

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15

16
17
18
19
20
21
22
23
24

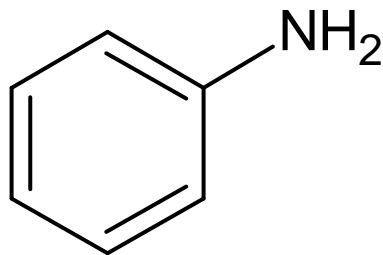
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

人健康影響に係る評価

物理化学的性状等の詳細資料

アニリン

優先評価化学物質通し番号 54



平成 30 年 9 月

経済産業省

目 次

1		
2	1 評価対象物質の性状	1
3	1-1 物理化学的性状及び濃縮性	1
4	1-2 分解性	1
5	2 【付属資料】	5
6	2-1 物理化学的性状等一覧	9
7	2-2 その他	10
8		
9		

1 評価対象物質の性状

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

1-1 物理化学的性状及び濃縮性

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

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	-	93.13	-	93.13
融点	-	-6.2 ¹⁻⁵⁾	測定値	-6.2 ¹⁾
沸点	-	184.4 ²⁾	101.3 kPa での測定値	184.4 ¹⁾
蒸気圧	Pa	40 ²⁾	20 での測定値	40 ¹⁾
水に対する溶解度	mg/L	3.5 × 10 ^{4 2)}	20 での測定値	3.5 × 10 ^{4 1)}
1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)	-	<u>0.91</u> ²⁾	pH7.5、25 での非解離体に対する測定値	0.90 ¹⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	<u>0.205</u> ^{2,6-8)}	測定値	0.106 ¹⁾
有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)	L/kg	410 ^{1,2,9)}	5 土壌での測定値	410 ¹⁾
生物濃縮係数 (BCF)	L/kg	<u>2.6</u> ^{1,3,9)}	ゼブラフィッシュでの測定値	3.16 ¹⁰⁾
生物蓄積係数 (BMF)	-	1	logPow と BCF から設定 ¹¹⁾	1
解離定数 (pKa)	-	4.6 ^{3,8)}	測定値	- ¹²⁾

平成 29 年度第 1 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 5 月 25 日）で了承された値

- | | |
|------------------|---------------------------|
| 1) ECB (2004) | 7) NITE(2007) |
| 2) ECHA | 8) PhysProp |
| 3) EPA (2009) | 9) Mackay (2006) |
| 4) IUCLID (2000) | 10) EPI Suite (2012) |
| 5) MOE(2002) | 11) MHLW, METI, MOE(2014) |
| 6) HSDB | 12) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない |

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

融点

評価 Ⅱで採用した値 (-6.2)は、信頼性の定まった情報源¹⁾である ECB (2004)、ECHA、EPA (2009)、IUCLID (2000)、MOE (2002)に記載された値である。ECHA 及び EPA (2009)で測定値と記載されており、評価 Ⅱにおいてもこの値 (-6.2)を用いる。

沸点

評価 Ⅱで採用した値 (184.4)は、信頼性の定まった情報源である CCD、ECB (2004)、ECHA に記載された標準圧力 (101.3 kPa)での値である。上記以外に標準圧力での値として、184.1 (CRC)、184 ~ 186 (NITE (2007))もあるが、ECHA のみが測定値と記載している。このため、

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

1 評価 においてもこの値 (184.4)を用いる。

2

3 蒸気圧

4 評価 で採用した値 (40 Pa)は、信頼性の定まった情報源である ECB (2004)、ECHA、HSDB、
5 Mackay (2006)、MOE (2002)及び NITE (2007)に記載された 20 での値である。20 の値とし
6 て 50 Pa (IUCLID (2000))、59.7 Pa (Mackay (2006));回帰式による 20 内挿値)、42.9 Pa (Mackay
7 (2006));回帰式による 20 内挿値)もあるが、40 Pa は ECHA で測定値と記載されている。こ
8 のため、評価 においてもこの値 (40 Pa)を用いる。

9

10 水に対する溶解度

11 評価 で採用した値 (3.5×10^4 mg/L)は、ECB (2004)に記載された 20 での値である。20
12 の測定値として、 3.5×10^4 mg/L (ECHA)、 3.6×10^4 mg/L (EPA (2009))、25 の測定値として、
13 3.6×10^4 mg/L (MITI(1993a)、PhysProp)、 3.622×10^4 mg/L、 3.867×10^4 mg/L (ともに Mackay
14 (2006))との記載もある。これらの 25 の測定値から 20 の値を 3.5×10^4 mg/L とすることに
15 問題ないと考えられるため、評価 においてもこの値 (3.5×10^4 mg/L)を用いる。

16

17 logPow

18 評価 で採用した値 (0.90)は、ECB (2004) に記載された値 (20 、フラスコ振とう法)であ
19 る。他には、0.89 (測定 pH : 5.6、フラスコ振とう法) (Mackay (2006))、0.89 (測定 pH : 7.4、フ
20 ラスコ振とう法) (Mackay (2006))、0.91 (測定 pH : 7.5、測定温度 : 25 、GLP 試験) (ECHA)、
21 0.93 (測定 pH : 7、フラスコ振とう法) (Mackay (2006))、0.98 (測定 pH : 7.5、フラスコ振とう
22 法) (Mackay (2006))が記載されている。アニリンは解離性物質であり、後述のように、pH 5.6、
23 7.0、7.4 及び 7.5 ではそれぞれ、90.9%、99.6%、99.8%及び 99.9%が非解離体として存在す
24 るため、pH 5.6 の値を除いて上記の値は非解離体に対する値と考えることができる。評価 に
25 においては測定 pH と温度が明らかな GLP 試験で得られた値 (0.91)を非解離種に対する値とし
26 て用いる。

27

28 ヘンリー係数

29 評価 で採用した値 ($0.106 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$)は、ECB (2004)に記載された値である。ECHA、EPA
30 (2009)、HSDB、NITE (2007)及び PhysProp ではいずれも $0.205 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$ と記載されてお
31 り、ECHA、NITE (2007)及び PhysProp ではこの値が測定値であるとも記載されている。こ
32 のため、評価 においては $0.205 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$ を用いる。

33

34 Koc

35 評価 で採用した値 (410 L/kg)は、ECB (2004)、ECHA、Mackay (2006)において記載されて
36 いる値である。この値は、以下の 2 土壌を用い、土壌と滅菌蒸留水溶液の容積比=1 : 5、48 時
37 間、20 で振とうの条件で Koc を測定した Pillai ら (1982)¹の試験での測定値であり、Koc は、
38 Hagerstow 土壌で 130 L/kg (滅菌)及び 310 L/kg (非滅菌)、Palouse 土壌で 410 L/kg (滅菌)及び 910
39 L/kg (非滅菌)であった。

40

41 Pillai ら(1982) の研究で用いられた土壌の性状

土壌	Hagerstow 埴壤土	Palouse シルト質壤土
pH	6.6	5.1

¹ Pillai, P., et al. (1982) Chemosphere 11: 299-317.

有機物含量, %	2.5	3.4
粘土含量, %	34	25
シルト含量, %	42	58
カチオン交換容量, meq/100 g	10	22
表面積, m ² /g	25	90
圃場含水量, %	31.3	32.0
粘土鉱物	パーミキュライト、カオリナイト	モンモリロナイト

1
2 ECB (2004)は、「アニリンは吸着前に一部分解されるため、非滅菌土壌で決定された Koc は
3 過大に推定されていると思われる。」として、Koc 値として 410 L/kg を採用している。

4
5 上記以外の値として、HSDB、Mackay (2006)では、Gawlik ら(1998)¹が以下の 5 土壌を用い、
6 OECD TG 106 (土壌と 0.01 M CaCl₂ 溶液の容積比=1 : 5、24 時間、室温で振とう)で測定した
7 値 (EUROSOIL 1 : 497.7 L/kg ; EUROSOIL 2 : 43.8 L/kg ; EUROSOIL 3 : 120.3 L/kg ;
8 EUROSOIL 4 : 109.8 L/kg ; EUROSOIL 5 : 195.0 L/kg)を記載している。

9
10 Gawlik ら(1998) の研究で用いられた土壌の性状

土壌	起源	粘土 (%)	有機炭素 (%)	pH (0.01 M CaCl ₂)	土性
EUROSOIL 1	シチリア島(イタリア)	75.0	1.3	5.7	埴土
EUROSOIL 2	ペロポネソス(ギリシャ)	22.6	3.7	7.4	シルト質壤土
EUROSOIL 3	ウェールズ(イギリス)	17.0	3.45	5.2	壤土
EUROSOIL 4	ノルマンディ (フランス)	20.3	1.55	6.5	シルト
EUROSOIL 5	シュレースヴィヒ=ホルシュタイン(ドイツ)	6.0	9.25	3.2	壤質砂土

11
12 また、Mackay (2006)では、Gawlik ら(2000)² が以下の 5 土壌を用い、OECD TG 106 (土壌
13 と 0.01 M CaCl₂ 溶液の容積比=1 : 5、24 時間、室温で振とう)で測定した値 (EUROSOIL 1 :
14 242.1 L/kg ; EUROSOIL 2 : 31.8 L/kg ; EUROSOIL 3 : 19.0 L/kg ; EUROSOIL 4 : 27.4 L/kg ;
15 EUROSOIL 5 : 136.8 L/kg)を記載している。

16
17 Gawlik ら(2000) の研究で用いられた土壌の性状

土壌	起源	粘土 (%)	有機炭素 (%)	pH (0.01 M CaCl ₂)	土性
EUROSOIL 1	シチリア島(イタリア)	75.0	3.29	5.7	埴土
EUROSOIL 2	ペロポネソス(ギリシャ)	22.6	2.39	7.2	シルト質壤土
EUROSOIL 3	ウェールズ(イギリス)	17.0	3.32	5.9	壤土
EUROSOIL 4	ノルマンディ (フランス)	20.3	1.36	6.8	シルト
EUROSOIL 5	シュレースヴィヒ=ホルシュタイン(ドイツ)	6.0	4.43	3.2	壤質砂土

18
¹ Gawlik, BM., et al. (1998) Chemosphere 36: 2903-2919.

² Gawlik, BM., et al. (2000) Chemosphere 41: 1337-1347.

さらに、Mackay (2006)では、Liら(2001)¹ が以下の5土壌を用い、バッチ平衡化法(振とう時間: 24時間、温度: 23±3)で測定した値(Toronto: 34.7 L/kg; Chalmers: 15.8 L/kg; Drummer: 10.0 L/kg; Bloomfield: 20.0 L/kg; Okoboji: 11.0 L/kg)も記載している。

Liら(2001)の研究で用いられた土壌の性状

土壌	pH ^a	砂 (%)	シルト (%)	粘土 (%)	有機炭素 (%)	CEC ^b (cmol _e /kg)
Toronto	4.4	11.9	67.6	20.5	1.34	11.2
Chalmers	6.5	11.1	72.8	16.0	1.17	13.0
Drummer	7.2	13.0	66.0	21.2	2.91	26.5
Bloomfield	6.4	81.4	11.0	7.6	0.36	4.4
Okoboji	7.4	31.8	36.2	32.0	4.98	36.2

a: 土壌の重量と水の容積が1:1の懸濁液での測定値

b: カチオン交換容量

以上のように、Pillaiら(1982)、Gawlikら(1998, 2000)及びLiら(2001)により報告されたKocは10.0~497.7 L/kgの範囲(Pillaiら(1982)の非滅菌土壌データを除く)であるが、上記のECB(2004)のコメントを考慮し、評価でもPillaiら(1982)のPalouse土壌(滅菌)で測定された410 L/kgが妥当と判断し、この値を用いる。

BCF

評価で採用した値(3.16 L/kg)は、BCFBAF v3.01でlogPow(0.90)を用いて推計した値である。ECB(2004)、EPA(2009)、Mackay(2006)では、Zokら(1991)²により測定されたゼブラフィッシュでの値2.6 L/kgが記載されている。評価においてはこの値(2.6 L/kg)を用いる。なお、Zokらの試験は、pH 8.1±0.1、26±1で行われており、採用したBCFは、非解離種に対する値と考えられる。

BMF

評価で採用した値は、logPow(0.90)及びBCF(3.16 L/kg)から化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス(以下、「技術ガイダンス」という。MHLW, METI, MOE(2014))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、評価においては、logPow(0.91)及びBCF(2.6 L/kg)から技術ガイダンス(MHLW, METI, MOE(2014))に従って1を用いる。

pKa

アニリンの酸解離定数(pKa)として、Mackay(2006)、NITE(2007)、PhysProp及びEPA(2009)で4.6と記載されており、PhysProp及びEPA(2009)で測定値と記載されている。このため、評価では、この値(4.6)を用いる。

アニリンの共役酸のpKaが4.6の場合、pH 5.0、6.0、7.0、8.0、9.0、10.0の水中では、それぞれ71.5%、96.2%、99.6%、100.0%、100.0%及び100.0%が非解離種として存在する。

¹ Li, H., et al. (2001) Chemosphere 44: 627-635.

² Zok, S., et al. (1991) Sci. Total Environ. 109/110: 411-421.

1 1-2 分解性

2 表 1-2 にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

3
4

表 1-2 分解に係るデータのまとめ

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	0.15
		オゾンとの反応	10.2
		硝酸ラジカルとの反応	223
水中	水中における総括分解半減期		7.2
	機序別の半減期	生分解	-
		加水分解	-
		光分解	-
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	7
		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	28
		加水分解	-

5 平成 29 年度第 1 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
6 ー会議（平成 29 年 5 月 25 日）で了承された値

- 7 1) HSDB 6) Lyons ら (1984)
8 2) Mackay (2006) 7) Tor ough ら (2002)
9 3) NIST 8) ECB (2004)
10 4) EPI Suite (2012) 9) EPA (1994)
11 5) Hwang ら (1987) NA: 情報が得られなかったことを示す

12
13
14 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
15 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。

16

1 大気

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

4 -1 OH ラジカルとの反応の半減期

5 大気中におけるOHラジカルとの反応速度定数に関しては、 1.2×10^{-10} cm³/molecule/s (23 、
6 閃光光分解 - 共鳴ケイ光法) (Mackay (2006)、NIST)、 1.18×10^{-10} cm³/molecule/s (23 、相対法)
7 (Mackay (2006)、NIST)、 1.11×10^{-10} cm³/molecule/s (25) (ECB (2004)、Mackay (2006)、
8 PhysProp)、 1.10×10^{-10} cm³/molecule/s (25 、閃光光分解 - 共鳴ケイ光法) (HSDB、Mackay
9 (2006))が記載されている。反応速度定数として、 1.10×10^{-10} cm³/molecule/s を採用し、大気中
10 OHラジカル濃度を技術ガイダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従い 5×10^5 molecule/cm³ と
11 して、半減期を 0.15 日と算出した。評価 ではこの値 (0.15 日)を用いる。

12 -2 オゾンとの反応の半減期

13 大気中におけるオゾンとの反応速度定数に関しては、 1.12×10^{-18} cm³/molecule/s (23 、直
14 接法) (NIST)が記載されている。この反応速度定数を採用し、大気中オゾン濃度を技術ガイダン
15 ス (MHLW, METI, MOE(2014))に従い 7×10^{11} molecule/cm³ として、半減期を 10.2 日と算出し
16 た。評価 ではこの値 (10.2 日)を用いる。

17 -3 硝酸ラジカルとの反応の半減期

18 大気中における硝酸ラジカルとの反応速度定数に関しては、 1.5×10^{-16} cm³/molecule/s (EPI
19 Suite(2012))が記載されている。この反応速度定数を採用し、大気中硝酸ラジカル濃度を技術ガ
20 イダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従い 2.4×10^8 molecule/cm³ として、半減期を 223 日と
21 算出した。評価 ではこの値 (223 日)を用いる。

22 水中

23 水中での総括分解半減期に加えて、生分解、加水分解及び光分解の各機序に関する情報が得
24 られた。

25 -1 総括半減期

26 Hwangら (1987)¹は、蒸留水及び米国 Georgia 州の Skidaway 川河口域の河川水 (表層 10cm
27 から採水)中のアニリンの分解を調べた。150 mL 容の石英フラスコ中のアニリン (初濃度 25 μ
28 g/L、¹⁴C 標識)に太陽光を照射 (北緯 32°)した場合、夏期 (29 、照度: 5.2 Einstein/m²/h)と
29 冬期 (14 、照度: 2.9 Einstein/m²/h)、水中のアニリンの一次分解 (分解物への構造変化)の半
30 減期は 27 時間 (夏期)及び 71 時間 (冬期)であった。一方、暗所では、173 時間 (夏期)で、冬
31 期は半減期を計算できるほどの分解は見られなかった (半減期はいずれも「昼間時間」)。さら
32 に、蒸留水中と河川水中での分解半減期を比較から、フミン質による光増感の分解への寄与は
33 ないと結論している。

34 Torängら (2002)²は、Rhine 川に放流する BASF 下水処理場の 1.2 km 上流から 25.8 km 下
35 流までの河川水中 (放流地点での川幅 300 m、水深約 3.5 m、pH 7.8)のアニリン濃度を測定
36 し、物質収支に基づいて分解速度と半減期を推定した。21.9 と 14.7 の異なる水温の日に実施
37 された野外試験におけるアニリンの一次分解 (構造変化)の 1 次速度定数は、ともに 1.8 1/day
38 で、河川水中での総括分解半減期は 9 時間 (0.4 日)であった。さらに、このアニリンの消失に
39 揮発、加水分解及び光分解はほとんど寄与しないと結論している。

40 以上の結果及び以下の生分解、加水分解、光分解に関する情報から、実環境下の水中でのア

¹ Hwang, H.M. et al. (1987) Wat. Res., 21(3): 309-316.

² Toräng, L. et al. (2002) Chemosphere, 49: 1257-1265.

1 アニリンの分解には生分解が非常に大きな寄与をすると判断されることから、水中での総括分解
2 半減期は Hwang ら (1987)の暗所での半減期 173 時間 (7.2 日)を採用する。

3 -2 生分解の半減期

4 Lyons ら (1984)¹は、米国 New Jersey 州の富栄養状態の池の水 (pH 6.9 ~ 7.1)を用いて、暗
5 所、20 の条件下でアニリンの分解の測定と分解経路の確認を行い、約 6 日の一次分解半減期
6 を報告している。また、揮発と自動酸化はほとんど寄与しないと結論している。

7 Torång ら (2002)は、野外試験と同時にバッチ試験 (15または21、暗所、11日間)を実施し、
8 アニリンは半減期 1.5日未満で一次分解したと報告している。また、添加された初期¹⁴Cの50%
9 が生分解 (無機化)の直接的な証拠である¹⁴CO₂として、23%がバイオマス中に、そして12%が
10 溶存有機生成物 (生合成)として回収され、塩化水銀が添加された対照区では、試験期間中にア
11 ニリンと¹⁴Cの濃度はいずれも有意な減少を示さなかったことから、水中でのアニリン消失の
12 支配プロセスは生分解であると結論している。

13 Howard (1989)では、富栄養池の水中でアニリンは6日の半減期で生分解されるとの記載があ
14 るが、嫌氣的条件下での値であった。

15 なお、アニリンは OECD TG 301C の分解度試験における標準易分解物質であり、OECD TG
16 301C に準拠した GLP 試験では、14 日間の BOD 分解度は 70、67、68% (N の無機化を NO₂
17 とした場合)、87、83、85% (N の無機化を NH₃ とした場合)、TOC 分解度は 98、99、99%、
18 HPLC 分解度は 100、100、100%であった (MITI(1993b))。

19 -3 加水分解の半減期

20 EPA (2009)において、pH 6.0、30、48 時間の条件下で 11.3%の消失が測定されたと記載
21 されているが、アニリンは加水分解を受ける基を有していない。ECB (2004)では、「分子構造
22 から、加水分解は環境条件下では想定されない」と記載されており、Torång ら (2002)でも、
23 「加水分解反応を受ける基がないため、アニリンの加水分解は非常に遅く、pH 5 ~ 9、15 で
24 半減期は 50 年超と推定される」と記載されている。

25 -4 光分解の半減期

26 Lyons ら (1984)は、表層水中のアニリンの消失への光分解の寄与率は、生分解よりも少なく
27 とも 1 桁低いと結論している。

28 Torång ら (2002)は、Hwang ら (1987)の試験では、蒸留水中のアニリンの光分解による半
29 減期は、夏期で 33「昼間時間」、冬期で 53「昼間時間」と測定されているが、この半減期は 150
30 mL 容の石英フラスコに太陽光を照射して得られた値であり、水深 3.5m の濁った Rhine 川で
31 の実際の光分解半減期は、10m⁻¹の典型的な光減衰係数を仮定すると約 30 倍長くなり、生分解
32 がアニリンの最も重要な消失プロセスであると結論している。

33 土壌

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

36 -1 生分解の半減期

37 ECB (2004)では、Süß ら (1978)の試験結果を基に、暴露評価に用いる土壌中での生分解半
38 減期を 350 日と設定している。この試験では、¹⁴C 標識アニリンを用い、1 mg/kg の初濃度で
39 4 種の土壌での無機化が 10 週間に亘って調べられた。10 週間後に 16.2 ~ 26.3%のアニリンが、
40 異なる土壌で ¹⁴CO₂ に無機化された。無機化の速度は 1 週間後に最大となり、2 週間までに全
41 生成 ¹⁴CO₂ の 50%が検出され、その後は、試験終了時まで分解速度は約 1%/週で一定であっ
42 た。また、¹⁴C の 57.3 ~ 67.4%が 4 種の土壌で検出された。この結果から、ECB (2004)は、試
43

¹ Lyons, CD. et al. (1984) Appl. Environ. Microbiol., 48: 491-496.

1 験開始時にアニリン (20%程度)は比較的急速に分解されるが、残りの 80%程度のアニリンは
2 フミン質と不可逆的な共有結合し、分解速度がかなり減少すると判断し、1 週間当たり約 1%の
3 分解速度から、半減期を 350 日と外挿している。

4 EPA (1994)では、土壌中の多くの微生物は炭素源、窒素源としてアニリンを利用でき、種々
5 の単離土壌微生物により、アニリンの44.2%が10日で、そして20日までにさらに12%がCO₂に
6 分解されること、そして、土壌フミン質と結合したアニリンは酸化を受けると記載されている。
7 さらに、アニリンのCO₂への無機化の半減期は、温度、湿度、照度が管理され、揮発物質(分
8 解生成物を含む)捕集装置付きの石英製の土壌モデルエコシステム¹に充填された粘土質土壌に
9 おいて4日で、環境条件下では、土壌中アニリンの半減期は1週間以内と記載されている。

10 Howard (1989)でも、滅菌土壌中で土壌はアニリンの酸化を触媒するとの記述がある。

11 以上から、評価 Ⅱでは、土壌中の生分解半減期として7日を用いる。

12 13 -2 加水分解の半減期

14 加水分解反応を受ける基はないと判断し、評価 Ⅱでは半減期は設定しない。

15 16 底質

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

19 -1 生分解の半減期

20 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、土壌中の生分解
21 半減期の 4 倍である 28 日とする。

22 -2 加水分解の半減期

23 加水分解反応を受ける基はないと判断し、評価 Ⅱでは半減期は設定しない。

24

¹ Figge, K., J. Klahn and J. Koch (1983) Regul. Toxicol. Pharmacol. 3: 199-215.

2 【付属資料】

2-1 物理化学的性状等一覽

収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

出典)

CCD: Richard J. Lewis Sr., Gessner Goodrich Hawley. Hawley's Condensed Chemical Dictionary. 15th ed., 2007.

CRC: Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 94th ed., CRC Press, 2013-2014.

ECB (2004): European Chemicals Bureau. European Union Risk Assessment Report, aniline, PL-1 50.

ECHA: European Chemicals Agency. Information on Chemicals – Registered substances. <http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>, (2017-02-02 閲覧).

EPA (1994): USEPA. OPPT Chemical Fact Sheets, Aniline Fact Sheet: Support Document (CAS No. 62-53-3), December, 1994

EPA (2009): USEPA. Screening-Level Hazard Characterization. Monocyclic Aromatic Amines Category, September, 2009

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

Figge, K., J. Klahn and J. Koch (1983) Testing of chemicals by evaluation of their distribution and degradation patterns in an environmental standard system. Regulatory Toxicology and Pharmacology 3: 199-215.

Gawlik, BM., et al. (1998) Application of the European reference soil set (EUROSOILS) to a HPLC-screening method for the estimation of soil adsorption soils coefficients of organic compounds. Chemosphere 36: 2903-2919.

Gawlik, BM., et al. (2000) Estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds by HPLC screening using the second generation of the European reference soil set. Chemosphere 41: 1337-1347.

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

HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, (2017-02-23 閲覧).

Hwang, HM. et al. (1987) Degradation of aniline and chloroanilines by sunlight and microbes in estuarine water, Wat. Res., 21(3): 309-316.

IUCLID(2000): EU ECB. IUCLID Dataset, aniline. 2000.

Li, H., et al. (2001) Role of pH in partitioning and cation exchange of aromatic amines on water-saturated soils. Chemosphere 44: 627-635.

- 1 Lyons, CD. et al. (1984) Mechanisms and pathways of aniline elimination from aquatic
2 environments, Appl. Environ. Microbiol., 48: 491-496.
- 3 Mackay(2006): Mackay, D., Shiu, W. Y., Ma, K. C., & Lee, S. C. Handbook of physical-
4 chemical properties and environmental fate for organic chemicals. 2nd ed. Volume IV, CRC
5 press, 2006.
- 6 MHLW, METI, MOE(2014): 化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイド
7 ンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.
- 8 MITI(1993a): アニリン (被験物質番号 No.K-1139) の物理化学性状の測定. 既存化学物質点
9 検, 1993.
- 10 MITI(1993b): アニリン (被験物質番号 No.K-1139) の微生物による分解度試験. 既存化学物
11 質点検, 1993.
- 12 MOE(2002): 化学物質の環境リスク評価 第1巻, アニリン. 2002.
- 13 NIST: NIST. Chemistry WebBook. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>, (2017-02-09 閲覧).
- 14 NITE(2007): 化学物質の初期リスク評価書, アニリン. Ver. 1.0, No. 63, 2007.
- 15 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-02-02 閲覧).
- 16 Pillai, P., et al. (1982) Soil-catalyzed oxidation of aniline. Chemosphere 11: 299-317.
- 17 Toräng, L. et al. (2002) Laboratory shake flask batch tests can predict field biodegradation
18 of aniline in the Rhine, Chemosphere, 49: 1257-1265.
- 19 Zok, S., et al. (1991) Bioconcentration, metabolism and toxicity of substituted anilines in
20 the zebrafish (*Brachydanio rerio*). Sci. Total Environ. 109/110: 411-421.

21

22 2-2 その他

23 特になし。

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

基本情報

優先通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	-6 °C	-6							2B	x			p.191
2 CRC	融点	-6 °C[- 6.0(0.1)]	-6							2B	x		Frenkel, M., Chirico, R. D., Diky, V. V., Kazakov, A., and Muzny, C. D., ThermoData Engine, NIST Standard Reference Database 103b, Version 5.0 (Pure Compounds, Binary Mixtures, and Chemical Reactions, TDE-SOURCE Version 5.1), National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD – Boulder, CO, 2010, <http://www.nist.gov/srd/nist103b.cfm>..	Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
3	融点	-6.02 °C	-6.02							2B	x			Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
4 EPI Suite	融点	-6.16 °C	-6.16	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	x			
5 HSDB	融点	-6.0 °C	-6							2B	x			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
6 IUCLID	融点	-6.2 °C	-6.2							4A	x			p.19
7 Mackay	融点	-6.02 °C	-6.02							2B	x		Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, CRC Press, LLC. Boca Raton, FL..	p.3243
8 Merck	凝固点	-6 °C	-6							2B	x	Solidif -6°		Monograph Number: 0000659
9 MOE初期評価	融点	-6.2 °C	-6.2							2B	x		Richardson, M.L. et al. (1992-1995) The Dictionary of Substances and their Effects, Royal Society of Chemistry.	p.1
10 NITE初期リスク評価書	融点	-6 °C	-6							2B	x		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ..	p.2
11 PhysProp	融点	-6 °C	-6							2B	x			p.1
12 REACH登録情報	融点	-6.2 °C	-6.2		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	x			Exp Key Melting point/freezing point.001
13 SIDS	融点	-6.2 °C	-6.2	その他, There is no information about the applied method			key study			2A				p.8
14 USHPV	融点	-6.2 °C	-6.2					measured		2B	x			p.8

基本情報

優先通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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!におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
15 既存点検事 業	融点	-6 ° C[267K(- 6)]	-6	-	-	-	-	-		4A	×	試験番号 81139K 化学 品検査協会 化学品安全 センター久留米研究所	化学大辞典(共立出版株式会社).	K1139

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	184 °C	184									4A	x			p.191
2 CCD	184.4 °C	184.4	184.4	760 mmHg	-	-	-	-	-		2B	x			Aniline
3 CRC	184.1 ° C[184.1(0. 4)]	184.1	184.1	760 mmHg	-	-	-	-	-		2B	x		Frenkel, M., Chirico, R. D., Diky, V. V., Kazakov, A., and Muzny, C. D., ThermoData Engine, NIST Standard Reference Database 103b, Version 5.0 (Pure Compounds, Binary Mixtures, and Chemical Reactions, TDE-SOURCE Version 5.1), National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD – Boulder, CO, 2010, <http://www.nist.gov/srd/nist103b.cfm>..	Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
4	184.17 °C	184.17			-	-	-	-	-		4A	x			Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
5	184.17 °C	184.17			-	-	-	-	-		4A	x			Flammability of Chemical Substances (Section 16)
6 EPI Suite	183.99 °C	183.99			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	x			
7 HSDB	184.1 °C	184.1									4A	x			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
8 IUCLID	183.5 ~ 184 °C	183.75									4A	x			p.19
9 Mackay	184.1 °C	184.1			-	-	-	-	-		4A	x		Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics, 84th Edition, CRC Press, LLC. Boca Raton, FL..	p.3243
10 Merck	184 ~ 186 ° C	185			-	-	-	-	-		4A	x			Monograph Number: 0000659
11 MOE初期評 価	184 °C	184			-	-	-	-	-		4A	x		化学辞典 (1994) 東京化学同人.	p.1
12 NITE初期リ スク評価書	184 ~ 186 ° C	185	185.0103	101300 Pa	-	-	-	-	-		2B	x		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ..	p.2
13 PhysProp	184.1 °C	184.1									4A	x			p.1
14 REACH登録 情報	184.4 °C	184.4	184.4103	1013 hPa		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	x			Exp Key Boiling point.001
15 SIDS	184.4 °C	184.4	184.4103	1013 hPa	その他,There is no information about the applied method			key study			2A				p.8

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
16 USHPV	184 °C	184			-	-	-	-	experimental result	-	4A	×	-		p.8
17 既存点検事 業	184 ° C[457K(18 4)]	184			-	-	-	-	-	-	4A	×	試験番号 81139K 化学 品検査協会 化学品安全 センター 留米研究所	化学大辞典（共立出版株式会社）.	K1139

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	0.7 mmHg	93.32566	66.1588	25 °C							2B	×			p.191
2 CRC	0.09 kPa	90	63.80124	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×	-		Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
3 EPI Suite	104 Pa[2B 以上の値を用いて推定 (2C)]	104	73.72587	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
4 HSDB	6.67E-1 mmHg	88.92602	63.03989	25 °C							2B	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE:
5	1 mmHg	133.3224	49.11441	35 °C							4A	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
6 HSDB	0.3 mmHg	39.99671	39.99671	20 °C							2B	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
7 IUCLID	0.5 hPa	50	50	20 °C							4A	×			p.19
8 Mackay	133.3 Pa	133.3	28.73483	43.7 °C	その他,static method, measured range 43.7–183.9°C	-	-	-	-		4A	×	-	Kahlbaum, G.W.A. (1898) Studien uber dampfspannkraftmessungen. II. Z. Phys. Chem. 26, 577–658..	p.3243
9	89.6 Pa	89.6	63.51768	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-Antoine eq.	4C	×	89.60 (calculated-Antoine eq., Stephenson & Malanowski 1987) log (P_L/kPa) = 6.40627 – 1702.817/(-70.155 + T/K); temp range 304–458 K (Antoine eq.-I, Stephenson & Malanowski 1987) log (P_L/kPa) = 8.1019 – 2728/(T/K); temp range 273–338 K (Antoine eq.-II,	Stephenson, R.M., Malanowski, S. (1987) Handbook of Thermodynamics of Organic Compounds. Elsevier Science Publishing Co. Inc., New York..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
10	86.7 Pa	86.7	61.46186	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-Cox eq.	4C	×	86.70 (calculated-Cox eq., Chao et al. 1990) $\log(P/\text{mmHg}) = 124.3764 - 7.1676 \times 10^3/(T/K) - 42.763 \cdot \log(T/K) + 1.7336 \times 10^4 \cdot (T/K) + 5.7138 \times 10^4 \cdot (T/K)^2$; temp range 267–699 K (vapor pressure eq., Yaws 1994)	Chao, J., Gadalla, N.A.M., Gammon, B.E., Marsh, K.N., Rodgers, A.S., Somayajulu, G.R., Wilhoit, R.C. (1990) Thermodynamic and thermophysical properties of organic nitrogen compounds. Part I. Methanamine, ethanamine, 1-and 2-propanamine, benzenamine, 2-,3-, and 4-methylbenzenamine. J. Phys. Chem. Ref. Data 19(6), 1547–1615. Yaws, C.L. (1994) Handbook of Vapor Pressure, Vol. 1 C1 to C4 Compounds, Vol. 2. C5 to C7 Compounds, Vol. 3, C8 to C28 Compounds. Gulf Publishing Co., Houston, TX..	p.3243
11	89.52 Pa	89.52	63.46096	25 °C	-	-	-	-	その他(推定値), calculated by formula, Dreisbach 1955; quoted, Riddick et al. 1986	-	4C	×	89.52 (calculated by formula, Dreisbach 1955; quoted, Riddick et al. 1986) $\log(P/\text{mmHg}) = 7.24179 - 1674.3/(200.0 + t/°C)$; temp range 90–250°C (Antoine eq. for liquid state, Dreisbach 1955)	Dreisbach, R.R. (1955) Physical Properties of Chemical Compounds. No. 15, Am. Chem. Soc. Adv. Chem. Series. American Chemical Society, Washington D.C.. Riddick, J.A., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents. 4th Edition. John Wiley and Sons, New York..	p.3243
12	6806 Pa	6806	74.90717	102.59 °C	その他, ebulliometry, measured range 102.59–185.15°C	-	-	-	-	-	4A	×	6806* (102.59°C, ebulliometry, measured range 102.59–185.15°C, McDonald et al. 1959) $\log(P/\text{mmHg}) = 7.25375 - 1684.35/(201.175 + t/°C)$, temp range 103–185°C (Antoine eq., ebulliometry, McDonald et al. 1959)	McDonald, R.A., Shrader, S.A., Stull, D.R. (1959) Vapor pressures and freezing points of 30 organics. J. Chem. Eng. Data 4, 311–313..	p.3243
13	133.3 Pa	133.3	61.24979	31.55 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-thermodynamic properties, temp range 31.55–184.40°C	4C	×	133.3* (31.55°C, calculated-thermodynamic properties, temp range 31.55–184.40°C, Hatton et al. 1962) $\log(P/\text{mmHg}) = [-0.2185 \times 11307.6/(T/K)] + 8.221995$; temp range 34.8–422.4°C (Antoine eq., Weast 1972–73)	Hatton, W.E., Hildenbrand, D.L., Sinke, G.C., Stull, D.R. (1962) Chemical thermodynamic properties of aniline. J. Chem. Eng. Data 7, 229–231.. Weast, R.C., Ed. (1972–73) Handbook of Chemistry and Physics. 53rd Edition, CRC Press, Cleveland, OH..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
14	88.3 Pa	88.3	62.5961	25 °C	-	-	-	-	外挿(補 外)	extrapolated-Antoine eq	4C	×	88.30 (extrapolated-Antoine eq., Boublik et al. 1973) $\log(P/\text{mmHg}) = 7.3201 - 1731.515/(205.049 + t/^\circ\text{C})$; temp range 102.6–185.2°C (Antoine eq. from reported expll. data of McDonald et al.1959, Boublik et al. 1973) $\log(P/\text{mmHg}) = [-0.2185 \times 11307.6/(T/K)]$	Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1973) The Vapour Pressures of Pure Substances. Elsevier, Amsterdam, The Netherlands.. McDonald, R.A., Shrader, S.A., Stull, D.R. (1959) Vapor pressures and freezing points of 30 organics. J. Chem. Eng. Data 4, 311–313.. Weast, R.C., Ed. (1972–73) Handbook of Chemistry and Physics. 53rd Edition, CRC Press, Cleveland, OH..	p.3243
15	82.71 Pa	82.71	58.63334	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-Cox eq.	4C	×	82.71 (calculated-Cox eq., Chao et al. 1983) $\log(P/\text{atm}) = [1 - 457.025/(T/K)] \times 10^{-4} \cdot (T/K) - 6.64936 \times 10^{-4} \cdot (T/K) + 5.25455 \times 10^{-7} \cdot (T/K)^2$; temp range: 267.3–695.0 K (Cox eq., Chao et al. 1983)	Chao, J., Lin, C.T., Chung, T.H. (1983) Vapor pressure of coal chemicals. J. Phys. Chem. Ref. Data 12, 1033–1063..	p.3243
16	85.71 Pa	85.71	60.76004	25 °C	-	-	-	-	外挿(補 外)	extrapolated-regression of tabulated data, temp range 34.8–184.4°C	4C	×	85.71* (extrapolated-regression of tabulated data, temp range 34.8–184.4°C Stull 1947) $\log(P/\text{mmHg}) = 7.57170 - 1941.7/(230 + t/^\circ\text{C})$ (Antoine eq., Dreisbach & Martin 1949)	Stull, D.R. (1947) Vapor pressure of pure substances: Organic compounds. Ind. Eng. Chem. 39(4), 517–560.. Dreisbach, R.R., Martin, R.A. (1949) Physical data on some organic compounds. Ind. Eng. Chem. 41, 2875–2878..	p.3243
17	10351 Pa	10351	74.23745	112.92 °C	その他, ebulliometry, measured range 112.92–183.93°C	-	-	-	-	-	4A	×	-	Dreisbach, R.R., Shrader, S.A. (1949) Vapor pressure-temperature data on some organic compounds. Ind. Eng. Chem. 41, 2879–2880..	p.3243
18	80±6 Pa	80	56.71221	25 °C	その他, gas saturation-HPLC/UV	-	-	-	-	-	2B	×	-	Sonnefeld, W.J., Zoller, W.H., May, W.E. (1983) Dynamic coupled-column liquid chromatographic determination of ambient temperature vapor pressures of polynuclear aromatic hydrocarbons. Anal. Chem. 55, 275–280..	p.3243
19	Mackay	40 Pa	40	20 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×	-	Verschueren, K. (1983) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals. 2nd. Edition, Van Nostrand Reinhold, New York, NY.	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
20	88 Pa	88	62.38343	25 °C	-	-	-	-	外挿(補外)	extrapolated-Antoine eq.	4C	x	88.0, 48.24 (extrapolated-Antoine eq., Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 6.43196 – 1722.154/(205.002 + t/°C); temp range 102.6–185.2°C (Antoine eq. from reported exptl. data, Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 5.68977 – 1234.569/(151.207 + t/°C); temp ra	Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1984) The Vapour Pressures of Pure Substances. Second Edition, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands..	p.3243
21	48.24 Pa	48.24	34.19746	25 °C	-	-	-	-	外挿(補外)	extrapolated-Antoine eq.	4C	x	88.0, 48.24 (extrapolated-Antoine eq., Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 6.43196 – 1722.154/(205.002 + t/°C); temp range 102.6–185.2°C (Antoine eq. from reported exptl. data, Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 5.68977 – 1234.569/(151.207 + t/°C); temp ra	Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1984) The Vapour Pressures of Pure Substances. Second Edition, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands..	p.3243
22	65.18 Pa	65.18	46.20627	25 °C	-	-	-	-	-	-	2B	x	-	Daubert, T.E., Danner, R.P. (1985) Data Compilation of Properties of Pure Compounds. pp. 450. American Institute of Chemical Engineers..	p.3243
23	89.3 Pa	89.3	63.305	25 °C	-	-	-	-	外挿(補外)	extrapolated-Antoine eq.	4C	x	89.30 (extrapolated-Antoine eq., Dean 1985, 1992) log (P/mmHg) = 7.32010 – 1731.515/(206.049 + t/°C); temp range 102–185°C (Antoine eq., Dean 1985, 1992) log (P/kPa) = 5.69066 – 1941.7/(230.0 + t/°C), temp range not specified (Antoine eq., Riddick et al.	Dean, J.D., Editor (1985) Lange's Handbook of Chemistry. 13th ed. McGraw-Hill, New York.; Dean, J.D., Ed. (1992) Lange's Handbook of Chemistry. 14th ed. McGraw-Hill, Inc., New York.; Riddick, J.A., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents. 4th Edition. John Wiley and Sons, New York..	p.3243
24	MOE初期評価 40 Pa(40 Pa (0.3 mmHg) (20 °C))	40	40	20 °C	-	-	-	-	-	-	2B	x	-	IPCS (1989) International Chemical Safety Cards (1989).	p.1

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
25 NITE初期リス ク評価書	40 Pa	40	40	20 °C	-	-	-	-	-	-	2B	x	-	IPCS, International Programme on Chemical Safety (2001) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva. (http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtasht/index.htm から引用).	p.2
26 PhysProp	0.49 mmHg	65.32796	46.31116	25 °C	-	-	-	-	experimental result	-	2B	x	-	DAUBERT,TE & DANNER,RP (1985).	p.1
27 REACH登録 情報	0.4 hPa	40	40	20 °C	-	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result	-	4A	x	-	Ullmann.Aniline.1974,Ullmann's Enzyklopädie der Technischen Chemie. 4th Ed., volume 2, 203. - cited in EU Risk Assessment Report, Aniline CAS 62-53-3, 2004.	Exp Key Vapour pressure.001
28 REACH登録 情報	0.4 hPa	40	40	20 °C	no data	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result	-	4A	x	-	1993	Exp Key Vapour pressure.002
29 SIDS	0.4 hPa	40	40	20 °C	その他,There is no information about the applied method	-	-	key study	-	-	2A	-	-	-	p.8
30 USHPV	0.49 mmHg	65.32796	46.31116	25 °C	-	-	-	-	experimental result	-	2B	x	-	-	p.8

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20 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	評価にお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 CCD	[soluble]	単位換算不 可				-	-	-	-	-		3	x			Aniline
2 CRC	[soluble]	単位換算不 可				-	-	-	-	-		3	x	s H_2_O		Physical Constants of Organic Compounds (Section 3) etc
3	3.38 mass %	34982.4053	32656.3006	25 °C		-	-	-	-	-		2B	x		Riddick, J. A., Bunger, W. B., and Sakano, T. K., Organic Solvents, Fourth Edition, John Wiley & Sons, New York, 1986..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
4	35 g/Kg	35000	32672.7253	25 °C		-	-	-	-	-		2B	x		Riddick, J. A., Bunger, W. B., and Sakano, T. K., Organic Solvents, Fourth Edition, John Wiley & Sons, New York, 1986..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
5 EPI Suite	32040 mg/L[2B以 上の値を用 いて推定 (2C)]	32040	29909.5463	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	x			
6 HSDB	36000 mg/L	36000	33606.2318	25 °C								2B	x			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
7	3.5 %(3.5 parts/100 parts water at 25 deg C)	35000	32672.7253	25 °C								2B	x			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
8	6.4 %(6.4 parts/100 parts water at 90 deg C)	64000	29020.4394	90 °C								4A	x			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
9 IUCLID	36 g/L	36000	36000	20 °C	8.8[8.8 at 36 g/l and 20 degree C]							4A	x			p.19
10 Mackay	36650 mg/L	36650	34213.0109	25 °C		-	-	-	-	-		2B	x		Hill, A.E., Macy, R.J. (1924) Ternary system. II. Silver perchlorate, aniline and water. J. Am. Chem. Soc. 46, 1132..	p.3243
11	34200 mg/L	34200	31925.9202	25 °C		-	-	-	-	その 他.selected		2B	x		Yaws, C.L., Yang, H.-C., Hopper, J.R., Hansen, K.C. (1990) Organic chemicals: water solubility data. Chem. Eng. July, 115-118..	p.3243
12	36070 mg/L	36070	33671.5772	25 °C		-	-	-	-	-		2B	x		Seidell, A. (1941) Solubilities of Organic Compounds. Van Nostrand Co., New York..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20 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	評価にお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
13	38670 mg/L	38670	36098.6939	25 °C		その他,shake flask-residue volume method	-	-	-	-	-	2B	x		Booth, H.S., Everson, H.E. (1948) Hydrotropic solubilities. Solubilities in 40 per cent sodium xylenesulfonate. Ind. Eng. Chem. 40(8), 1491-1493..	p.3243
14	36220 mg/L	36220	33811.6032	25 °C		その他,shake flask- interferometry	-	-	-	-	-	2B	x		Donahue, D.J., Bartell, F.E. (1952) The boundary tension at water- organic liquid interfaces. J. Phys. Chem. 56, 480-484..	p.3243
15	34100 mg/L	34100	31832.5695	25 °C		-	-	-	-	-	-	2B	x		Stephen, H., Stephen, Y. (1963) Solubilities of Inorganic and Organic Compounds. Vol. 1 and 2, Pergamon Press, Oxford, U.K..	p.3243
16	36600 mg/L	36600	34166.3356	25 °C		-	-	-	-	-	-	2B	x		Kenaga, E.E. (1980) Predicted bioconcentration factors and soil sorption coefficients of pesticides and other chemicals. Ecotoxicol. Environ. Saf. 4, 26-38..	p.3243
17	34000 mg/L	34000	31739.2189	25 °C		-	-	-	-	-	-	2B	x		Verschueren, K. (1983) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals. 2nd. Edition, Van Nostrand Reinhold, New York, NY..	p.3243
18	56900 mg/L	56900	53116.5163	25 °C		-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-activity coeff. γ by UNIFAC	4C	x		Fu, J.-K., Luthy, R.G. (1985) Pollutant Sorption to Soils and Sediments in Organic/Aqueous Solvent Systems. EPA/600/3- 85/050. Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA.. Fu, J.-K., Luthy, R.G. (1986) Aromatic compound solubility in solvent/water mixtures. J. Chem. Eng. 112, 328- 345..	p.3243
19	33800 mg/L	33800	31552.5176	25 °C		-	-	-	-	その 他,selected	-	2B	x		Riddick, J.A., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents. 4th Edition. John Wiley and Sons, New York..	p.3243
20	Merck 1 g/28.6 mL	34965.035		25		-	-	-	-	-	-	4A	x	One gram dissolves in 28.6 ml water, 15.7 ml boil. water		Monograph Number: 0000659
21	1 g/15.7 mL	63694.2675		25		-	-	-	-	-	-	4A	x	One gram dissolves in 28.6 ml water, 15.7 ml boil. water		Monograph Number: 0000659

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20 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	評価にお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
22 MOE初期評 価	34000 mg/L	34000	34000	20 °C		-	-	-	-	-	-	2B	x	-	IPCS (1989) International Chemical Safety Cards (1989).	p.1
23 NITE初期リ スク評価書	36 g/L	36000	33606.2318	25 °C		-	-	-	-	-	-	2B	x	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY. (http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm から引用).	p.2
24 PhysProp	36000 mg/L	36000	33606.2318	25 °C		-	-	-	-	experiment al result	-	2B	x	-	DAUBERT,TE & DANNER,RP (1985).	p.1
25 REACH登録 情報	35 g/L	35000	35000	20 °C	[no data available for pH.]	no data	no data	2: reliable with restrictions	key study	experiment al result	-	4A	x	-	Budavari S.Aniline.1989,The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals, p. 111, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co. , -cited in EU Risk Assessment Report, Aniline CAS 62-53-3, 2004.	Exp Key Water solubility.001
26 SIDS	35 g/L	35000	35000	20 °C		その他,There is no information about the applied method			key study			2A	x			p.8
27 USHPV	36000 mg/L	36000	36000	20 °C		-	-	-	-	experiment al result	-	2B	x	-		p.8
28 既存点検事 業	36 g/L	36000	33606.2318	25 °C		OECD TG 105	-	-	-	experiment al result	-	1B		試験番号 81139K 化 学品検査協会 化学品安 全センター久留米研究所		K1139

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 CRC	0.9	0.9	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	Sangster, J., J. Phys. Chem. Ref. Data, 18, 1111, 1989..	Octanol-Water Partition Coefficients (Section 16)
2 EPI Suite	1.08	1.08			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
3 HSDB	0.9	0.9									2B	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT-
4 IUCLID	0.91	0.91									4A	×			p.19
5 Mackay	0.9	0.9			その他,shake flask-UV	-	-	-	-		2B	×	-	Briggs, G.G. (1981) Theoretical and experimental relationships between soil adsorption, octanol-water partition coefficients, water solubilities, bioconcentration factors and Parachor. J. Agric. Food Chem. 29, 1050-1059..	p.3243
6	0.79	0.79			その他,HPLC-RV correlation-ALPM	-	-	-	-		2B	×	0.79, 0.96 (HPLC-RV correlation-ALPM, Garst & Wilson 1984)	Garst, J.E., Wilson, W.C. (1984) Accurate, wide range, automated, high-performance liquid chromatographic method for the estimation of octanol/water partition coefficients. I: Effect of chromatographic conditions and procedure variables on accuracy and reproducibility of the method. J. Pharm. Sci. 73, 1616-1623..	p.3243
7	0.96	0.96			その他,HPLC-RV correlation-ALPM	-	-	-	-		2B	×	0.79, 0.96 (HPLC-RV correlation-ALPM, Garst & Wilson 1984)	Garst, J.E., Wilson, W.C. (1984) Accurate, wide range, automated, high-performance liquid chromatographic method for the estimation of octanol/water partition coefficients. I: Effect of chromatographic conditions and procedure variables on accuracy and reproducibility of the method. J. Pharm. Sci. 73, 1616-1623..	p.3243
8	0.85	0.85			その他,shake flask	-	-	-	-		2B	×	0.90, 0.98, 0.85 (shake flask, Hansch & Leo 1979)	Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, New York..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
9	0.9	0.9			その他,shake flask	-	-	-	-		2B	×	0.90, 0.98, 0.85 (shake flask, Hansch & Leo 1979)	Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, New York..	p.3243
10	0.89	0.89		7.4	その他,shake flask-UV at pH 7.4	-	-	-	-		2B	×	-	El Tayar, N., van de Waterbeemd, H., Grylaki, M., Testa, B., Trager, W.F. (1984) The lipophilicity of deuterium atoms. A comparison of shake-flask and HPLC (high performance liquid chromatography) methods. Int. J. Pharm. 19, 271- 281..	p.3243
11	0.99	0.99			-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-activity coeff. γ from UNIFAC	4C	×	-	Campbell, J.R., Luthy, R.G. (1985) Prediction of aromatic solute partition coefficient using the UNIFAC group contribution model. Environ. Sci. Technol. 19, 980-985..	p.3243
12	0.81	0.81			その他,HPLC- k' correlation	-	-	-	-		2B	×	0.81, 1.08 (HPLC-k' correlation, Eadsforth 1986)	Eadsforth, C.V. (1986) Application of reverse-phase HPLC for the determination of partition coefficients. Pestic. Sci. 17, 311- 325..	p.3243
13	1.08	1.08			その他,HPLC- k' correlation	-	-	-	-		2B	×	0.81, 1.08 (HPLC-k' correlation, Eadsforth 1986)	Eadsforth, C.V. (1986) Application of reverse-phase HPLC for the determination of partition coefficients. Pestic. Sci. 17, 311- 325..	p.3243
14	0.91	0.91			その他,RP- HPLC-RT correlation	-	-	-	-		2B	×	-	Eadsforth, C.V. (1986) Application of reverse-phase HPLC for the determination of partition coefficients. Pestic. Sci. 17, 311- 325..	p.3243
15	0.98	0.98		7.5	その他,shake flask-UV at pH 7.5	-	-	-	-		2B	×	-	Martin-Villodre, A., Pla-Delfina, J.M., Moreno, J., Perez-Buendia, M.D., Miralles, J., Collado, E.F., Sanchez- Moyano, E., Del Pozo, A. (1986) Studies on the reliability of a bihyperbolic functional absorption model. I. Ring-substituted anilines. J. Pharmacokinet. Biopharm. 14, 615-633..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
16	1.03	1.03			その他,RP- HPLC-k' correlation	-	-	-	-	-	2B	×	-	D'Amboise, M., Hanai, T. (1982) Hydrophobicity and retention in reversed phase liquid chromatography. J. Liq. Chromatogr. 5(2), 229-244..	p.3243
17	0.93	0.93			その他,HPLC method average	-	-	-	-	-	2B	×	-	Ge, J., Liu, W., Dong, S. (1987) Determination of partition coefficient with chemically bonded omega- hydroxysilica as HPLC column packing. Sepu 5(3), 182-185..	p.3243
18	0.78	0.78			その他,HPLC- k' correlation	-	-	-	-	-	2B	×	-	Miyake, K., Kitaura, F., Mizuno, N., Terada, H. (1987) Determination of partition coefficient and acid dissociation constant by highperformance liquid chromatography on porous polymer gel as stationary phase. Chem. Pharm. Bull. 35(1), 377-388..	p.3243
19	1.18	1.18			-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-activity coeff. γ from UNIFAC	4C	×	-	Banerjee, S., Howard, P.H. (1988) Improved estimation of solubility and partitioning through correction of UNIFAC-derived activity coefficients. Environ. Sci. Technol. 22, 839-841..	p.3243
20	0.94±0.006	0.94			その他,shake flask/slow- stirring-GC	-	-	-	-	-	2B	×	-	De Bruijn, J., Busser, F., Seipnen, W., Hermens, J. (1989) Determination of octanol/water partition coefficients for hydrophobic organic chemicals with the "slow- stirring" method. Environ. Toxicol. Chem. 8, 499-512..	p.3243
21	0.9	0.9			-	-	-	-	その 他,recommend ed	-	2B	×	-	Sangster, J. (1989) Octanol-water partition coefficients of simple organic compounds. J. Phys. Chem. Ref. Data 18(3), 1111-1230.. Sangster, J. (1993) LOGKOW Database, Sangster Research Lab., Montreal, Canada..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
22	0.942±0.01	0.942			その他,shake flask/stir-flask method by BRE; RITOX	-	-	-	-	-	2B	×	-	Brooke, D.N., Nielsen, I., De Bruijn, Hermens, J. (1990) An interlaboratory evaluation of the stir-flask method for the determination of octanol-water partition coefficients (LOG P_OW). Chemosphere 21, 119-133..	p.3243
23	0.94±0.006	0.94			その他,RITOX, inter- laboratory studies	-	-	-	-	-	2B	×	-	Brooke, D.N., Nielsen, I., De Bruijn, Hermens, J. (1990) An interlaboratory evaluation of the stir-flask method for the determination of octanol-water partition coefficients (LOG P_OW). Chemosphere 21, 119-133..	p.3243
24	0.9	0.9			その他,shake flask-GC	-	-	-	-	-	2B	×	-	Alcorn, C.J., Simpson, R.J., Leahy, D.E., Peters, T.J. (1993) Partition and distribution coefficients of solutes and drugs in brush border membrane vesicles. Biochem. Pharm. 45, 1775-1782..	p.3243
25	1.21	1.21			その他,HPLC- k' correlation, different combinations of stationary and mobile phases under isocratic conditions	-	-	-	-	-	2B	×	-	Makovskaya, V., Dean, J.R., Tomlinson, W.R., Comber, M. (1995) Determination of octanol-water partition coefficients using gradient liquid chromatography. Anal. Chim. Acta 315, 183-192..	p.3243
26	0.89	0.89			その他,HPLC- k' correlation, different combinations of stationary and mobile phases under isocratic conditions	-	-	-	-	-	2B	×	-	Makovskaya, V., Dean, J.R., Tomlinson, W.R., Comber, M. (1995) Determination of octanol-water partition coefficients using gradient liquid chromatography. Anal. Chim. Acta 315, 183-192..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
27	0.9	0.9			その他,HPLC- k' correlation	-	-	-	-		2B	×		Hammers, W.E., Meurs, G.J., De Ligny, C.L. (1982) Correlations between liquid chromatographic capacity ratio data on Lichrosorb RP-18 and partition coefficients in the octanol-water system. J. Chromatogr. 247, 1-13..	p.3243
28	0.87	0.87			その他,HPLC- k' correlation, different combinations of stationary and mobile phases under isocratic conditions	-	-	-	-		2B	×		Makovskaya, V., Dean, J.R., Tomlinson, W.R., Comber, M. (1995) Determination of octanol-water partition coefficients using gradient liquid chromatography. Anal. Chim. Acta 315, 183-192..	p.3243
29	1.09	1.09			その他,HPLC- k' correlation, different combinations of stationary and mobile phases under isocratic conditions	-	-	-	-		2B	×		Makovskaya, V., Dean, J.R., Tomlinson, W.R., Comber, M. (1995) Determination of octanol-water partition coefficients using gradient liquid chromatography. Anal. Chim. Acta 315, 183-192..	p.3243
30	0.92	0.92			その他,shake flask-dialysis tubing- HPLC/UV, both phases	-	-	-	-		2B	×		Andersson, J.T., Schröder, W. (1999) A method for measuring 1-octanol-water partition coefficients. Anal. Chem. 71, 3610-3614..	p.3243
31	0.88	0.88			その他,microemul sion electrokinetic chromatograp hy-retention factor correlation	-	-	-	-		2B	×		Jia, Z., Mei, L., Lin, F., Huang, S., Killion, R.B. (2003) Screening of octanol-water partition coefficients for pharmaceuticals by pressure-assisted microemulsion electrokinetic chromatography. J. Chromatog. A, 1007, 203-208..	p.3243
32	0.98	0.98			その他,shake flask	-	-	-	-		2B	×	0.90, 0.98, 0.85 (shake flask, Hansch & Leo 1979)	Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, New York..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
33	0.91	0.91			その他,HPLC- k' correlation	-	-	-	-		2B	×		Konemann, H., Zelle, R., Busser, F., Hammers, W.E. (1979) Determination of log P _{OCT} values of chloro-substituted benzenes, toluenes and anilines by high-performance liquid chromatography on ODS-silica. J. Chromatogr. 178, 559-565..	p.3243
34	0.9	0.9			その他,shake flask-UV	-	-	-	-		2B	×		Fujita, T., Iwasa, J., Hansch, C. (1964) A new substituent constant derived from partition coefficients. J. Am. Chem. Soc. 86(23), 5175-5180..	p.3243
35	0.9	0.9			その他,shake flask	-	-	-	-		2B	×		Iwasa, J., Fujita, T., Hansch, C. (1965) Substituent constants for aliphatic functions obtained from partition coefficients. J. Med. Chem. 8, 150-153..	p.3243
36	0.9	0.9			その他,shake flask-UV	-	-	-	-		2B	×		Hansch, C., Quinlan, J.E., Lawrence, G.L. (1968) The linear free-energy relationship between partition coefficients and the aqueous solubility of organic liquids. J. Org. Chem. 33, 347-350..	p.3243
37	0.9	0.9			-	-	-	-	-		2B	×		Leo, A., Hansch, C., Elkins, D. (1971) Partition coefficients and their uses. Chem. Rev. 71, 525-616.. Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, New York.. Hansch, C., Leo, A. (1983) Medchem Project. Pomona College, Claremont, CA.. Leo, A. (1985) Medchem Project. Pomona College, Claremont, CA..	p.3243
38	0.9	0.9			-	-	-	-	その他,inter- laboratory studies. shake flask average		2B	×		Eadsforth, C.V., Moser, P. (1983) Assessment of reverse-phase chromatographic methods for determining partition coefficients. Chemosphere 12, 1459-1475..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
39	0.89	0.89		5.6	その他,shake flask-UV at pH 5.6	-	-	-	-	-	2B	×	-	Umeyama, H., Nagai, T., Nogami, H. (1971) Mechanism of adsorption of phenols by carbon black from aqueous solution. Chem. Pharm. Bull. 19(8), 1714-1721..	p.3243
40	0.9	0.9			その他,HPLC- K' correlation	-	-	-	-	-	2B	×	-	Carlson, R.M., Carlson, R., Kopperman, H.L. (1975) Determination of partition coefficients by liquid chromatography. J. Chromatogr. 107, 219-223..	p.3243
41	0.85	0.85			その他,shake flask	-	-	-	-	-	2B	×	-	Lu, P.Y., Metcalf, R.L. (1975) Environmental fate and biodegradability of benzene derivatives as studies in a model aquatic ecosystem. Environ. Health Prospect. 10, 269-284..	p.3243
42	0.9	0.9			その他,HPLC- RT correlation	-	-	-	-	-	2B	×	-	Mirvish, S.S., Issenberg, P., Sornson, H.C. (1976) Air-water and ether-water distribution of N-nitroso compounds: Implications for laboratory safety, analytic methodology, and carcinogenicity for the rat esophagus, nose, and liver. J. Nat'l. Cancer Inst. 56(6), 1125-1129..	p.3243
43	0.93±0.05	0.93		7	その他,shake flask at pH 7	-	-	-	-	-	2B	×	-	Unger, S.H., Cook, J.R., Hollenberg, J.S. (1978) Simple procedure for determining octanol-aqueous partition, distribution, and ionization coefficients by reversed-phase high-pressure liquid chromatography. J. Pharm. Sci. 67(10), 1664-1667..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
44	1.09	1.09			-	-	-	-	その他,inter-laboratory studies, HPLC-RT correlation, average		2B	×		Eadsforth, C.V., Moser, P. (1983) Assessment of reverse-phase chromatographic methods for determining partition coefficients. Chemosphere 12, 1459-1475.. Brooke, D.N., Nielsen, I., De Bruijn, Hermens, J. (1990) An interlaboratory evaluation of the stir-flask method for the determination of octanol-water partition coefficients (LOG_POW). Chemosphere 21, 119-133..	p.3243
45	1.08	1.08			その他,HPLC-k' correlation	-	-	-			2B	×	1.34, 1.27, 1.08 (HPLC-RT correlation, Harnish et al. 1983)	Harnish, M., Mockel, H.J., Schulze, G. (1983) Relationship between log P_OW shake flask values and capacity factors derived from reversed phase HPLC for n-alkylbenzenes and some OECD reference substances. J. Chromatogr. 282, 315-332..	p.3243
46	1.34	1.34			その他,HPLC-k' correlation	-	-	-			2B	×	1.34, 1.27, 1.08 (HPLC-RT correlation, Harnish et al. 1983)	Harnish, M., Mockel, H.J., Schulze, G. (1983) Relationship between log P_OW shake flask values and capacity factors derived from reversed phase HPLC for n-alkylbenzenes and some OECD reference substances. J. Chromatogr. 282, 315-332..	p.3243
47	1.27	1.27			その他,HPLC-k' correlation	-	-	-			2B	×	1.34, 1.27, 1.08 (HPLC-RT correlation, Harnish et al. 1983)	Harnish, M., Mockel, H.J., Schulze, G. (1983) Relationship between log P_OW shake flask values and capacity factors derived from reversed phase HPLC for n-alkylbenzenes and some OECD reference substances. J. Chromatogr. 282, 315-332..	p.3243
48	1.08	1.08			その他,shake flask average, OECD/EEC lab. comparison tests	-	-	-			2B	×		Harnish, M., Mockel, H.J., Schulze, G. (1983) Relationship between log P_OW shake flask values and capacity factors derived from reversed phase HPLC for n-alkylbenzenes and some OECD reference substances. J. Chromatogr. 282, 315-332..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
49 MOE初期評 価	0.9	算出不可			-	-	-	-	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
50 NITE初期リ スク評価書	0.9	0.9			-	-	-	-	experimental result	-	2B	×	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2003) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse,NY..	p.2
51	1.08	1.08			-	-	-	-	その他(推定 値),推定値	-	4C	×	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2003) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse,NY..	p.2
52 PhysProp	0.9	0.9			-	-	-	-	experimental result	-	2B	×	-	HANSCH,C ET AL. (1995).	p.1
53 REACH登録 情報	0.91	0.91	25 °C	7.5		yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×			Exp Key Partition coefficient.001
54 SIDS	0.9	0.9	20 °C		その 他,Shaking- flask method			key study	experimental result		2A				p.8
55 USHPV	0.91	0.91			-	-	-	-	experimental result	-	2B	×	-		p.8

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

◀ 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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	Koc	25.19 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定 (2C)]	25.19			KOCWIN				(Q)SAR		2C	×			
2	HSDB	Koc	43.8 ~ 497.7	270.75		in five European soils							2B	×			ENVIRONMENTAL FATE:
3	IUCLID	logKoc	1.65	44.66835922			その他,Computer Program: PCKOC, PC Software to Estimate Soil Sorption Coefficients, Version 1.22				estimated by calculation	Computer Program: PCKOC, PC Software to Estimate Soil Sorption Coefficients, Version 1.22	4C	×			p.21
4		logKoc	2.07	117.4897555			その他				experimental result		4A	×			p.21
5		logKoc	2.14	138.0384265			その他				experimental result		4A	×			p.21
6	Mackay	logKoc	3.59	3890.45145		colloidal organic carbon/gro und water	-	-	-	-	-	-	2B	×		Means, J.C., Wood, S.G., Hassett, J.J., Banwart, W.L. (1982) Sorption of amino- and carboxy-substituted polynuclear aromatic hydrocarbons by sediments and soils. Environ. Sci. Technol. 16, 93-98..	p.3243
7		logKoc	1.17	14.79108388		soil	-	-	-	-	その他,quoted as log K_OM	-	2B	×		Sabljic, A. (1987) On the prediction of soil sorption coefficients of organic pollutants from molecular structure: Application of molecular topology model. Environ. Sci. Technol. 21, 358- 366	p.3243
8		logKoc	2.12	131.8256739		Podzol soil,	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated values	4C	×	1.08, 1.25, 0.98 (RP-HPLC- k' correlation on 3 different stationary phases, Szabo et al. 1995)	von Oepen, B., Kordel, W., Klein, W. (1991) Sorption of nonpolar and polar compounds in soils: Processes, measurements and experience with the applicability of the modified OECD-guideline 106. Chemosphere 22, 285-304..	p.3243
9		logKoc	2.05	112.2018454		Alfisol soil	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated values	4C	×	1.08, 1.25, 0.98 (RP-HPLC- k' correlation on 3 different stationary phases, Szabo et al. 1995)	von Oepen, B., Kordel, W., Klein, W. (1991) Sorption of nonpolar and polar compounds in soils: Processes, measurements and experience with the applicability of the modified OECD-guideline 106. Chemosphere 22, 285-304..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

◀ 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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
10	logKoc	2.06	114.8153621			sediment	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated values	4C	x	1.08, 1.25, 0.98 (RP-HPLC- k' correlation on 3 different stationary phases, Szabo et al. 1995)	von Oepen, B., Kordel, W., Klein, W. (1991) Sorption of nonpolar and polar compounds in soils: Processes, measure- ments and experience with the applicability of the modified OECD-guideline 106. Chemosphere 22, 285-304..	p.3243
11	logKoc	0.596	3.944573021			-	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-K_OW	4C	x	-	Kollig, H.P., Ed. (1993) Environmental Fate Constants for Organic Chemicals under Consideration of EPA's Hazardous Waste Identification Projects. EPA Report EPA/600/R-93/132, U.S. Environmental Research Lab., Athens GA..	p.3243
12	logKoc	0.98	9.54992586			-	その他,RP- HPLC-k' correlation on 3 different stationary phases	-	-	-	-	-	2B	x	1.08, 1.25, 0.98 (RP-HPLC- k' correlation on 3 different stationary phases, Szabo et al. 1995)	Szabo, G., Guzzi, J., Bulman, R.A. (1995) Examination of silica-salicylic acid and silica-8- hydroxyquinoline HPLC stationary phases for estimation of the adsorption coefficient of soil for some aromatic hydrocarbons. Chemosphere 30, 1717-1727..	p.3243
13	logKoc	1.08	12.02264435			-	その他,RP- HPLC-k' correlation on 3 different stationary phases	-	-	-	-	-	2B	x	1.08, 1.25, 0.98 (RP-HPLC- k' correlation on 3 different stationary phases, Szabo et al. 1995)	Szabo, G., Guzzi, J., Bulman, R.A. (1995) Examination of silica-salicylic acid and silica-8- hydroxyquinoline HPLC stationary phases for estimation of the adsorption coefficient of soil for some aromatic hydrocarbons. Chemosphere 30, 1717-1727..	p.3243
14	logKoc	1.25	17.7827941			-	その他,RP- HPLC-k' correlation on 3 different stationary phases	-	-	-	-	-	2B	x	1.08, 1.25, 0.98 (RP-HPLC- k' correlation on 3 different stationary phases, Szabo et al. 1995)	Szabo, G., Guzzi, J., Bulman, R.A. (1995) Examination of silica-salicylic acid and silica-8- hydroxyquinoline HPLC stationary phases for estimation of the adsorption coefficient of soil for some aromatic hydrocarbons. Chemosphere 30, 1717-1727..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

◀ 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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
15	logKoc	1.41	25.70395763			soil	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-MCI*1x	4C	x		Szabo, G., Guzzi, J., Bulman, R.A. (1995) Examination of silica-salicylic acid and silica-8-hydroxyquinoline HPLC stationary phases for estimation of the adsorption coefficient of soil for some aromatic hydrocarbons. Chemosphere 30, 1717-1727..	p.3243
16	logKoc	2.07	117.4897555			-	その他,HPLC- screening method	-	-	-	-	-	2B	x	2.07; 1.65 (HPLC-screening method; calculated-PCKOC fragment method, Muller & Kordel 1996)	Muller, M., Kordel, W. (1996) Comparison of screening methods for the estimation of adsorption coefficients on soil. Chemosphere 32, 2493-2504..	p.3243
17	logKoc	2.11	128.8249552			soil;	-	-	-	-	-	-	2B	x	2.11; 2.61 (soil; more acidic soil, Pillai et al. 1982)	Pillai, P., Helling, C.S., Dragun, J. (1982) Soil catalyzed oxidation of aniline. Chemosphere 11, 299, 317..	p.3243
18	logKoc	1.65	44.66835922			-	その 他,calculated- PCKOC fragment method	-	-	-	-	-	2B	x	2.07; 1.65 (HPLC-screening method; calculated-PCKOC fragment method, Muller & Kordel 1996)	Muller, M., Kordel, W. (1996) Comparison of screening methods for the estimation of adsorption coefficients on soil. Chemosphere 32, 2493-2504..	p.3243
19	logKoc	3.11	1288.249552		8.35	H- montmorill onite at pH 8.35	-	-	-	-	-	-	2B	x	3.11; 2.11 (H-montmorillonite at pH 8.35; pH 6.80, Bailey et al. 1968)	Bailey, G.W., White, J.L., Rothberg T. (1968) Adsorption of organic herbicides by montmorillonite: Role of pH and chemical character of adsorbate. Soil Sci. Am. Proc. 32, 222-234..	p.3243
20	logKoc	2.11	128.8249552		6.8	H- montmorill onite at pH 6.80	-	-	-	-	-	-	2B	x	3.11; 2.11 (H-montmorillonite at pH 8.35; pH 6.80, Bailey et al. 1968)	Bailey, G.W., White, J.L., Rothberg T. (1968) Adsorption of organic herbicides by montmorillonite: Role of pH and chemical character of adsorbate. Soil Sci. Am. Proc. 32, 222-234..	p.3243
21	logKoc	1.86	72.44359601			soil average	-	-	-	-	-	-	2B	x		Moreale, A., Van Bladel, R. (1976) Influence of soil properties on adsorption of pesticide-derived aniline and p-chloroaniline. J. Soil Sci. 27, 48-57.	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
22	logKoc	1.41	25.70395763			average of seven agricultural soils	-	-	-	-	その他,average of seven agricultural soils		2B	×		Briggs, G.G. (1981) Theoretical and experimental relationships between soil adsorption, octanol-water partition coefficients, water solubilities, bioconcentration factors and Parachor. J. Agric. Food Chem. 29, 1050-1059..	p.3243
23	logKoc	2.08	120.2264435			first generation Eurosoils ES-3	その他,shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV	-	-	-			2B	×	2.70, 1.64, 2.08, 2.04, 2.29 (first generation Eurosoils ES-1, ES-2, ES-3, ES-4, ES-5, shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV, Gawlik et al. 1998)	Gawlik, B.M., Feicht, E.A., Karcher, W., Ketrup, A., Muntau, H. (1998) Application of the European soil set (Eurosoils) to a HPLCscreening method for the estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds. Chemosphere 36, 2903-2919..	p.3243
24	logKoc	2.04	109.6478196			first generation Eurosoils ES-4,	その他,shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV	-	-	-			2B	×	2.70, 1.64, 2.08, 2.04, 2.29 (first generation Eurosoils ES-1, ES-2, ES-3, ES-4, ES-5, shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV, Gawlik et al. 1998)	Gawlik, B.M., Feicht, E.A., Karcher, W., Ketrup, A., Muntau, H. (1998) Application of the European soil set (Eurosoils) to a HPLCscreening method for the estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds. Chemosphere 36, 2903-2919..	p.3243
25	logKoc	2.29	194.98446			first generation Eurosoils ES-5,	その他,shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV	-	-	-			2B	×	2.70, 1.64, 2.08, 2.04, 2.29 (first generation Eurosoils ES-1, ES-2, ES-3, ES-4, ES-5, shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV, Gawlik et al. 1998)	Gawlik, B.M., Feicht, E.A., Karcher, W., Ketrup, A., Muntau, H. (1998) Application of the European soil set (Eurosoils) to a HPLCscreening method for the estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds. Chemosphere 36, 2903-2919..	p.3243
26	logKoc	2.384	242.1029047			second generation Eurosoils ES-1	その他,shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV and HPLC-k' correlation	-	-	-			2B	×	2.384, 1.503, 1.279, 1.437, 2.136 (second generation Eurosoils ES-1, ES-2, ES-3, ES-4, ES-5, shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV and HPLC-k' correlation, Gawlik et al. 2000)	Gawlik, B.M., Ketrup, A., Muntau, H. (2000) Estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds by HPLC screening using the second generation of the European reference soil set. Chemosphere 41, 1337-1347	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

◀ 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	評価におけ るキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
27	logKoc	1.503	31.84197522			second generation Eurosoils ES-2,	その他,shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV and HPLC-k' correlation	-	-	-	-		2B	×	2.384, 1.503, 1.279, 1.437, 2.136 (second generation Eurosoils ES-1, ES-2, ES-3, ES-4, ES-5, shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV and HPLC-k' correlation, Gawlik et al. 2000)	Gawlik, B.M., Kettrup, A., Muntau, H. (2000) Estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds by HPLC screening using the second generation of the European reference soil set. Chemosphere 41, 1337-1347	p.3243
28	logKoc	2.61	407.3802778			more acidic soil	-	-	-	-	-		2B	×	2.11; 2.61 (soil; more acidic soil, Pillai et al. 1982)	Pillai, P., Helling, C.S., Dragun, J. (1982) Soil catalyzed oxidation of aniline. Chemosphere 11, 299, 317..	p.3243
29	logKoc	1.279	19.0107828			second generation Eurosoils ES-3,	その他,shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV and HPLC-k' correlation	-	-	-	-		2B	×	2.384, 1.503, 1.279, 1.437, 2.136 (second generation Eurosoils ES-1, ES-2, ES-3, ES-4, ES-5, shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV and HPLC-k' correlation, Gawlik et al. 2000)	Gawlik, B.M., Kettrup, A., Muntau, H. (2000) Estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds by HPLC screening using the second generation of the European reference soil set. Chemosphere 41, 1337-1347	p.3243
30	logKoc	1.437	27.35268726			second generation Eurosoils ES-4,	その他,shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV and HPLC-k' correlation	-	-	-	-		2B	×	2.384, 1.503, 1.279, 1.437, 2.136 (second generation Eurosoils ES-1, ES-2, ES-3, ES-4, ES-5, shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV and HPLC-k' correlation, Gawlik et al. 2000)	Gawlik, B.M., Kettrup, A., Muntau, H. (2000) Estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds by HPLC screening using the second generation of the European reference soil set. Chemosphere 41, 1337-1347	p.3243
31	logKoc	2.136	136.7728826			second generation Eurosoils ES-5,	その他,shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV and HPLC-k' correlation	-	-	-	-		2B	×	2.384, 1.503, 1.279, 1.437, 2.136 (second generation Eurosoils ES-1, ES-2, ES-3, ES-4, ES-5, shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV and HPLC-k' correlation, Gawlik et al. 2000)	Gawlik, B.M., Kettrup, A., Muntau, H. (2000) Estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds by HPLC screening using the second generation of the European reference soil set. Chemosphere 41, 1337-1347	p.3243
32	logKoc	1 ~ 1.15	11.88502227		2.8 ~ 7.2	5 soils	その他,batch equilibrium-sorption isotherm	-	-	-	-		2B	×	1.0-1.54 (5 soils, pH 2.8-7.2, batch equilibrium-sorption isotherm, Li et al. 2000)		p.3243
33	logKoc	2.49	309.0295433			nonsterile Hagerstown soil;	-	-	-	-	-		2B	×	2.49; 2.11 (nonsterile Hagerstown soil; sterile Hagerstown soil, Pillai et al. 1982)	Pillai, P., Helling, C.S., Dragun, J. (1982) Soil catalyzed oxidation of aniline. Chemosphere 11, 299, 317..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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	評価におけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
34	logKoc	2.07	117.4897555			first generation Eurosoils ES-1	その他,shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV	-	-	-	-		2B	×	2.70, 1.64, 2.08, 2.04, 2.29 (first generation Eurosoils ES-1, ES-2, ES-3, ES-4, ES-5, shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV, Gawlik et al. 1998)	Gawlik, B.M., Feicht, E.A., Karcher, W., Kettrup, A., Muntau, H. (1998) Application of the European soil set (Eurosoils) to a HPLCscreening method for the estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds. Chemosphere 36, 2903-2919..	p.3243
35	logKoc	1.64	43.65158322			first generation Eurosoils ES-2	その他,shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV	-	-	-	-		2B	×	2.70, 1.64, 2.08, 2.04, 2.29 (first generation Eurosoils ES-1, ES-2, ES-3, ES-4, ES-5, shake flask-batch equilibrium-HPLC/UV, Gawlik et al. 1998)	Gawlik, B.M., Feicht, E.A., Karcher, W., Kettrup, A., Muntau, H. (1998) Application of the European soil set (Eurosoils) to a HPLCscreening method for the estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds. Chemosphere 36, 2903-2919..	p.3243
36	logKoc	2.11	128.8249552			sterile Hagerstown soil	-	-	-	-	-		2B	×	2.49; 2.11 (nonsterile Hagerstown soil; sterile Hagerstown soil, Pillai et al. 1982)	Pillai, P., Helling, C.S., Dragun, J. (1982) Soil catalyzed oxidation of aniline. Chemosphere 11, 299, 317..	p.3243
37	logKoc	2.96	912.0108394			nonsterile Palouse soil	-	-	-	-	-		2B	×	2.96; 2.61 (nonsterile Palouse soil; sterile Palouse soil, Pillai et al. 1982)	Pillai, P., Helling, C.S., Dragun, J. (1982) Soil catalyzed oxidation of aniline. Chemosphere 11, 299, 317..	p.3243
38	logKoc	2.61	407.3802778			sterile Palouse soil,	-	-	-	-	-		2B	×	2.96; 2.61 (nonsterile Palouse soil; sterile Palouse soil, Pillai et al. 1982)	Pillai, P., Helling, C.S., Dragun, J. (1982) Soil catalyzed oxidation of aniline. Chemosphere 11, 299, 317..	p.3243
39	NITE初期リスク評価書	Koc	45	45		-	-	-	-	-	その他(推定値);非解離状態での推定値		4C	×	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2003) PkKocWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY..	p.2
40	REACH登録情報	Koc	130	130		Hagerstown sterile soil		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×			Exp Key Adsorption / desorption.001
41		Koc	310	310		Hagerstown nonsterile soil		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×			Exp Key Adsorption / desorption.001
42	REACH登録情報	Koc	410	410		Palouse sterile soil		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×			Exp Key Adsorption / desorption.001
43		Koc	910	910		Palouse nonsterile soil		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×			Exp Key Adsorption / desorption.001
44	SIDS	Koc	410 L/kg	410						key study	experimental result		2A				p.25

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

▲ 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 ケーススタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価におけ るケースス タディー	備考	文献	ページ番号等
45 USHPV	logKoc	2.07	117.4897555			-	-	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	x	-		p.10
46	logKoc	2.14	138.0384265			-	-	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	x	-		p.10

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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 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	評価におけ るキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1 CRC	14 kPa m ³ /mol	14000			-	-	-		2B	x		Howard, P. H., Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals, Vol. I, Lewis Publishers/CRC Press, Boca Raton, FL, 1989..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
2 EPI Suite	0.139 Pa・m ³ /mol	0.139					(Q)SAR		2C	x			
3 HSDB	2.02E-6 atm・m ³ /mol	0.2046765							2B	x			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
4 Mackay	0.193 Pa・m ³ /mol	0.193			-	-	-		2B	x		Altschuh, J., Bruggemann, Santl, H., Eichinger, G., Piringer, O.G.(1999) Henry's law constants for a diverse set of organic chemicals: Experimental determination and comparison of estimation methods. Chemosphere 39, 1871-1887..	p.3243
5	13778 Pa・m ³ /mol	13778			-	-	-		2B	x		Hakuta, T., Negishi, A., Goto, T., Ishizaka, S. (1977) Vapor-liquid equilibriums of some pollutants in aqueous and saline solutions. Part I. Experimental results. Desalination 21, 11-21..	p.3243
6	12.16 Pa・m ³ /mol	12.16			-	-	その他,measured		2B	x		Yoshida, K., Shigeoka, T., Yamauchi, F. (1983) Non-steady state equilibrium model for the preliminary prediction of the fate of chemicals in the environment. Ecotoxicol. Environ. Saf. 7, 179-190..	p.3243
7 NITE初期リスク評価書	0.205 Pa・m ³ /mol	0.205			-	-	experimental result		2B	x		SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY. (http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm から引用).	p.2

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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 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	評価におけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
8 NITE初期リス ク評価書	0.00000202 atm・ m ³ /mol	0.2046765			-	-	experimental result	-	2B	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY. (<a href="http://esc.syrres.com/interkow/ph
ysdemo.htm">http://esc.syrres.com/interkow/ph ysdemo.htm から引用).	p.2
9 PhysProp	0.00000202 atm・ m ³ /mol	0.2046765			-	-	experimental result	-	2B	×		JAYASINGHE,DS ET AL. (1992).	p.1
10 REACH登録情 報	0.205 Pa・m ³ /mol	0.205			2: reliable with restrictions	key study	experimental result	-	4A	×			Exp Key Henry's Law constant.001
11 SIDS	0.106 Pa・m ³ /mol	0.106				key study			2A				p.198
12 USHPV	0.00000202 atm・ m ³ /mol	0.2046765			-	-	-	-	2B	×		SRC. The Physical Properties Database (PHYSPROP). Syracuse, NY: Syracuse Research Corporation. Available from <a href="http://www.syrres.com/esc/physpr
op.htm">http://www.syrres.com/esc/physpr op.htm as of September 15, 2008..	p.8

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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
1	CRC	pKa	4.87	算出不可			-	-	-	-				Dissociation Constants of Organic Acids and Bases (Section 5)
2	Mackay	pKa	4.596	算出不可			-	-	-	-			Perrin, D.D. (1972) Dissociation Constants of Organic Bases in Aqueous Solutions. IUPAC Chemical Data Series; Supplement. Butterworth, London.. Howard, P.H., Editor (1989) Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. Vol. I, Large Production and Priority Pollutants. Lewis Publishers, Chelsea, MI..	p.3243
3		pKa	4.6	算出不可			-	-	-	-			McLeese, D.W., Zitko, V., Peterson, M.R. (1979) Structure lethality relationships for phenols, anilines and other aromatic compounds in shrimp and clams. Chemosphere 2, 53-57.. Howard, P.H., Hueber, A.E., Mulesky, B.C., Crisman, J.S., Meylan, W., Crosby, E., Gray, D.A., Sage, G.W., Howard, K.P., LaMacchia, A., Boethling, R.S., Troast, R. (1986) BIOLOG, BIODEG, and FATE/EXPOS: New files on microbial degradation and toxicity as well as environmental fate/exposure of chemicals. Environ. Toxicol. Chem. 5, 977-988.. Sangster, J. (1989) Octanol-water partition coefficients of simple organic compounds. J. Phys. Chem. Ref. Data 18(3), 1111-1230..	p.3243
4		pKa	4.63	算出不可			-	-	-	-			Weast, R.C., Editor (1982-83) Handbook of Chemistry and Physics. 63rd edition, CRC Press, Boca Raton, FL..	p.3243

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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
5	pKa	4.58	算出不可			-	-	-	-	その他,quoted	-	-	Miyake, K., Kitaura, F., Mizuno, N., Terada, H. (1987) Determination of partition coefficient and acid dissociation constant by highperformance liquid chromatography on porous polymer gel as stationary phase. Chem. Pharm. Bull. 35(1), 377-388..	p.3243
6	pKa	3.96	算出不可			その他,Test mat. analysis	-	-	-	-	-	-	Miyake, K., Kitaura, F., Mizuno, N., Terada, H. (1987) Determination of partition coefficient and acid dissociation constant by highperformance liquid chromatography on porous polymer gel as stationary phase. Chem. Pharm. Bull. 35(1), 377-388..	p.3243
7	Merck	pKb	9.3	算出不可		-	-	-	-	-	-	pKb 9.30		Monograph Number: 0000659
8	MOE初期評価	pKb	9.3	算出不可		-	-	-	-	-	-	-	有機合成化学協会編 (1985) 有機化学物辞典, 講談社. The Merck Index, 12th. Ed. (1996) Merck & Co., Inc..	p.1
9	NITE初期リスク評価書	pKa	4.6	算出不可		-	-	-	-	-	-	-	Dean, J.A. (1999) Lange's Handbook of Chemistry, 15th. Edition, McGaw-Hill, Inc..	p.2
10	PhysProp	pKa	4.6	算出不可		-	-	-	-	experimental result	-	-	PERRIN,DD (1972).	p.1
11	SPARC	pKa	4.74	算出不可		7 SPARC	-	-	key study	(Q)SAR	SPARC v4.6 October 2011 release w4.6.1691-s4 6.1687	-		-
12	USHPV	pKa	4.6	算出不可		-	-	-	-	experimental result	-	-	SRC. The Physical Properties Database (PHYSPROP). Syracuse, NY: Syracuse Research Corporation. Available from http://www.syrres.com/esc/physprop.htm as of September 15, 2008..	p.8

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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 HSDB					OECD TG 301A (DOC Die Away Test)				experimental result				ENVIRONMENTAL BIODEGRADATION:
2					OECD TG 301B				experimental result		B Sturm test		ENVIRONMENTAL BIODEGRADATION:
3					OECD TG 301F				experimental result		F Oxitop		ENVIRONMENTAL BIODEGRADATION:
4					OECD TG 301F				experimental result		F Sapromat		ENVIRONMENTAL BIODEGRADATION:
5 NITE初期リスク評価書	readily biodegradable	85%	O ₂ consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result			通商産業省公報 (1993年12月28日), 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報. (http://www.nite.go.jp から引用).	p.5
6	readily biodegradable	99%	TOC removal		化審法TG	-	-	-	experimental result			通商産業省公報 (1993年12月28日), 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報. (http://www.nite.go.jp から引用).	p.5
7	readily biodegradable	100%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result			通商産業省公報 (1993年12月28日), 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報. (http://www.nite.go.jp から引用).	p.5
8 REACH登録情報		>90 %			OECD TG 301E								NS NS Biodegradation in water: screening tests.086
9		93.40%			OECD TG 301F	no data	2: reliable with restrictions						NS NS Biodegradation in water: screening tests.087
10		93%			OECD TG 301E	no	2: reliable with restrictions						NS NS Biodegradation in water: screening tests.095
11	readily biodegradable	90%	O ₂ consumption		OECD TG 301B	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result				Exp Key Biodegradation in water: screening tests.005
12		93%			OECD TG 301E								NS NS Biodegradation in water: screening tests.098
13	readily biodegradable	80%	O ₂ consumption		OECD TG 301B	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result				Exp Key Biodegradation in water: screening tests.005
14	readily biodegradable	100%	DOC removal		OECD TG 301E	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result				Exp Key Biodegradation in water: screening tests.006
15	readily biodegradable	100%	Test mat. analysis		OECD TG 301E	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result				Exp Key Biodegradation in water: screening tests.006
16		81.10%			OECD TG 301D	no data	2: reliable with restrictions						NS NS Biodegradation in water: screening tests.011
17		98.70%	CO ₂ evolution		OECD TG 301B	no data	2: reliable with restrictions						NS NS Biodegradation in water: screening tests.015

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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
18	readily biodegradable	>90 %			OECD TG 301E	no	2: reliable with restrictions						NS NS Biodegradation in water: screening tests.019
19		98%			OECD TG 301B								NS NS Biodegradation in water: screening tests.023
20		90%			OECD TG 301D								NS NS Biodegradation in water: screening tests.035
21	readily biodegradable	90%	O ₂ consumption		OECD TG 301D		2: reliable with restrictions	key study	experimental result				Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
22		100%			OECD TG 301B								NS NS Biodegradation in water: screening tests.044
23		100%			OECD TG 301E								NS NS Biodegradation in water: screening tests.046
24		97%	DOC removal		OECD TG 301B	no data	2: reliable with restrictions						NS NS Biodegradation in water: screening tests.051
25	readily biodegradable	70%	DOC removal		OECD TG 301B	no data	2: reliable with restrictions						NS NS Biodegradation in water: screening tests.053
26	readily biodegradable	60%	CO ₂ evolution		OECD TG 301B	no data	2: reliable with restrictions						NS NS Biodegradation in water: screening tests.053
27		90%			OECD TG 301D								NS NS Biodegradation in water: screening tests.071
28	readily biodegradable	>90 %			OECD TG 301A	no data	2: reliable with restrictions						NS NS Biodegradation in water: screening tests.073
29	readily biodegradable	90%			OECD TG 301E								NS NS Biodegradation in water: screening tests.082
30	SIDS	90%			OECD TG 301D				experimental result				p.19
31		100%			OECD TG 301E				experimental result				p.19
32		90%			OECD TG 301B				experimental result				p.19
33	USHPV	readily biodegradable	97%	-	OECD TG 301A	-	-	-	experimental result				p.9-10
34		readily biodegradable	92%	-	OECD TG 301A	-	-	-	experimental result				p.9-10
35	既存点検事業	100%	Test mat. analysis		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		試験番号 21139 化学品検査協会 化学品安全センター久留米研究所 基準物質 アニリン BODによる分解度 窒素は最終形態をNH ₃ とし、TODの算出は純度100%として計算した		K1139

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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
36		99%	TOC removal		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		試験番号 21139 化学品検査協会 化学品安全センター久留米研究所 基準物質 アニリン BODによる分解度 窒素は最終形態をNH3とし、TODの算出は純度100%として計算した		K1139
37		100%	Test mat. analysis		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		試験番号 21139 化学品検査協会 化学品安全センター久留米研究所 基準物質 アニリン BODによる分解度 窒素は最終形態をNH3とし、TODの算出は純度100%として計算した		K1139
38		100%	Test mat. analysis		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		試験番号 21139 化学品検査協会 化学品安全センター久留米研究所 基準物質 アニリン BODによる分解度 窒素は最終形態をNH3とし、TODの算出は純度100%として計算した		K1139
39		70 %[NO2: 被験物質の TOD: C6H7N+8.75 O2 6CO2+3.5H2 O+NO2 =90.3(mg) アニリンの TOD: C6H7N+8.75 O2 6CO2+3.5H2 O+NO2 =90.3(mg)]	O_2 consumption		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		試験番号 21139 化学品検査協会 化学品安全センター久留米研究所 基準物質 アニリン BODによる分解度 窒素は最終形態をNH3とし、TODの算出は純度100%として計算した		K1139

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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
40		67 %[NO2: 被験物質の TOD: C6H7N+8.75 O2 6CO2+3.5H2 O+NO2 =90.3(mg) アニリンの TOD: C6H7N+8.75 O2 6CO2+3.5H2 O+NO2 =90.3(mg)]	O_2 consumption		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		試験番号 21139 化学 品検査協会 化学品安全 センター久留米研究所 基準物質 アニリン BOD による分解度 窒素は最終形態をNH3と し、TODの算出は純度 100%として計算した		K1139
41		68 %[NO2: 被験物質の TOD: C6H7N+8.75 O2 6CO2+3.5H2 O+NO2 =90.3(mg) アニリンの TOD: C6H7N+8.75 O2 6CO2+3.5H2 O+NO2 =90.3(mg)]	O_2 consumption		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		試験番号 21139 化学 品検査協会 化学品安全 センター久留米研究所 基準物質 アニリン BOD による分解度 窒素は最終形態をNH3と し、TODの算出は純度 100%として計算した		K1139
42		87 %[NH3: 被験物質の TOD: C6H7N+7O2 → 6CO2+2H2O +NH3 =72.3(mg) アニリンの TOD: C6H7N+8.75 O2 → 6CO2+3.5H2 O+NO2	O_2 consumption		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		試験番号 21139 化学 品検査協会 化学品安全 センター久留米研究所 基準物質 アニリン BOD による分解度 窒素は最終形態をNH3と し、TODの算出は純度 100%として計算した		K1139

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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
43		83 %[NH3: 被験物質の TOD: C6H7N+7O2 6CO2+2H2O +NH3 =72.3(mg) アニリンの TOD: C6H7N+8.75 O2 6CO2+3.5H2 O+NO2 =90.3(mg)]	O_2 consumption		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		試験番号 21139 化学 品検査協会 化学品安全 センター久留米研究所 基準物質 アニリン BOD による分解度 窒素は最終形態をNH3と し、TODの算出は純度 100%として計算した		K1139
44		85 %[NH3: 被験物質の TOD: C6H7N+7O2 6CO2+2H2O +NH3 =72.3(mg) アニリンの TOD: C6H7N+8.75 O2 6CO2+3.5H2 O+NO2 =90.3(mg)]	O_2 consumption		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		試験番号 21139 化学 品検査協会 化学品安全 センター久留米研究所 基準物質 アニリン BOD による分解度 窒素は最終形態をNH3と し、TODの算出は純度 100%として計算した		K1139
45		98%	TOC removal		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		試験番号 21139 化学 品検査協会 化学品安全 センター久留米研究所 基準物質 アニリン BOD による分解度 窒素は最終形態をNH3と し、TODの算出は純度 100%として計算した		K1139
46		99%	TOC removal		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		試験番号 21139 化学 品検査協会 化学品安全 センター久留米研究所 基準物質 アニリン BODに よる分解度 窒素は最終形態をNH3と し、TODの算出は純度 100%として計算した		K1139

基本情報

優先評価化学物質通し番号	54000
物質名称	アニリン
CAS番号	62-53-3

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 ケーススタディ の是非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価におけ るケースス タディー	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1			BCF		3.162 L/kg (wet)2B以 上の値を用 いて推定 (2C)1	3.162	BCFBFWIN				(Q)SAR		2C				
2 Mackay					BCF		2.6±0.06	2.6	Zebrafish pH: 8.1 ± 0.1 26 ± 1									Zok, S., et al. (1991) Bioconcentration, metabolism and toxicity of substituted anilines in the zebrafish (Brachydanio rerio). Sci. Total Environ. 109/110: 411- 421.	p.3245
3 SIDS					BCF		2.6±0.06	2.6	Zebrafish 0.2 µg/L pH: 8.1 ± 0.1 26 ± 1									Zok, S., et al. (1991) Bioconcentration, metabolism and toxicity of substituted anilines in the zebrafish (Brachydanio rerio). Sci. Total Environ. 109/110: 411- 421.	p.26
4 USHPV					BCF		2.6	2.6	Zebrafish				experimental data						