資料１－２【参考１】

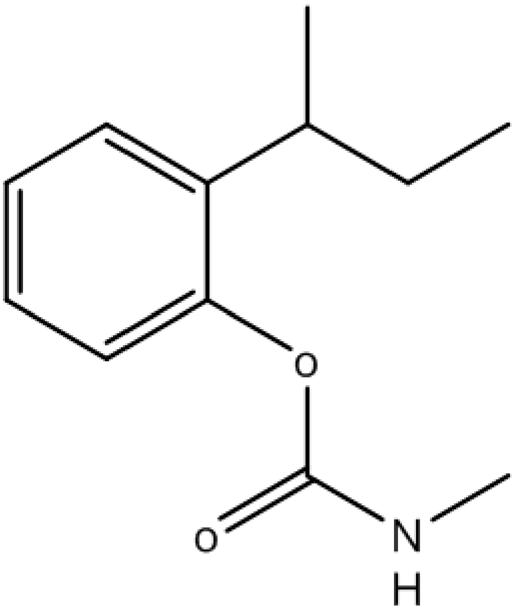
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

N–メチルカルバミン酸 2–*sec*–ブチルフェニル
（別名 ： フェノブカルブ 又は BPMC）

優先評価化学物質通し番号 158



平成 30 年 1 月

経済産業省

目　　次

1 評価対象物質の性状

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

1-1 物理化学的性状及び濃縮性

モデル推計に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を表 1-1 に示す。なお、表中の下線部は、評価Ⅱにおいて精査した結果、評価Ⅰから変更した値を示している。

表 1-1 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ [1)]

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値（参考）
分子量	―	207.27	―	207.27
融点	℃	31.4[2),3)]	示差走査熱量分析法での測定値	31.5[4)]
沸点	℃	―[2)]	示差熱分析法での測定より240℃で分解	147.7[4)]
蒸気圧	Pa	9.9×10^{-3} [2),3)]	ガス飽和法での測定値	0.031[4),5)]
水に対する溶解度	mg/L	420[2),3),4),6)]	フラスコ振とう法での測定値	420[6)]
1-ｵｸﾀﾉｰﾙと水との間の分配係数（logPow）	―	2.67[2),3)]	フラスコ振とう法での測定値	2.78[6)]
ヘンリー係数	Pa・m^3/mol	8.4×10^{-3} [7)]	推計値	8.4×10^{-3} [7)]
有機炭素補正土壌吸着係数（Koc）	L/kg	182[2),3)]	測定値の中央値	232.6[7)]
生物濃縮係数（BCF）	L/kg	4[8)]	濃縮度試験における測定値	4[8)]
生物蓄積係数（BMF）	―	1[9)]	logPow と BCF から設定	1[9)]
解離定数（pKa）	―	―[2)]	電気伝導度法での測定より解離しない	―[10)]

1) 平成 29 年度第 2 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議（平成 29 年 9 月 11 日）で了承された値
2) 農薬抄録（2014）
3) 農薬ハンドブック（2016）
4) PhysProp
5) EHC（1986）
6) MOE（2003）
7) EPI Suite（2012）
8) MITI（1986b）
9) MHLW, METI, MOE（2014）
10) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない
-:値を設定しないことを示す

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

①融点

評価Ⅰで採用した値は、PhysProp に記載された値（31.5℃）であるが、測定値であるか不明である。農薬抄録（2014）には OECD TG 102 の示差走査熱量分析法による GLP 準拠の測定値（31.4℃）が記載されており、評価Ⅱにおいてはこの値（31.4℃）を用いる。この値は農薬ハンドブック（2016）にも記載されている。

②沸点

評価Ⅰで採用した値は、PhysProp に記載された、2.00×10^{-2} mmHg（2.67 Pa）での値(112.5℃、測定値であるか不明）を標準圧力（101.3 kPa）に補正した値（147.7℃）である。MITI (1986a)、MOE (2003) には、0.2 mmHg での値（112～113℃、測定値であるか不明）が記載されている。農薬抄録（2014）に記載されている OECD TG 103 の示差熱分析法による GLP 準拠の測定では、240℃で分解のため測定不能と記載されていた。評価Ⅱにおいては沸点を設定しない。

③蒸気圧

評価Ⅰで採用した値は、EHC（1986）に記載された 20℃での測定値（0.048 Pa）と、PhysProp に記載された 25℃での測定値（0.01900 Pa）を 20℃に補正した値（0.01347 Pa）の、算術平均値（0.031 Pa）である。農薬抄録（2014)、農薬ハンドブック（2016）には、EPA ガス飽和法による 20℃での測定値（9.9×10^{-3} Pa）が記載されている。評価Ⅱでは、この値(9.9×10^{-3} Pa）を用いる。

④水に対する溶解度

評価Ⅰで採用した値は、MOE (2003) に記載された測定値である。PhysProp 、農薬抄録(2014)、農薬ハンドブック（2016）にもこの値が記載されている。農薬抄録（2014）によるとこの値は、OECD TG 105 フラスコ法に準ずる 20℃での測定値である。評価Ⅱにおいてはこの値（420 mg/L）を用いる。

⑤logPow

評価Ⅰで採用した値は、MOE（2003）に記載された測定値（2.78）である。農薬抄録(2014) には、EPA フラスコ振とう法による 25℃での測定値（2.67）が記載されており、評価Ⅱにおいてはこの値（2.67）を用いる。この値は農薬ハンドブック（2016）にも記載されている。

⑥ヘンリー係数

評価Ⅰで採用した値は、EPI Suite の HENRYWIN(v3.20) を用いた推計値(Bond Estimation Method)である。評価Ⅱにおいてもこの値（8.4×10^{-3}）を用いる。なお、蒸気圧と水溶解度の比より算出した値は 4.9×10^{-3} であった。

⑦Koc

評価Ⅰで採用した値は、EPI Suite の KOCWIN(v2.00)を用いた推計値(232.6 L/kg, Log Kow Estimation Method)である。農薬抄録（2014）及び農薬ハンドブック（2016）には OECD TG 106 による測定値（147～216 L/kg）が記載されており、評価Ⅱにおいてはこの値の中央値（182 L/kg）を用いる。

⑧BCF

評価Ⅰで採用した値は、MITI（1986b）に記載された化審法テストガイドラインによる測定値である。この試験においては定常状態での BCF が算出されていないため、各濃度区の後半 3 回の測定値の算術平均値のうち、最大値を用いている。評価Ⅱにおいてもこの値 (4 L/kg) を用いる。

⑨BMF

評価Ⅰで採用した値は、logPow (2.78) 及び BCF (4 L/kg) から技術ガイダンスに従って設定

したものである。BMF の測定値は得られなかったため、評価Ⅱにおいては、logPow (2.67) 及び BCF (4 L/kg) から技術ガイダンスに従って 1 を用いる。

⑩解離定数

評価 I においては解離を考慮しないため、参考値は設定されていない。農薬抄録（2014）では、OECD TG 112 の電気伝導度法による GLP 準拠の 20℃での測定の結果、解離しないとの記載があったため、評価Ⅱにおいては解離性を考慮しないこととする。

1-2 分解性

表 1-2 にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

表 1-2 分解に係るデータのまとめ [1)]

項目			半減期（日）	詳細
大気	大気における総括分解半減期		NA	
	機序別の半減期	OH ラジカルとの反応	1.5	AOPWIN (V.1.92) により推計 [2)]。反応速度定数の推定値 [3-4)] から、OH ラジカル濃度を 5×10^5 molecule/cm^3 として算出
		オゾンとの反応	NA	
		硝酸ラジカルとの反応	NA	
水中	水中における総括分解半減期		NA	
	機序別の半減期	生分解	18.6	高知鉱質土壌（湛水条件)、30℃で測定した半減期 [5)]
		加水分解	―	生分解の半減期として採用した値に加水分解も含まれるため、考慮しない。
		光分解	285	自然水中、25℃で測定した半減期を、北緯 35°（東京)、春(4~6 月)における太陽光下での半減期に換算 [5)]
土壌	土壌における総括分解半減期		16.0	高知鉱質土壌（畑地条件)、30℃で測定した半減期 [5)]
	機序別の半減期	生分解	NA	
		加水分解	NA	
底質	底質における総括分解半減期		74.4	高知鉱質土壌（湛水条件)での 土壌半減期（18.6 日）[5)] の 4 倍と仮定
	機序別の半減期	生分解	NA	
		加水分解	NA	

1) 平成 29 年度第 2 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議（平成 29 年 9 月 11 日）で了承された値
2) EPI Suite (2012)
3) MOE (2003)
4) Physprop
5) 農薬抄録 (2014)
NA:情報が得られなかったことを示す
―: 値を設定しないことを示す

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

①大気

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

①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

大気中における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値に関する情報は得られなかったため、AOPWIN (v1.92) により推計された 1.1×10^{-11} cm^3/molecule/s を半減期算出に採用する。この反応速度定数は MOE (2003)、PhysProp にも記載されている。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの 5×10^5 molecule/cm^3 とした場合、半減期は 1.5 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (1.5 日) を用いる。

②水中

水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、生分解、加水分解及び光分解の機序別の半減期に関する情報が得られた。生分解の半減期としては、土壌分解試験の半減期を採用した。この値には、生分解と加水分解が含まれていると考え、加水分解の半減期は設定しない。

②-1　生分解の半減期

MITI (1986b) において、被験物質濃度 100 mg/L、活性汚泥濃度 30 mg/L で 28 日間試験を行った結果、BOD 分解度及び TOC 分解度はいずれも 0~1 %、HPLC 分解度は 2~3 %であった。この値は MOE (2003) にも記載されている。技術ガイダンスに従って換算すると半減期は 1.0 ×10^4 日となる。

EPI Suite の BIOWIN(v4.10)を用いた推計では weeks-months との格付けが得られた。技術ガイダンスに従って換算すると、半減期は 37.5 日となる。

農薬抄録 (2014) では、国立衛生試験所 (1974) が土壌単離糸状菌を用い実施した、微生物による分解試験の情報が記載されている。試験において、^{3}H で標識したフェノブカルブ 2 mg/L を 7～10 日間インキュベートしたところ、フェノブカルブは菌株によって、主に側鎖の酸化とカルバモイル基の脱 *N*-メチル化と引き続く加水分解によって代謝されると報告している。

水中での生分解半減期に関する情報がなかったため、ここでは、水中においても後述の土壌と同様に、フェノブカルブは微生物による分解を受けると考え、評価Ⅱでは高知土壌、湛水条件での半減期 (18.6 日) を水中での生分解の半減期として採用する。

②-2　加水分解の半減期

農薬抄録 (2014) において、OECD TG 111 による GLP 準拠の測定値 (pH 7.0 : 50、60、70℃、pH 9.0 : 20、30℃)を 25℃に外挿して、pH 7、25℃における半減期を 566 日、pH 9、25℃における半減期を 7.8 日と算出している。なお、技術ガイダンスにおいては淡水および海水の pH をそれぞれ 7.6、8.2 としており、実環境では、この値(566 日)より短くなることが想定される。ただし、生分解の半減期として採用した値に加水分解も含まれると考え、評価Ⅱでは加水分解の半減期は設定しない。

②-3　光分解の半減期

農薬抄録 (2014) において、GLP 準拠の測定値から、自然水中、25℃における光分解の半減期を 36.8 日と算出し、更に北緯 35°（東京）、春（4-6 月）における太陽光下での半減期に換算し、285 日と推定している。評価Ⅱではこの値（285 日）を採用する。参考として、同じ条件下の蒸留水中での測定値は、25℃における光分解の半減期を 60.5 日と算出し、更に北緯 35°（東京）、春（4-6 月）における太陽光下での半減期に換算し、468 日と推定している。

③土壌

農薬抄録（2014）では、理化学研究所（1976）が以下の 2 土壌を用い実施した、^{14}C で標識したフェノブカルブを 30℃で最大 30 日間インキュベートする土壌分解試験の情報が記載されている。本試験でも、国立衛生試験所 (1974)と同様に微生物による分解機序が報告されている。得られた初期フェノブカルブに対する割合より、半減期は、栃木土壌においては 8.6 日（湛水条件）、5.8 日（畑地条件）と算出された。一方高知土壌においては、18.6 日（湛水条件）、16.0 日（畑地条件）と算出された。評価Ⅱでは 16.0 日を採用する。

理化学研究所（1976）の試験で用いられた土壌の特性
（各々について湛水条件および畑地条件で使用した）

	栃木土壌（火山灰土壌）		高知土壌（鉱質土壌）	
土性	埴壌土		壌土	
	湛水条件	畑地条件	湛水条件	畑地条件
最大容水量	―	107	―	77
粘土（%）	34	34	21	34
全炭素量（%）	9.2	9.2	2.5	1.2
pH	6.4	6.4	―	―
陽イオン交換容量（meq/100 g 乾土）	―	―	10.1	17.8

理化学研究所（1976）の試験で得られた初期フェノブカルブに対する割合（%）

	栃木土壌						高知土壌					
	湛水条件			畑地条件			湛水条件			畑地条件		
	6 日	14 日	30 日	6 日	14 日	30 日	6 日	14 日	30 日	6 日	14 日	30 日
BPMC	52.8	37.1	8.70	55.3	12.5	3.32	77.4	68.3	30.8	57.1	40.7	33.3

なお、土壌での生分解、加水分解の機序別の半減期に関する情報は得られなかった。

④底質

底質中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったため、底質中での総括分解半減期は、「②-1　水中生分解」にて精査した農薬抄録（2014）の高知土壌、湛水条件（好気的条件）での半減期（18.6 日）の 4 倍である 74.4 日とする。

なお、底質での生分解、加水分解の機序別の半減期に関する情報は得られなかった。

２ 【付属資料】

２-１ 物理化学的性状等一覧

収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

出典）

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

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

MITI (1986a)：フェノブカルブ（被験物質番号 K-716）のコイにおける濃縮度試験. 既存化学物質点検, 1986.

MITI (1986b)：Ｎ－メチルカルバミン酸－２－ｓｅｃ－ブチルフェニルの微生物による分解度試験. 既存化学物質点検, 1986.

MOE (2003)：化学物質の生態リスク初期評価 第 2 巻, フェノブカルブ. 2003.

PhysProp：Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-07-12 閲覧).

農薬抄録（2014)：農林水産消費安全技術センター. 農薬抄録, BPMC. 平成 26 年 7 月 14 日改訂. 2014.

農薬ハンドブック（2016)：日本植物防疫協会. 農薬ハンドブック. 2016 年版（改訂新版). 2016

２-２ その他

特になし。

別添資料

情報源略称	詳細等
EHC	WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
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」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SPARC	SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果
農薬抄録	農林水産消費安全技術センター:「農薬抄録」
農薬ハンドブック	日本植物防疫協会:「農薬ハンドブック 2016年版 (改訂新版)」

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

融点

収集データ

	情報源名	項目	値	統一表記 [℃]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅱ）	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	融点	62.99 °C	62.99	MPBPWIN				(Q)SAR	Mean Value	2C	×	×			
2		融点	62.99 °C	62.99	MPBPWIN				(Q)SAR	Mean Value	2C	×	×			
3	MOE初期評価	融点	26.5～31 °C	28.75							2B	×	×		[通産省化学品安全課監修，化学品検査協会編，化審法の既存化学物質安全性点検データ集，日本化学物質安全・情報センター(1992).]	p.54-1
4		融点	26.5～31 °C	28.75							2B	×	×		財団法人化学物質評価研究機構 (2004): 化学物質安全性点検 DATA.	p.1
5		融点	26.5～31 °C	28.75					-		2B	×	×		[通産省化学品安全課監修，化学品検査協会編，化審法の既存化学物質安全性点検データ集，日本化学物質安全・情報センター(1992).]	p.54-1
6		融点	26.5～31 °C	28.75					-		2B	×	×		財団法人化学物質評価研究機構 (2004): 化学物質安全性点検 DATA.	p.1
7	PhysProp	融点	31.5 °C	31.5							2B	○	×			Melting Pt :
8		融点	31.5 °C	31.5					-		2B	○	×			Melting Pt
9	既存点検事業	融点	26.5～31 °C	28.75							4A	○	×			
10		融点	26.5～31 °C	28.75							4A	×	×		添付資料	
11		融点	26.5～31 °C	28.75							4A	×	×		添付資料	
12		融点	26.5～31 °C	28.75					-		4A	×	×		添付資料	
13		融点	26.5～31 °C	28.75					-		4A	×	×		添付資料	
	農薬抄録	融点	31.4℃	31.4	「GLP」OECD TG 102,示差走査熱量分析法(DSC)						1A		○		農薬抄録（平成26年7月14日改訂）	p3 資料No.PC-3
	農薬ハンドブック	融点	31.4℃	31.4									○		一般社団法人日本植物防疫協会(2016)農薬ハンドブック2016年版	p37

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

沸点

収集データ

	情報源名	沸点	統一表記[℃]	101.325 kPaにおける沸点[℃]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅱ）	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	289.22 °C	289.22			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method	2C	×	×			
2		289.22 °C	289.22			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method	2C	×	×			
3	MOE初期評価	112～113 °C	112.5									4A	×	○		[通産省化学品安全課監修，化学品検査協会編，化審法の既存化学物質安全性点検データ集，日本化学物質安全・情報センター(1992).]	p.54-1
4		112～113 °C	112.5	147.6591	0.2 mmHg							2B	×	○		財団法人化学物質評価研究機構 (2004): 化学物質安全性点検 DATA.	p.1
5		112～113 °C	112.5							-		4A	×	○		[通産省化学品安全課監修，化学品検査協会編，化審法の既存化学物質安全性点検データ集，日本化学物質安全・情報センター(1992).]	p.54-1
6		112～113 °C	112.5	147.6591	0.2 mmHg					-		2B	×	○		財団法人化学物質評価研究機構 (2004): 化学物質安全性点検 DATA.	p.1
7	PhysProp	112.5 °C	112.5	147.6675	2.00E-02 mmHg							2B	○	×			Boiling Pt :
8		112.5 °C	112.5	147.6675	2.00E-02 mmHg					-		2B	○	×			Boiling Pt
9	既存点検事業	112～113 °C	112.5	147.6591	0.2 mmHg							4A	○	○			
10		112～113 °C	112.5	147.6591	0.2 mmHg							4A	×	○		添付資料	
11		112～113 °C	112.5	147.6591	0.2 mmHg							4A	×	○		添付資料	
12		112～113 °C	112.5	147.6591	0.2 mmHg					-		4A	×	○		添付資料	
13		112～113 °C	112.5	147.6591	0.2 mmHg					-		4A	×	○		添付資料	
	農薬抄録	240℃で分解のため測定不能				「GLP」OECD TG 103,示差熱分解法（DTA）						1A		×		農薬抄録（平成26年7月14日改訂）	p3 資料No.PC-4
	農薬ハンドブック	112～113 °C	112.5	147.6675	2.7 Pa									×		一般社団法人日本植物防疫協会（2016）農薬ハンドブック2016年版	p37

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

蒸気圧

収集データ

	情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20℃における蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅱ）	備考	文献	ページ番号等
1	EHC	48 mPa	0.048	0.048	20 °C							2B	○	×			Annex I. Names and structures and some physical and chemical properties of carbamate pesticides
2		48 mPa	0.048	0.048	20 °C					-		2B	○	×			Annex I. Names and structures and some physical and chemical properties of carbamate pesticides
3	MOE初期評価	1.42E-4 mmHg	1.89E-02	0.013421	25 °C							2B	×	×		Watanabe, T (1983). [MPBPWIN v1.40]	p.54-1
4		0.00143 mmHg	0.190651	0.135153	25 °C							2B	×	×		Handbook of Vapor Pressure (1994): Gulf Publ Co.	p.1
5		1.42E-04 mmHg	1.89E-02	0.013421	25 °C					-		2B	×	×		Watanabe, T (1983). [MPBPWIN v1.40]	p.54-1
6		0.00143 mmHg	0.190651	0.135153	25 °C					-		2B	×	×		Handbook of Vapor Pressure (1994): Gulf Publ Co.	p.1
7	PhysProp	0.0001425 mmHg	1.90E-02	0.013468	25 °C					experimental result		2B	○	×		WATANABE,T (1993)	Vapor Pressure:
8		0.0001425 mmHg	1.90E-02	0.013468	25 °C					experimental result		2B	○	×		WATANABE,T (1993)	Vapor Pressure
	農薬抄録	9.9E-03 Pa	9.90E-03	0.0099	20℃	EPAガス飽和法								○		農薬抄録（平成26年7月14日改訂）	p3 資料No.PC-5
		8.5E-02 Pa	8.50E-02	0.022929	40℃	EPAガス飽和法								×		農薬抄録（平成26年7月14日改訂）	p3 資料No.PC-5
	農薬ハンドブック	9.9E-03 Pa	9.90E-03	0.0099	20℃									○		一般社団法人日本植物防疫協会(2016)農薬ハンドブック2016年版	p37

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

水溶解度

収集データ

	情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ)	キースタディー該非 (評価Ⅰ)	キースタディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1	EHC	0.06%	610	532.782816	30 °C								2B	×	×			Annex I. Names and structures and some physical and chemical properties of carbamate pesticides
2		0.06%	610	532.782816	30 °C						-		2B	×	×			Annex I. Names and structures and some physical and chemical properties of carbamate pesticides
3	MOE初期評価	420 mg/L	420	420	20 °C								2B	○	○		Tomlin, C (1994). [WSKOWWIN v1.40]	p.54-1
4		680 mg/L	680										4A	×	×		財団法人化学物質評価研究機構 (2004): 化学物質安全性点検 DATA.	p.1
5		420 mg/L	420	420	20 °C						-		2B	○	○		Tomlin, C (1994). [WSKOWWIN v1.40]	p.54-1
6		680 mg/L	680								-		4A	×	×		財団法人化学物質評価研究機構 (2004): 化学物質安全性点検 DATA.	p.1
7	PhysProp	420 mg/L	420	420	20 °C						experimental result		2B	○	○		TOMLIN,C (1994)	Water Solubility:
8		420 mg/L	420	420	20 °C						experimental result		2B	○	○		TOMLIN,C (1994)	Water Solubility
9	既存点検事業	600 mg/L	600										4A	○	×			
10		≧100 g/L	100000										4A	×	×			
11		≧100 g/L	100000										4A	×	×			
12		≧100 g/L	100000										4A	×	×			
13		≧100 g/L	100000										4A	×	×			
14		680 mg/L	680										4A	×	×		添付資料	
15		600 mg/L	600										4A	×	×		添付資料	
16		680 mg/L	680								-		4A	×	×			
17		600 mg/L	600								-		4A	×	×		添付資料	
	農薬抄録	420 mg/L	420	420	20℃		OECD TG 105, フラスコ法に準ずる						1A		○		農薬抄録（平成26年7月14日改訂）	p3 資料No.PC−7
	農薬ハンドブック	420 mg/L	420	420											○		一般社団法人日本植物防疫協会 (2016) 農薬ハンドブック2016年版	p37

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

logPow

収集データ

	情報源名	値	統一表記	測定条件温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅱ）	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	2.8609	2.8609			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2		2.8609	2.8609			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
3	MOE初期評価	2.78	2.78									2B	○	×		Hansch, C et al. (1995), [KOWWIN v1.66]	p.54-1
4		2.78	2.78									2B	○	×		Hansch, C., A. Leo and D. Hoekman (1995): Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. American Chemical Society.	p.1
5		2.78	2.78							-		2B	○	×		Hansch, C et al. (1995), [KOWWIN v1.66]	p.54-1
6		2.78	2.78							-		2B	○	×		Hansch, C., A. Leo and D. Hoekman (1995): Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. American Chemical Society	p.1
7	PhysProp	2.78	2.78							experimental result		2B	○	×		HANSCH,C ET AL. (1995)	Log P (octanol-water):
8		2.78	2.78							experimental result		2B	○	×		HANSCH,C ET AL. (1995)	Log P (octanol-water)
9	既存点検事業	2.79	2.79			その他,OECD法				experimental result		4A	×	×			
10		2.79	2.79			その他,OECD法による				experimental result		4A	×	×			
	農薬抄録	2.67	2.67	25℃		EPAフラスコ振とう法								○		農薬抄録（平成26年7月14日改訂）	p3 資料No.PC-9
	農薬ハンドブック	2.67	2.67	25℃										○		一般社団法人日本植物防疫協会(2016)農薬ハンドブック2016年版	p37

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

Koc

収集データ

	情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅱ）	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	Koc	232.6 L/kg[2B以上の値を用いて推定（2C）]	232.6								(Q)SAR		2C	○	×			
	農薬抄録	Koc	147～216	181.5	25℃			OECD TG 106						1A		○		農薬抄録（平成26年7月14日改訂）	p4　資料No.PC−10
	農薬ハンドブック	Koc	147～216	181.5	25℃											○		一般社団法人日本植物防疫協会（2016）農薬ハンドブック2016年版	p37

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

ヘンリー係数

収集データ

	情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa･m^3/mol]	測定条件温度	pH	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅱ）	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	0.00413 Pa･m^3/mol	0.00413					その他,Experimental Data from PhysProp Database	VP/WSOL	4A	×	×			
2		8.40E-003 Pa･m^3/mol	0.0084					(Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	○	○			
3		0.00413 Pa･m^3/mol	0.00413	20℃				その他,Experimental Data from PhysProp Database	VP/WSOL	2C	×	×	蒸気圧（1.43E-04 mm Hg, 25℃）と水溶解度（420 mg/L, 20℃）の比を算出。25℃での値（0.00599 Pa-m3/mole）が得られたので、これを20℃の値に換算。		
4		8.40E-003 Pa･m^3/mol	0.0084	25℃				(Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	×	○			
5	PhysProp	0.0000000591 atm･m^3/mol	0.005988308					estimated by calculation	VP/WSOL	4C	×	×		VP/WSOL	Henry's Law Constant:
6		0.0000000591 atm･m^3/mol	0.005988308					estimated by calculation	VP/WSOL	4C	×	×		VP/WSOL	Henry's Law Constant
7	農薬ハンドブック		0.00488565						VP/WSOL				評価Ⅱでの採用値（蒸気圧：0.0099Pa、水溶解度：420mg/L）から算出		

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

蓄積性

収集データ

	情報源名	判定	濃度区番号	被験物質設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅱ）	備考	文献	ページ番号等
1	MOE初期評価		2	2 µg/L	6 週	BCF	-	<1.9～4.0	1.9					experimental result		2B	×	×		通産省化学品安全課監修，化学品検査協会編，化審法の既存化学物質安全性点検データ集，日本化学物質安全・情報センター(1992).	p.54-1
2			1	20 µg/L	6 週	BCF	-	<0.2～3.3	0.2					experimental result		2B	×	×		通産省化学品安全課監修，化学品検査協会編，化審法の既存化学物質安全性点検データ集，日本化学物質安全・情報センター(1992).	p.54-1
3	既存点検事業		2	2 µg/L	2 週	BCF		<=1.9	1.9	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
4			2	2 µg/L	2 週	BCF		<=1.9	1.9	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
5			2	2 µg/L	2 週	BCF	-	<=1.9	1.9	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
6			2	2 µg/L	2 週	BCF	-	<=1.9	1.9	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
7			2	2 µg/L	3 週	BCF		4	4	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	○	○			
8			2	2 µg/L	3 週	BCF		2.5	2.5	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
9			2	2 µg/L	3 週	BCF	-	4	4	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	○	○			
10			2	2 µg/L	3 週	BCF	-	2.5	2.5	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
11			2	2 µg/L	4 週	BCF		<=1.9	1.9	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
12			2	2 µg/L	4 週	BCF		3.6	3.6	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
13			2	2 µg/L	4 週	BCF	-	<=1.9	1.9	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
14			2	2 µg/L	4 週	BCF	-	3.6	3.6	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
15			2	2 µg/L	6 週	BCF		2.1	2.1	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
16			2	2 µg/L	6 週	BCF		3.2	3.2	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
17			2	2 µg/L	6 週	BCF	-	2.1	2.1	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
18			2	2 µg/L	6 週	BCF	-	3.2	3.2	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
19			1	20 µg/L	2 週	BCF	-	<=0.2	0.2	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
20			1	20 µg/L	2 週	BCF	-	<=0.2	0.2	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
21			1	20 µg/L	2 週	BCF		<=0.2	0.2	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
22			1	20 µg/L	2 週	BCF		<=0.2	0.2	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
23			1	20 µg/L	3 週	BCF	-	2.7	2.7	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
24			1	20 µg/L	3 週	BCF	-	2.3	2.3	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
25			1	20 µg/L	3 週	BCF		2.7	2.7	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
26			1	20 µg/L	3 週	BCF		2.3	2.3	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
27			1	20 µg/L	4 週	BCF		2.7	2.7	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
28			1	20 µg/L	4 週	BCF		3.3	3.3	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
29			1	20 µg/L	4 週	BCF	-	2.7	2.7	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
30			1	20 µg/L	4 週	BCF	-	3.3	3.3	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

蓄積性

収集データ

	情報源名	判定	濃度区番号	被験物質設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅰ）	キースタディー該非（評価Ⅱ）	備考	文献	ページ番号等
31			1	20 μg/L	6 週	BCF		2.9	2.9	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
32			1	20 μg/L	6 週	BCF		1.4	1.4	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
33			1	20 μg/L	6 週	BCF	-	2.9	2.9	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			
34			1	20 μg/L	6 週	BCF	-	1.4	1.4	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	×			

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

解離定数

収集データ

	情報源名	項目	値	統一表記	測定条件温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非（評価Ⅱ）	備考	文献	ページ番号等
1	SPARC	pKa	10.79	算出不可			SPARC				(Q)SAR	SPARC	○			
	農薬抄録	pKa	解離しない		20℃		「GLP」, OECD TG 112, 電気伝導度法						○		農薬抄録（平成26年7月14日改訂）	p3　資料No.PC-6

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

環境中運命

収集データ

	情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記_半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非
1	EPI Suite	大気	OHラジカルとの反応		10.9874E-12 cm^3/molecule/sec	5E+05 molecule/cm^3	11.682 時間		1.46031578	25 °C		AOPWIN				
2		水域	生分解									BIOWIN	Weeks-Months			
3	MOE初期評価	水域	生分解（好気的）					0～1 %[BODから算出した分解度]				記載なし				
4		大気	OHラジカルとの反応		10.9874E-12 cm^3/molecule/sec	5E+06 molecule/cm^3	11.682 時間		0.14603158	25 °C		AOPWIN				
5	PhysProp	大気	OHラジカルとの反応		0.000000000010987 cm^3/molecule/sec	5E+05 molecule/cm^3			1.46036895	25 °C						
6	既存点検事業	水域	生分解					1 %[BODによる分解度]		25±1 °C		化審法TG		yes (incl. certificate)		
7		水域	生分解					0 %[BODによる分解度]		25 °C		化審法TG		yes (incl. certificate)		
8		水域	生分解					0 %[BODによる分解度]		25 °C		化審法TG		yes (incl. certificate)		
9		水域	生分解					1 %[TOC法による分解度]		25 °C		化審法TG		yes (incl. certificate)		
10		水域	生分解					1 %[TOC法による分解度]		25±1 °C		化審法TG		yes (incl. certificate)		
11		水域	生分解					0 %[TOC法による分解度]		25±1 °C		化審法TG		yes (incl. certificate)		

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

環境中運命

収集データ

	情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記_半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非
12		水域	生分解					2 %[HPLC法による分解度]		25±1 °C		化審法TG		yes (incl. certificate)		
13		水域	生分解					3 %[HPLC法による分解度]		25 °C		化審法TG		yes (incl. certificate)		
14		水域	生分解					0 %[HPLC法による分解度]		25 °C		化審法TG		yes (incl. certificate)		
	農薬抄録	水域	光分解				60.5日		60.5	25 °C		「GLP」, 9農産第5089号				
		水域	光分解				468日		468	25 °C		「GLP」, 9農産第5089号				
		水域	光分解				36.8日		36.8	25 °C		「GLP」, 9農産第5089号				
		水域	光分解				285日		285	25 °C		「GLP」, 9農産第5089号				
		水域	加水分解				1年以上		365	25 °C	4	「GLP」, OECD TG 111				
		水域	加水分解				566日		566	25 °C	7	「GLP」, OECD TG 111				
		水域	加水分解				7.8日		7.8	25 °C	9	「GLP」, OECD TG 111				

基本情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記_半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非
	土壌	全分解				8.6日		8.62550131	30℃	6.4					
	土壌	全分解				5.8日		5.82263048	30℃	6.4					
	土壌	全分解				18.6日		18.5820985	30℃						
	土壌	全分解				16.0日		16.0122338	30℃						

参考情報

優先通し番号	158
公示名称	Ｎ－メチルカルバミン酸２－ｓｅｃ－ブチルフェニル（別名フェノブカルブ又はＢＰＭＣ）
CAS登録番号	3766-81-2
CAS名称	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-, 1-(N-methylcarbamate)
その他番号	
その他名称	

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	既存点検事業		1%	O_2 consumption	-(２-ｓｅｃ-ブチルフェノール)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result	-			-
2			0%	O_2 consumption	-(２-ｓｅｃ-ブチルフェノール)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result	-			-
3			0%	O_2 consumption	-(２-ｓｅｃ-ブチルフェノール)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result	-			-
4			1%	DOC removal	-(２-ｓｅｃ-ブチルフェノール)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result	-			-
5			1%	DOC removal	-(２-ｓｅｃ-ブチルフェノール)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result	-			-
6			0%	DOC removal	-(２-ｓｅｃ-ブチルフェノール)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result	-			-
7			2%	Test mat. analysis	-(２-ｓｅｃ-ブチルフェノール)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result	-			-
8			2%→3%	Test mat. analysis	-(２-ｓｅｃ-ブチルフェノール)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result	-			-
9			2%→0%	Test mat. analysis	-(２-ｓｅｃ-ブチルフェノール)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result	-			-