,Chemosphere 17: 67-77	Exp Key Adsorption / desorption.001

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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 <sup>3</sup> /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IIIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	0.0069 atm・m <sup>3</sup> /mol	699.1425							2B	×		Foster 1994	p.187
2 CRC	0.69 kPa m <sup>3</sup> /mol	690							2B	×		Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C.J. Phys. Chem. Ref. Data.2000,29, 41.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
3 EPI Suite	576 Pa・m <sup>3</sup> /mol	576					(Q)SAR		2C	×			
4 HSDB	6.90E-3 atm・m <sup>3</sup> /mol	699.1425							2B	×		Foster P et al; Fresen Environ Bull 3: 318-23 (1994)	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES
5 Mackay	762 Pa・m <sup>3</sup> /mol	762					experimental result		2B	×		Sanemasa et al. 1982	p.469
6	595 Pa・m <sup>3</sup> /mol	595					experimental result		2B	×		Zhang & Pawliszyn 1993	p.469
7	575 Pa・m <sup>3</sup> /mol	575					experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1995	p.469
8	318 Pa・m <sup>3</sup> /mol	318	6				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1995	p.469
9	763 Pa・m <sup>3</sup> /mol	763	25				experimental result		2B	×		Dewulf et al. 1995	p.469
10	641 Pa・m <sup>3</sup> /mol[selected from literature experimentally measured data]	641	20				experimental result		2B	×	複数の文献値から平均を出しているため、除外。	Staudinger & Roberts 1996	p.469
11	678.6 Pa・m <sup>3</sup> /mol	678.6					その他（測定値）	exponential saturator EXPSAT technique	2B	×		Dohnal & Hovorka 1999	p.469
12	669.1 Pa・m <sup>3</sup> /mol	669.1					experimental result		2B	×		Ryu & Park 1999	p.469
13	604 Pa・m <sup>3</sup> /mol[selected from literature experimentally measured data]	604	20				experimental result		2B	×	複数の文献値から平均を出しているため、除外。	Staudinger & Roberts 2001	p.469
14 Mackay	654 Pa・m <sup>3</sup> /mol	654	20				experimental result		2B	○		Ashworth et al. 1988	p.469
15	752 Pa・m <sup>3</sup> /mol	752					experimental result		2B	×		Ashworth et al. 1988	p.469
16	614 Pa・m <sup>3</sup> /mol	614					estimated by calculation		4C	×		Yaws et al. 1991	p.469
17	856 Pa・m <sup>3</sup> /mol	856					experimental result		2B	×		Hansen et al. 1993	p.469
18	1189 Pa・m <sup>3</sup> /mol	1189					experimental result		2B	×		Hansen et al. 1993	p.469
19	1576 Pa・m <sup>3</sup> /mol	1576					experimental result		2B	×		Hansen et al. 1993	p.469
20	696 Pa・m <sup>3</sup> /mol	696					その他（測定値）	infinite activity coeff. $\gamma^\infty$ in water determined by inert gas stripping-GC	2B	×		Li et al. 1993	p.469

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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 <sup>3</sup> /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IIIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
21	739 Pa・ m <sup>3</sup> /mol[same as m- xylene]	739					experimental result		2B	×		Robbins et al. 1993	p.469
22	NITE初期リス ク評価書	699 Pa・m <sup>3</sup> /mol[699 Pa・m <sup>3</sup> /mol (6.90×10- 3 atm・m <sup>3</sup> /mol)]p-体]					experimental result		2B	×		SRC, Syracuse Research Corporation.PhysProp Database, North Syracuse, NY. ( <a href="http://esc.syrres.com./interkow/physdemo.htm">http://esc.syrres.com./interkow/physdemo.htm</a> から引用) 2002	p.3
23	PhysProp	0.0069 atm・m <sup>3</sup> /mol					experimental result		2B	×		FOSTER,P ET AL..1994.	

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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
------	----	---	------	------------	----	-------	-----	-------------	--------------------------	------	---------	----	----	--------

基本情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1			BCF		55.64 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C) 1	55.64	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	×			
2 EHC		1			BCF		23.6L/kg	23.6						eel ( <i>Anguilla japonica</i> )		○	m-キシレン、p-キシレンを混 合した物質の測定値	Ogata M & Miyake Y (1979) Disappearance of aromatic hydrocarbons and organic sulphur compounds from fish reared in crude oil suspensions. Water Res. 13: 75-78.	
3 EHC		1			BCF		14.8L/kg	14.8						goldfish		×		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.	

参考情報

優先評価化学物質通し番号	125
物質名称	p-キシレン
CAS番号	106-42-3

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 REACH登録情報		68%	その他,% ThOD		OECD TG 301F	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result			1995,1995.8.2.	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
2		87.80%	その他,% ThOD		OECD TG 301F	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result			1995,1995.8.2.	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
3		38%	その他,BOD		OECD TG 301C	yes	4: not assignable	supporting study	experimental result			MITI.Biodegradation and Bioconcentration of Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law.2001,National Institute of Technology and Evaluation	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.002
4		92%	その他,GC analysis		OECD TG 301C	yes	4: not assignable	supporting study	experimental result			MITI.Biodegradation and Bioconcentration of Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law.2001,National Institute of Technology and Evaluation	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.002
5 既存点検事業		40%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
6		32%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
7		43%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
8		87%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
9		90%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
10		100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
11		106%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
12		111%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
13		100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				
14		100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result				