

1  
2  
3  
4  
5  
6  
7  
8  
9  
10  
11  
12  
13  
14  
15  
  
16  
17  
18  
19  
20  
21  
22  
23  
24

(案)

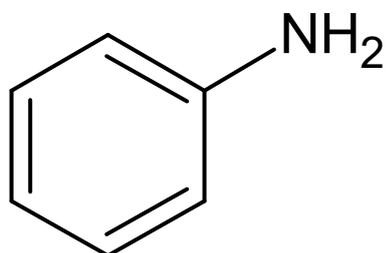
# 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

## 人健康影響に係る評価Ⅱ

### 物理化学的性状等の詳細資料

# 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\*

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

※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。

### ①融点

評価Ⅰで採用した値 (-6.2°C) は、信頼性の定まった情報源<sup>1)</sup> 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°C) を用いる。

### ②沸点

評価Ⅰで採用した値 (184.4°C) 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°C (CRC)、184~186°C (NITE (2007)) もあるが、ECHA のみが測定値と記載している。このため、

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

1 評価Ⅱにおいてもこの値 (184.4°C)を用いる。

2

3 ③蒸気圧

4 評価Ⅰ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°Cでの値である。20°Cの値とし  
6 て 50 Pa (IUCLID (2000))、59.7 Pa (Mackay (2006));回帰式による 20°C内挿値)、42.9 Pa (Mackay  
7 (2006));回帰式による 20°C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Ⅱにおいてもこの値 (40 Pa)を用いる。

9

10 ④水に対する溶解度

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

16

17 ⑤logPow

18 評価Ⅰで採用した値 (0.90)は、ECB (2004) に記載された値 (20°C、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°C、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Ⅱ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 ⑥ヘンリー係数

29 評価Ⅰ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Ⅱにおいては  $0.205 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$  を用いる。

33

34 ⑦Koc

35 評価Ⅰ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°Cで振とうの条件で Koc を測定した Pillai ら (1982)<sup>1</sup>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<br>埴壤土 | Palouse<br>シルト質壤土 |
|----|------------------|-------------------|
| pH | 6.6              | 5.1               |

<sup>1</sup> 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 <sup>2</sup> /g | 25              | 90       |
| 圃場含水量, %               | 31.3            | 32.0     |
| 粘土鉱物                   | バーミキュライト、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)<sup>1</sup>が以下の 5 土壌を用い、  
6 OECD TG 106 (土壌と 0.01 M CaCl<sub>2</sub> 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 <sub>2</sub> ) | 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(ギリシヤ)          | 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)<sup>2</sup> が以下の 5 土壌を用い、OECD TG 106 (土壌  
13 と 0.01 M CaCl<sub>2</sub> 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 <sub>2</sub> ) | 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(ギリシヤ)          | 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  
<sup>1</sup> Gawlik, BM., et al. (1998) Chemosphere 36: 2903-2919.

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

さらに、Mackay (2006)では、Li ら(2001)<sup>1</sup> 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 <sup>a</sup> | 砂 (%) | シルト (%) | 粘土 (%) | 有機炭素 (%) | CEC <sup>b</sup> (cmol <sub>e</sub> /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Ⅱ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。

#### ⑧BCF

評価Ⅰ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)<sup>2</sup>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Ⅱ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。

#### ⑨BMF

評価Ⅰ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Ⅱ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。

#### ⑩pKa

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Ⅱ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。

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

<sup>2</sup> 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<br>(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 一会議（平成 29 年 5 月 25 日）で了承された値

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

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 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 ①-1 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、 $1.2 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  (23°C、  
6 閃光光分解-共鳴ケイ光法) (Mackay (2006)、NIST)、 $1.18 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  (23°C、相対法)  
7 (Mackay (2006)、NIST)、 $1.11 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  (25°C) (ECB (2004)、Mackay (2006)、  
8 PhysProp)、 $1.10 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  (25°C、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、 $1.10 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  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  $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$  と  
11 して、半減期を 0.15 日と算出した。評価Ⅱではこの値 (0.15 日)を用いる。

12 ①-2 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、 $1.12 \times 10^{-18} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  (23°C、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  $7 \times 10^{11} \text{ molecule/cm}^3$  として、半減期を 10.2 日と算出し  
16 た。評価Ⅱではこの値 (10.2 日)を用いる。

17 ①-3 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、 $1.5 \times 10^{-16} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  (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  $2.4 \times 10^8 \text{ molecule/cm}^3$  として、半減期を 223 日と  
21 算出した。評価Ⅱではこの値 (223 日)を用いる。

22

23 ②水中

24 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  
25 られた。

26 ②-1 総括半減期

27 Hwang ら (1987)<sup>1</sup>は、蒸留水及び米国 Georgia 州の Skidaway 川河口域の河川水 (表層 10cm  
28 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  $25 \mu$   
29 g/L、<sup>14</sup>C 標識)に太陽光を照射 (北緯 32°)した場合、夏期 (29°C、照度 :  $5.2 \text{ Einstein/m}^2/\text{h}$ )と  
30 冬期 (14°C、照度 :  $2.9 \text{ Einstein/m}^2/\text{h}$ )、水中のアニリンの一次分解 (分解物への構造変化)の半  
31 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  
32 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  
33 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  
34 ないと結論している。

35 Toräng ら (2002)<sup>2</sup>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  
36 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  
37 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°Cの異なる水温の日に実施  
38 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  $1.8 \text{ 1/day}$   
39 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  
40 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。

41 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

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

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

1 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 ②-2 生分解の半減期

4 Lyons ら (1984)<sup>1</sup>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 Toräng 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<sup>14</sup>Cの50%  
9 が生分解 (無機化)の直接的な証拠である<sup>14</sup>CO<sub>2</sub>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<sup>14</sup>C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 NO<sub>2</sub>  
17 とした場合)、87、83、85% (N の無機化を NH<sub>3</sub> 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 ②-3 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、Toräng 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 ②-4 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 Toräng 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<sup>-1</sup>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

### 34 ③土壌

35 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  
36 する情報が得られた。

### 37 ③-1 生分解の半減期

38 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  
39 減期を 350 日と設定している。この試験では、<sup>14</sup>C 標識アニリンを用い、1 mg/kg の初濃度で  
40 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、  
41 異なる土壌で <sup>14</sup>CO<sub>2</sub>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  
42 生成 <sup>14</sup>CO<sub>2</sub> 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  
43 た。また、<sup>14</sup>C 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

---

<sup>1</sup> 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CO<sub>2</sub>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CO<sub>2</sub>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<sup>1</sup>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 ③-2 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 ④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 ④-1 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 ③-2 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。

---

<sup>1</sup> 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<br>[ ] | 試験方法等  | GLP | reliability                   | 情報源における<br>キースタディの<br>該非 | 値の種類                | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価Iにおけ<br>るキースタ<br>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[-<br>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<br>[ ] | 試験方法等 | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価!におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考  | 文献               | ページ番号等 |
|---------------|----|--------------------------|-------------|-------|-----|-------------|--------------------------|------|---------|------------|------------------------|---|------------------|--------|
| 15 既存点検事<br>業 | 融点 | -6 °<br>C[267K(-<br>6 )] | -6          | -     | -   | -           | -                        | -    |         | 4A         | ×                      | 試験番号 81139K 化学<br>品検査協会 化学品安全<br>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<br>[ ] | 101.325 kPa<br>における沸<br>点[ ] | 測定条件<br>圧力 | 試験方法等   | GLP | reliability                         | 情報源における<br>キースタディの<br>該非 | 値の種類                   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>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 °<br>C[184.1(0.<br>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 ~<br>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 °<br>C             | 185         |                              |            | -   | -   | -                                   | -                        | -                      |         | 4A         | x                     |    |  | Monograph Number: 0000659                                  |
| 11 MOE初期評<br>価      | 184 °C                       | 184         |                              |            | -   | -   | -                                   | -                        | -                      |         | 4A         | x                     |    | 化学辞典 (1994) 東京化学同人.  | p.1  |
| 12 NITE初期リ<br>スク評価書 | 184 ~ 186 °<br>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<br>情報    | 184.4 °C                     | 184.4       | 184.4103                     | 1013 hPa   |   | no  | 2: reliable<br>with<br>restrictions | key study                | experimental<br>result |         | 4A         | x                     |    |  | Exp Key Boiling point.001                                  |
| 15 SIDS             | 184.4 °C                     | 184.4       | 184.4103                     | 1013 hPa   | その他,There<br>is no<br>information<br>about the<br>applied<br>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<br>[ ] | 101.325 kPa<br>における沸<br>点[ ] | 測定条件<br>圧力 | 試験方法等 | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>該非 | 値の種類                   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考  | 文献               | ページ番号等 |
|---------------|----------------------------|-------------|------------------------------|------------|-------|-----|-------------|--------------------------|------------------------|---------|------------|-----------------------|---|------------------|--------|
| 16 USHPV      | 184 °C                     | 184         |                              |            | -     | -   | -           | -                        | experimental<br>result | -       | 4A         | ×                     | -   |                  | p.8    |
| 17 既存点検事<br>業 | 184 °<br>C[457K(18<br>4 )] | 184         |                              |            | -     | -   | -           | -                        | -                      | -       | 4A         | ×                     | 試験番号 81139K 化学<br>品検査協会 化学品安全<br>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)<br>log (P_L/kPa) = 6.40627 - 1702.817/(-70.155 + T/K);<br>temp range 304-458 K (Antoine eq.-I, Stephenson & Malanowski 1987)<br>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)<br>log (P/mmHg) = 124.3764 - 7.1676 × 10 <sup>3</sup> /(T/K) - 42.763 · log (T/K) + 1.7336 × 10 <sup>-2</sup> · (T/K) + 5.7138 × 10 <sup>-15</sup> · (T/K) <sup>2</sup> ;<br>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)<br>log (P/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)<br>log (P/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)<br>log (P/mmHg) = [-0.2185 × 11307.6/(T/K)] + 8.221995;<br>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 | 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) $\log(P/\text{atm}) = [1 - 457.025/(T/K)] \times 10^{0.911551 - 6.64936 \times 10^{-4} \cdot (T/K) + 5.25455 \times 10^{-7} \cdot (T/K)^2}$ ; 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)<br>log (P/kPa) = 6.43196 – 1722.154/(205.002 + t/°C);<br>temp range 102.6–185.2°C (Antoine eq. from reported exptl. data, Boublik et al. 1984)<br>log (P/kPa) = 5.68977 – 1234.569/(151.207 + t/°C);<br>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)<br>log (P/kPa) = 6.43196 – 1722.154/(205.002 + t/°C);<br>temp range 102.6–185.2°C (Antoine eq. from reported exptl. data, Boublik et al. 1984)<br>log (P/kPa) = 5.68977 – 1234.569/(151.207 + t/°C);<br>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)<br>log (P/mmHg) = 7.32010 – 1731.515/(206.049 + t/°C);<br>temp range 102–185°C (Antoine eq., Dean 1985, 1992)<br>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<br>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<br>[Pa] | 20 におけ<br>る蒸気圧<br>[Pa] | 測定条件<br>温度 | 試験方法等   | GLP     | reliability                         | 情報源における<br>キースタディの<br>該非 | 値の種類                | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考 | 文献  | ページ番号等                         |
|---------------------|--------------|--------------|------------------------|------------|---|---------|-------------------------------------|--------------------------|---------------------|---------|------------|-----------------------|----|---|--------------------------------|
| 25 NITE初期リス<br>ク評価書 | 40 Pa        | 40           | 40                     | 20 °C      | -   | -       | -                                   | -                        | -                   | -       | 2B         | x                     | -  | IPCS, International Programme on<br>Chemical Safety (2001) ICSC,<br>International Chemical Safety Cards,<br>Geneva.<br>( <a href="http://www.ilo.org/public/english/protectio/safework/cis/products/icsc/dtasht/index.htm">http://www.ilo.org/public/english/protectio/safework/cis/products/icsc/dtasht/index.htm</a> から引用). | p.2                            |
| 26 PhysProp         | 0.49<br>mmHg | 65.32796     | 46.31116               | 25 °C      | -   | -       | -                                   | -                        | experimental result | -       | 2B         | x                     | -  | DAUBERT,TE & DANNER,RP (1985).  | p.1                            |
| 27 REACH登録<br>情報    | 0.4 hPa      | 40           | 40                     | 20 °C      | -   | no      | 2: reliable<br>with<br>restrictions | key study                | experimental result | -       | 4A         | x                     | -  | Ullmann.Aniline.1974,Ullmann's<br>Enzyklopädie der Technischen<br>Chemie. 4th Ed., volume 2, 203. -<br>cited in EU Risk Assessment Report,<br>Aniline CAS 62-53-3, 2004.  | Exp Key Vapour<br>pressure.001 |
| 28 REACH登録<br>情報    | 0.4 hPa      | 40           | 40                     | 20 °C      | no data   | no data | 2: reliable<br>with<br>restrictions | key study                | experimental result | -       | 4A         | x                     | -  | 1993  | Exp Key Vapour<br>pressure.002 |
| 29 SIDS             | 0.4 hPa      | 40           | 40                     | 20 °C      | その他,There<br>is no<br>information<br>about the<br>applied<br>method | -       | -                                   | key study                | -                   | -       | 2A         | -                     | -  | -   | p.8                            |
| 30 USHPV            | 0.49<br>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<br>[mg/L] | 20 における<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH                                 | 試験方法等    | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類         | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>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<br>[mg/L] | 20 における<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等                                       | GLP | reliability | 情報源にお<br>けるキースタ<br>ディの該非 | 値の種類                           | 値の種類の詳細                                      | 信頼性ラ<br>ンク | 評価にお<br>けるキース<br>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<br>flask-residue<br>volume method | -   | -           | -                        | -                              | -  | 2B         | x                     |  | Booth, H.S., Everson, H.E. (1948)<br>Hydrotropic solubilities. Solubilities in<br>40 per cent sodium xylenesulfonate.<br>Ind. Eng. Chem.<br>40(8), 1491-1493..   | p.3243                       |
| 14   | 36220 mg/L           | 36220          | 33811.6032                | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-<br>interferometry       | -   | -           | -                        | -                              | -  | 2B         | x                     |  | Donahue, D.J., Bartell, F.E. (1952)<br>The boundary tension at water-<br>organic liquid interfaces. J. Phys.<br>Chem. 56, 480-484..  | p.3243                       |
| 15   | 34100 mg/L           | 34100          | 31832.5695                | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | -                              | -  | 2B         | x                     |  | Stephen, H., Stephen, Y. (1963)<br>Solubilities of Inorganic and Organic<br>Compounds. Vol. 1 and 2, Pergamon<br>Press, Oxford, U.K..  | p.3243                       |
| 16   | 36600 mg/L           | 36600          | 34166.3356                | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | -                              | -  | 2B         | x                     |  | Kenaga, E.E. (1980) Predicted<br>bioconcentration factors and soil<br>sorption coefficients of pesticides<br>and other chemicals. Ecotoxicol.<br>Environ. Saf. 4, 26-38..  | p.3243                       |
| 17   | 34000 mg/L           | 34000          | 31739.2189                | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | -                              | -  | 2B         | x                     |  | Verschueren, K. (1983) Handbook of<br>Environmental Data on Organic<br>Chemicals. 2nd. Edition, Van<br>Nostrand Reinhold, New York, NY..   | p.3243                       |
| 18   | 56900 mg/L           | 56900          | 53116.5163                | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | estimated<br>by<br>calculation | calculated-activity<br>coeff. γ by<br>UNIFAC | 4C         | x                     |  | Fu, J.-K., Luthy, R.G. (1985)<br>Pollutant Sorption to Soils and<br>Sediments in Organic/Aqueous<br>Solvent Systems. EPA/600/3-<br>85/050.<br>Environmental Research Laboratory,<br>Office of Research and<br>Development, U.S. Environmental<br>Protection Agency, Athens, GA.. Fu,<br>J.-K., Luthy, R.G. (1986) Aromatic<br>compound solubility in solvent/water<br>mixtures. J. Chem. Eng. 112, 328-<br>345.. | p.3243                       |
| 19   | 33800 mg/L           | 33800          | 31552.5176                | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | その<br>他,selected               | -  | 2B         | x                     |  | Riddick, J.A., Bunger, W.B., Sakano,<br>T.K. (1986) Organic Solvents. 4th<br>Edition. John Wiley and Sons, New<br>York..   | p.3243                       |
| 20   | Merck<br>1 g/28.6 mL | 34965.035      |                           | 25         |    | -   | -   | -           | -                        | -                              | -  | 4A         | x                     | One gram dissolves in<br>28.6 ml water, 15.7 ml<br>boil. water |  | Monograph Number:<br>0000659 |
| 21   | 1 g/15.7 mL          | 63694.2675     |                           | 25         |    | -   | -   | -           | -                        | -                              | -  | 4A         | x                     | One gram dissolves in<br>28.6 ml water, 15.7 ml<br>boil. water |  | Monograph Number:<br>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<br>[mg/L] | 20 における<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH                                | 試験方法等   | GLP     | reliability                         | 情報源にお<br>けるキースタ<br>ディの該非 | 値の種類                    | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価にお<br>けるキース<br>タディー | 備考  | 文献   | ページ番号等                          |
|---------------------|------------|----------------|---------------------------|------------|-----------------------------------|---|---------|-------------------------------------|--------------------------|-------------------------|---------|------------|-----------------------|---|--|---------------------------------|
| 22 MOE初期評<br>価      | 34000 mg/L | 34000          | 34000                     | 20 °C      |                                   | -   | -       | -                                   | -                        | -                       | -       | 2B         | x                     | -   | IPCS (1989) International Chemical Safety Cards (1989).  | p.1                             |
| 23 NITE初期リ<br>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. ( <a href="http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm">http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm</a> から引用).                | p.2                             |
| 24 PhysProp         | 36000 mg/L | 36000          | 33606.2318                | 25 °C      |                                   | -   | -       | -                                   | -                        | experiment<br>al result | -       | 2B         | x                     | -   | DAUBERT,TE & DANNER,RP (1985).   | p.1                             |
| 25 REACH登録<br>情報    | 35 g/L     | 35000          | 35000                     | 20 °C      | [no data<br>available<br>for pH.] | no data   | no data | 2: reliable<br>with<br>restrictions | key study                | experiment<br>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<br>solubility.001 |
| 26 SIDS             | 35 g/L     | 35000          | 35000                     | 20 °C      |                                   | その他,There is<br>no information<br>about the<br>applied method |         |                                     | key study                |                         |         | 2A         | x                     | -   |  | p.8                             |
| 27 USHPV            | 36000 mg/L | 36000          | 36000                     | 20 °C      |                                   | -   | -       | -                                   | -                        | experiment<br>al result | -       | 2B         | x                     | -   |  | p.8                             |
| 28 既存点検事<br>業       | 36 g/L     | 36000          | 33606.2318                | 25 °C      |                                   | OECD TG 105   | -       | -                                   | -                        | experiment<br>al result | -       | 1B         |                       | 試験番号 81139K 化<br>学品検査協会 化学品安<br>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<br>温度 | pH | 試験方法等                        | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>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<br>温度 | pH  | 試験方法等                              | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細   | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考   | 文献   | ページ番号等 |
|------|------|------|------------|-----|------------------------------------|-----|-------------|--------------------------|-----------------------------|---|------------|-----------------------|--|--|--------|
| 9    | 0.9  | 0.9  |            |     | その他,shake<br>flask                 | -   | -           | -                        | -                           |   | 2B         | ×                     | 0.90, 0.98, 0.85 (shake<br>flask, Hansch & Leo 1979)   | Hansch, C., Leo, A. (1979)<br>Substituent Constants for Correlation<br>Analysis in Chemistry and Biology.<br>Wiley, New York..   | p.3243 |
| 10   | 0.89 | 0.89 |            | 7.4 | その他,shake<br>flask-UV at<br>pH 7.4 | -   | -           | -                        | -                           |   | 2B         | ×                     | -  | El Tayar, N., van de Waterbeemd,<br>H., Grylaki, M., Testa, B., Trager,<br>W.F. (1984) The lipophilicity of<br>deuterium atoms. A comparison<br>of shake-flask and HPLC (high<br>performance liquid chromatography)<br>methods. Int. J. Pharm. 19, 271-<br>281..   | p.3243 |
| 11   | 0.99 | 0.99 |            |     | -                                  | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | calculated-activity<br>coeff. $\gamma$ from<br>UNIFAC | 4C         | ×                     | -  | Campbell, J.R., Luthy, R.G. (1985)<br>Prediction of aromatic solute partition<br>coefficient using the UNIFAC group<br>contribution model.<br>Environ. Sci. Technol. 19, 980-985..   | p.3243 |
| 12   | 0.81 | 0.81 |            |     | その他,HPLC-<br>k' correlation        | -   | -           | -                        | -                           |   | 2B         | ×                     | 0.81, 1.08 (HPLC-k'<br>correlation, Eadsforth<br>1986) | Eadsforth, C.V. (1986) Application of<br>reverse-phase HPLC for the<br>determination of partition<br>coefficients. Pestic. Sci. 17, 311-<br>325..  | p.3243 |
| 13   | 1.08 | 1.08 |            |     | その他,HPLC-<br>k' correlation        | -   | -           | -                        | -                           |   | 2B         | ×                     | 0.81, 1.08 (HPLC-k'<br>correlation, Eadsforth<br>1986) | Eadsforth, C.V. (1986) Application of<br>reverse-phase HPLC for the<br>determination of partition<br>coefficients. Pestic. Sci. 17, 311-<br>325..  | p.3243 |
| 14   | 0.91 | 0.91 |            |     | その他,RP-<br>HPLC-RT<br>correlation  | -   | -           | -                        | -                           |   | 2B         | ×                     | -  | Eadsforth, C.V. (1986) Application of<br>reverse-phase HPLC for the<br>determination of partition<br>coefficients. Pestic. Sci. 17, 311-<br>325..  | p.3243 |
| 15   | 0.98 | 0.98 |            | 7.5 | その他,shake<br>flask-UV at<br>pH 7.5 | -   | -           | -                        | -                           |   | 2B         | ×                     | -  | Martin-Villodre, A., Pla-Delfina, J.M.,<br>Moreno, J., Perez-Buendia, M.D.,<br>Miralles, J., Collado, E.F., Sanchez-<br>Moyano, E., Del Pozo,<br>A. (1986) Studies on the reliability of<br>a bihyperbolic functional absorption<br>model. I. Ring-substituted anilines. J.<br>Pharmacokinet.<br>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<br>温度 | pH | 試験方法等                                   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細   | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考 | 文献  | ページ番号等 |
|------|------------|------|------------|----|---|-----|-------------|--------------------------|-----------------------------|---|------------|-----------------------|----|---|--------|
| 16   | 1.03       | 1.03 |            |    | その他,RP-<br>HPLC-k'<br>correlation       | -   | -           | -                        | -                           | -   | 2B         | ×                     | -  | D'Amboise, M., Hanai, T. (1982)<br>Hydrophobicity and retention in<br>reversed phase liquid<br>chromatography. J. Liq. Chromatogr.<br>5(2),<br>229-244..  | p.3243 |
| 17   | 0.93       | 0.93 |            |    | その他,HPLC<br>method<br>average           | -   | -           | -                        | -                           | -   | 2B         | ×                     | -  | Ge, J., Liu, W., Dong, S. (1987)<br>Determination of partition coefficient<br>with chemically bonded omega-<br>hydroxysilica as HPLC column<br>packing. Sepu 5(3), 182-185..  | p.3243 |
| 18   | 0.78       | 0.78 |            |    | その他,HPLC-<br>k' correlation             | -   | -           | -                        | -                           | -   | 2B         | ×                     | -  | Miyake, K., Kitaura, F., Mizuno, N.,<br>Terada, H. (1987) Determination of<br>partition coefficient and acid<br>dissociation constant by<br>highperformance<br>liquid chromatography on porous<br>polymer gel as stationary phase.<br>Chem. Pharm. Bull. 35(1), 377-388.. | p.3243 |
| 19   | 1.18       | 1.18 |            |    | -                                       | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | calculated-activity<br>coeff. $\gamma$ from<br>UNIFAC | 4C         | ×                     | -  | Banerjee, S., Howard, P.H. (1988)<br>Improved estimation of solubility and<br>partitioning through correction of<br>UNIFAC-derived activity<br>coefficients. Environ. Sci. Technol.<br>22, 839-841..  | p.3243 |
| 20   | 0.94±0.006 | 0.94 |            |    | その他,shake<br>flask/slow-<br>stirring-GC | -   | -           | -                        | -                           | -   | 2B         | ×                     | -  | De Bruijn, J., Busser, F., Seipnen,<br>W., Hermens, J. (1989)<br>Determination of octanol/water<br>partition coefficients for hydrophobic<br>organic chemicals with the "slow-<br>stirring" method. Environ. Toxicol.<br>Chem. 8, 499-512..                               | p.3243 |
| 21   | 0.9        | 0.9  |            |    | -                                       | -   | -           | -                        | その<br>他,recommend<br>ed     | -   | 2B         | ×                     | -  | Sangster, J. (1989) Octanol-water<br>partition coefficients of simple<br>organic compounds. J. Phys. Chem.<br>Ref. Data 18(3), 1111-1230..<br>Sangster, J. (1993) LOGKOW<br>Database, Sangster Research Lab.,<br>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<br>温度 | pH | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考 | 文献  | ページ番号等 |
|------|------------|-------|------------|----|---|-----|-------------|--------------------------|------|---------|------------|-----------------------|----|---|--------|
| 22   | 0.942±0.01 | 0.942 |            |    | その他,shake<br>flask/stir-flask<br>method by<br>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,<br>inter-<br>laboratory<br>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<br>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-<br>k' correlation,<br>different<br>combinations<br>of stationary<br>and mobile<br>phases under<br>isocratic<br>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-<br>k' correlation,<br>different<br>combinations<br>of stationary<br>and mobile<br>phases under<br>isocratic<br>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<br>温度 | pH | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考  | 文献  | ページ番号等 |
|------|------|------|------------|----|---|-----|-------------|--------------------------|------|---------|------------|-----------------------|---|---|--------|
| 27   | 0.9  | 0.9  |            |    | その他,HPLC-<br>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-<br>k' correlation,<br>different<br>combinations<br>of stationary<br>and mobile<br>phases under<br>isocratic<br>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-<br>k' correlation,<br>different<br>combinations<br>of stationary<br>and mobile<br>phases under<br>isocratic<br>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<br>flask-dialysis<br>tubing-<br>HPLC/UV,<br>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<br>sion<br>electrokinetic<br>chromatograp<br>hy-retention<br>factor<br>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<br>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<br>温度 | pH | 試験方法等                       | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類  | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考 | 文献   | ページ番号等 |
|------|------|------|------------|----|-----------------------------|-----|-------------|--------------------------|---|---------|------------|-----------------------|----|--|--------|
| 33   | 0.91 | 0.91 |            |    | その他,HPLC-<br>k' correlation | -   | -           | -                        | -   |         | 2B         | ×                     |    | Konemann, H., Zelle, R., Busser, F.,<br>Hammers, W.E. (1979)<br>Determination of log P <sub>1</sub> OCT values<br>of chloro-substituted benzenes,<br>toluenes<br>and anilines by high-performance<br>liquid chromatography on ODS-<br>silica. J. Chromatogr. 178, 559-565..  | p.3243 |
| 34   | 0.9  | 0.9  |            |    | その他,shake<br>flask-UV       | -   | -           | -                        | -   |         | 2B         | ×                     |    | Fujita, T., Iwasa, J., Hansch, C.<br>(1964) A new substituent constant<br>derived from partition coefficients. J.<br>Am. Chem. Soc. 86(23),<br>5175-5180..   | p.3243 |
| 35   | 0.9  | 0.9  |            |    | その他,shake<br>flask          | -   | -           | -                        | -   |         | 2B         | ×                     |    | Iwasa, J., Fujita, T., Hansch, C.<br>(1965) Substituent constants for<br>aliphatic functions obtained from<br>partition coefficients. J. Med.<br>Chem. 8, 150-153..  | p.3243 |
| 36   | 0.9  | 0.9  |            |    | その他,shake<br>flask-UV       | -   | -           | -                        | -   |         | 2B         | ×                     |    | Hansch, C., Quinlan, J.E., Lawrence,<br>G.L. (1968) The linear free-energy<br>relationship between partition<br>coefficients and the aqueous<br>solubility of organic liquids. J. Org.<br>Chem. 33, 347-350..  | p.3243 |
| 37   | 0.9  | 0.9  |            |    | -                           | -   | -           | -                        | -   |         | 2B         | ×                     |    | Leo, A., Hansch, C., Elkins, D.<br>(1971) Partition coefficients and their<br>uses. Chem. Rev. 71, 525-616..<br>Hansch, C., Leo, A. (1979)<br>Substituent Constants for Correlation<br>Analysis in Chemistry and Biology.<br>Wiley, New York.. Hansch, C., Leo,<br>A. (1983) Medchem Project. Pomona<br>College, Claremont, CA.. Hansch, C.,<br>Leo, A. (1985) Medchem Project.<br>Pomona College, Claremont, CA.. | p.3243 |
| 38   | 0.9  | 0.9  |            |    | -                           | -   | -           | -                        | その他,inter-<br>laboratory<br>studies. shake<br>flask average | -       | 2B         | ×                     |    | Eadsforth, C.V., Moser, P. (1983)<br>Assessment of reverse-phase<br>chromatographic methods for<br>determining partition coefficients.<br>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<br>温度 | pH  | 試験方法等                              | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考 | 文献  | ページ番号等 |
|------|-----------|------|------------|-----|------------------------------------|-----|-------------|--------------------------|------|---------|------------|-----------------------|----|---|--------|
| 39   | 0.89      | 0.89 |            | 5.6 | その他,shake<br>flask-UV at<br>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-<br>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<br>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-<br>RT<br>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<br>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<br>温度 | pH | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>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..<br>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<br>温度 | pH  | 試験方法等                            | GLP | reliability                           | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考 | 文献  | ページ番号等                               |
|---------------------|------|------|------------|-----|----------------------------------|-----|---------------------------------------|--------------------------|------------------------|---------|------------|-----------------------|----|---|--------------------------------------|
| 49 MOE初期評<br>価      | 0.9  | 算出不可 |            |     | -                                | -   | -                                     | -                        | experimental<br>result | -       | 3          | ×                     | -  | 分配係数計算用プログラム“C Log P”,<br>アダムネット(株).  | p.1                                  |
| 50 NITE初期リ<br>スク評価書 | 0.9  | 0.9  |            |     | -                                | -   | -                                     | -                        | experimental<br>result | -       | 2B         | ×                     | -  | SRC, Syracuse Research<br>Corporation (2003) KowWin<br>Estimation Software, ver. 1.66, North<br>Syracuse,NY.. | p.2                                  |
| 51                  | 1.08 | 1.08 |            |     | -                                | -   | -                                     | -                        | その他(推定<br>値),推定値       | -       | 4C         | ×                     | -  | SRC, Syracuse Research<br>Corporation (2003) KowWin<br>Estimation Software, ver. 1.66, North<br>Syracuse,NY.. | p.2                                  |
| 52 PhysProp         | 0.9  | 0.9  |            |     | -                                | -   | -                                     | -                        | experimental<br>result | -       | 2B         | ×                     | -  | HANSCH,C ET AL. (1995).   | p.1                                  |
| 53 REACH登録<br>情報    | 0.91 | 0.91 | 25 °C      | 7.5 |                                  | yes | 1: reliable<br>without<br>restriction | key study                | experimental<br>result |         | 4A         | ×                     |    |   | Exp Key Partition<br>coefficient.001 |
| 54 SIDS             | 0.9  | 0.9  | 20 °C      |     | その<br>他,Shaking-<br>flask method |     |                                       | key study                | experimental<br>result |         | 2A         |                       |    |   | p.8                                  |
| 55 USHPV            | 0.91 | 0.91 |            |     | -                                | -   | -                                     | -                        | experimental<br>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<br>[L/kg]                            | 測定条件<br>温度  | pH | 土壌条件  | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細  | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考  | 文献   | ページ番号等              |
|------|-----------|--------|---|-------------|----|---|--|-----|-------------|--------------------------|-----------------------------|--|------------|-----------------------|---|--|---------------------|
| 1    | EPI Suite | Koc    | 25.19 L/kg[2B<br>以上の値を用<br>いて推定<br>(2C) ] | 25.19       |    |   | KOCWIN   |     |             |                          | (Q)SAR                      |  | 2C         | ×                     |   |  |                     |
| 2    | HSDB      | Koc    | 43.8 ~ 497.7                              | 270.75      |    | in five<br>European<br>soils                    |  |     |             |                          |                             |  | 2B         | ×                     |   |  | ENVIRONMENTAL FATE: |
| 3    | IUCLID    | logKoc | 1.65                                      | 44.66835922 |    |   | その他,Computer<br>Program:<br>PCKOC, PC<br>Software to<br>Estimate Soil<br>Sorption<br>Coefficients,<br>Version 1.22 |     |             |                          | estimated by<br>calculation | Computer<br>Program:<br>PCKOC, PC<br>Software to<br>Estimate Soil<br>Sorption<br>Coefficients,<br>Version 1.22 | 4C         | ×                     |   |  | p.21                |
| 4    |           | logKoc | 2.07                                      | 117.4897555 |    |   | その他  |     |             |                          | experimental<br>result      |  | 4A         | ×                     |   |  | p.21                |
| 5    |           | logKoc | 2.14                                      | 138.0384265 |    |   | その他  |     |             |                          | experimental<br>result      |  | 4A         | ×                     |   |  | p.21                |
| 6    | Mackay    | logKoc | 3.59                                      | 3890.45145  |    | colloidal<br>organic<br>carbon/gro<br>und water | -  | -   | -           | -                        | -                           | -  | 2B         | ×                     |   | Means, J.C., Wood, S.G.,<br>Hassett, J.J., Banwart, W.L.<br>(1982) Sorption of amino- and<br>carboxy-substituted<br>polynuclear aromatic<br>hydrocarbons by sediments<br>and soils. Environ. Sci.<br>Technol. 16, 93-98..                          | p.3243              |
| 7    |           | logKoc | 1.17                                      | 14.79108388 |    | soil  | -  | -   | -           | -                        | その他,quoted<br>as log K_OM   | -  | 2B         | ×                     |   | Sabljic, A. (1987) On the<br>prediction of soil sorption<br>coefficients of organic<br>pollutants from molecular<br>structure: Application of<br>molecular topology model.<br>Environ. Sci. Technol. 21, 358-<br>366                               | p.3243              |
| 8    |           | logKoc | 2.12                                      | 131.8256739 |    | Podzol<br>soil,                                 | -  | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | calculated values  | 4C         | ×                     | 1.08, 1.25, 0.98 (RP-HPLC-<br>k' correlation on 3 different<br>stationary phases, Szabo et<br>al. 1995) | von Oepen, B., Kordel, W.,<br>Klein, W. (1991) Sorption of<br>nonpolar and polar compounds<br>in soils: Processes,<br>measurements and<br>experience with the<br>applicability of the modified<br>OECD-guideline 106.<br>Chemosphere 22, 285-304.. | p.3243              |
| 9    |           | logKoc | 2.05                                      | 112.2018454 |    | Alfisol soil                                    | -  | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | calculated values  | 4C         | ×                     | 1.08, 1.25, 0.98 (RP-HPLC-<br>k' correlation on 3 different<br>stationary phases, Szabo et<br>al. 1995) | von Oepen, B., Kordel, W.,<br>Klein, W. (1991) Sorption of<br>nonpolar and polar compounds<br>in soils: Processes,<br>measurements and<br>experience with the<br>applicability of the modified<br>OECD-guideline 106.<br>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<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH | 土壌条件     | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細           | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考  | 文献  | ページ番号等 |
|------|--------|-------|----------------|------------|----|----------|---|-----|-------------|--------------------------|-----------------------------|-------------------|------------|-----------------------|---|---|--------|
| 10   | logKoc | 2.06  | 114.8153621    |            |    | sediment | -   | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | calculated values | 4C         | x                     | 1.08, 1.25, 0.98 (RP-HPLC-<br>k' correlation on 3 different<br>stationary phases, Szabo et<br>al. 1995) | von Oepen, B., Kordel, W.,<br>Klein, W. (1991) Sorption of<br>nonpolar and polar compounds<br>in soils: Processes, measure-<br>ments and experience with the<br>applicability of the modified<br>OECD-guideline 106.<br>Chemosphere 22, 285-304..                             | p.3243 |
| 11   | logKoc | 0.596 | 3.944573021    |            |    | -        | -   | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | calculated-K_OW   | 4C         | x                     | -   | Kollig, H.P., Ed. (1993)<br>Environmental Fate Constants<br>for Organic Chemicals under<br>Consideration of EPA's<br>Hazardous Waste<br>Identification Projects. EPA<br>Report EPA/600/R-93/132,<br>U.S. Environmental Research<br>Lab., Athens GA..                          | p.3243 |
| 12   | logKoc | 0.98  | 9.54992586     |            |    | -        | その他,RP-<br>HPLC-k'<br>correlation on<br>3 different<br>stationary<br>phases | -   | -           | -                        | -                           | -                 | 2B         | x                     | 1.08, 1.25, 0.98 (RP-HPLC-<br>k' correlation on 3 different<br>stationary phases, Szabo et<br>al. 1995) | Szabo, G., Guzzi, J., Bulman,<br>R.A. (1995) Examination of<br>silica-salicylic acid and silica-8-<br>hydroxyquinoline HPLC<br>stationary phases<br>for estimation of the adsorption<br>coefficient of soil for some<br>aromatic hydrocarbons.<br>Chemosphere 30, 1717-1727.. | p.3243 |
| 13   | logKoc | 1.08  | 12.02264435    |            |    | -        | その他,RP-<br>HPLC-k'<br>correlation on<br>3 different<br>stationary<br>phases | -   | -           | -                        | -                           | -                 | 2B         | x                     | 1.08, 1.25, 0.98 (RP-HPLC-<br>k' correlation on 3 different<br>stationary phases, Szabo et<br>al. 1995) | Szabo, G., Guzzi, J., Bulman,<br>R.A. (1995) Examination of<br>silica-salicylic acid and silica-8-<br>hydroxyquinoline HPLC<br>stationary phases<br>for estimation of the adsorption<br>coefficient of soil for some<br>aromatic hydrocarbons.<br>Chemosphere 30, 1717-1727.. | p.3243 |
| 14   | logKoc | 1.25  | 17.7827941     |            |    | -        | その他,RP-<br>HPLC-k'<br>correlation on<br>3 different<br>stationary<br>phases | -   | -           | -                        | -                           | -                 | 2B         | x                     | 1.08, 1.25, 0.98 (RP-HPLC-<br>k' correlation on 3 different<br>stationary phases, Szabo et<br>al. 1995) | Szabo, G., Guzzi, J., Bulman,<br>R.A. (1995) Examination of<br>silica-salicylic acid and silica-8-<br>hydroxyquinoline HPLC<br>stationary phases<br>for estimation of the adsorption<br>coefficient of soil for some<br>aromatic hydrocarbons.<br>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<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH   | 土壌条件                                    | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細           | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考   | 文献   | ページ番号等 |
|------|--------|------|----------------|------------|------|---|--|-----|-------------|--------------------------|-----------------------------|-------------------|------------|-----------------------|--|--|--------|
| 15   | logKoc | 1.41 | 25.70395763    |            |      | soil                                    | -  | -   | -           | -                        | estimated by<br>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-<br>screening<br>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<br>他,calculated-<br>PCKOC<br>fragment<br>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-<br>montmorill<br>onite at pH<br>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-<br>montmorill<br>onite at pH<br>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<br>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<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH | 土壌条件                                | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                                    | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>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<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH        | 土壌条件                              | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>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<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH | 土壌条件 | 試験方法等 | GLP | reliability | 情報源における<br>ケーススタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るケースス<br>タディー | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|----------|--------|------|----------------|------------|----|------|-------|-----|-------------|---------------------------|-----------------------------|---------|------------|------------------------|----|----|--------|
| 45 USHPV | logKoc | 2.07 | 117.4897555    |            |    | -    | -     | -   | -           | -                         | estimated by<br>calculation | -       | 4C         | x                      | -  |    | p.10   |
| 46       | logKoc | 2.14 | 138.0384265    |            |    | -    | -     | -   | -           | -                         | estimated by<br>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<br>[Pa・m <sup>3</sup> /mol] | 測定条件<br>温度 | pH | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディ | 備考 | 文献  | ページ番号等  |
|----------------|---------------------------------|----------------------------------|------------|----|-------------|--------------------------|---------------------|---------|------------|----------------------|----|---|---|
| 1 CRC          | 14 kPa m <sup>3</sup> /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 <sup>3</sup> /mol    | 0.139                            |            |    |             |                          | (Q)SAR              |         | 2C         | x                    |    |   |   |
| 3 HSDB         | 2.02E-6 atm・m <sup>3</sup> /mol | 0.2046765                        |            |    |             |                          |                     |         | 2B         | x                    |    |   | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:           |
| 4 Mackay       | 0.193 Pa・m <sup>3</sup> /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 <sup>3</sup> /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 <sup>3</sup> /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 <sup>3</sup> /mol    | 0.205                            |            |    | -           | -                        | experimental result |         | 2B         | x                    |    | SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY. ( <a href="http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm">http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm</a> から引用).                                     | 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<br>[Pa・m <sup>3</sup> /mol] | 測定条件<br>温度 | pH | reliability                         | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価におけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考 | 文献   | ページ番号等                              |
|--------------------|--|----------------------------------|------------|----|-------------------------------------|--------------------------|------------------------|---------|------------|-----------------------|----|--|-------------------------------------|
| 8 NITE初期リス<br>ク評価書 | 0.00000202 atm・<br>m <sup>3</sup> /mol | 0.2046765                        |            |    | -                                   | -                        | experimental<br>result | -       | 2B         | x                     |    | SRC, Syracuse Research<br>Corporation (2002) PhysProp<br>Database, North Syracuse,<br>NY.<br>( <a href="http://esc.syrres.com/interkow/ph&lt;br/&gt;ysdemo.htm">http://esc.syrres.com/interkow/ph<br/>ysdemo.htm</a> から引用).  | p.2                                 |
| 9 PhysProp         | 0.00000202 atm・<br>m <sup>3</sup> /mol | 0.2046765                        |            |    | -                                   | -                        | experimental<br>result | -       | 2B         | x                     |    | JAYASINGHE,DS ET AL. (1992).   | p.1                                 |
| 10 REACH登録情<br>報   | 0.205 Pa・m <sup>3</sup> /mol           | 0.205                            |            |    | 2: reliable<br>with<br>restrictions | key study                | experimental<br>result |         | 4A         | x                     |    |  | Exp Key Henry's Law<br>constant.001 |
| 11 SIDS            | 0.106 Pa・m <sup>3</sup> /mol           | 0.106                            |            |    |                                     | key study                |                        |         | 2A         |                       |    |  | p.198                               |
| 12 USHPV           | 0.00000202 atm・<br>m <sup>3</sup> /mol | 0.2046765                        |            |    | -                                   | -                        | -                      | -       | 2B         | x                     |    | SRC. The Physical Properties<br>Database (PHYSPROP).<br>Syracuse, NY: Syracuse<br>Research Corporation. Available<br>from<br><a href="http://www.syrres.com/esc/physpr&lt;br/&gt;op.htm">http://www.syrres.com/esc/physpr<br/>op.htm</a> as of September 15,<br>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<br>温度 | pH | 試験方法等 | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>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<br>温度 | pH | 試験方法等                  | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>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 <a href="http://www.syrres.com/esc/physprop.htm">http://www.syrres.com/esc/physprop.htm</a> 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 <sub>2</sub> 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 <sub>2</sub> 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 <sub>2</sub> 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 <sub>2</sub> 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 <sub>2</sub> 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 <sub>2</sub> 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 <sub>3</sub> 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<br>品検査協会 化学品安全<br>センター久留米研究所<br>基準物質 アニリン BOD<br>による分解度<br>窒素は最終形態をNH3と<br>し、TODの算出は純度<br>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<br>品検査協会 化学品安全<br>センター久留米研究所<br>基準物質 アニリン BOD<br>による分解度<br>窒素は最終形態をNH3と<br>し、TODの算出は純度<br>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<br>品検査協会 化学品安全<br>センター久留米研究所<br>基準物質 アニリン BOD<br>による分解度<br>窒素は最終形態をNH3と<br>し、TODの算出は純度<br>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<br>6CO2+2H2O +NH3 =72.3(mg) アニリンの TOD: C6H7N+8.75 O2<br>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<br>品検査協会 化学品安全<br>センター久留米研究所<br>基準物質 アニリン BOD<br>による分解度<br>窒素は最終形態をNH3と<br>し、TODの算出は純度<br>100%として計算した |    | K1139  |
| 44   |     | 85 %[NH3: 被験物質の TOD: C6H7N+7O2<br>6CO2+2H2O +NH3 =72.3(mg) アニリンの TOD: C6H7N+8.75 O2<br>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<br>品検査協会 化学品安全<br>センター久留米研究所<br>基準物質 アニリン BOD<br>による分解度<br>窒素は最終形態をNH3と<br>し、TODの算出は純度<br>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<br>品検査協会 化学品安全<br>センター久留米研究所<br>基準物質 アニリン BOD<br>による分解度<br>窒素は最終形態をNH3と<br>し、TODの算出は純度<br>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<br>品検査協会 化学品安全<br>センター久留米研究所<br>基準物質 アニリン BODに<br>よる分解度<br>窒素は最終形態をNH3と<br>し、TODの算出は純度<br>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 | 情報源におけるキースタディの該当 | 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 |    | 1     |          |      | BCF |       | 3.162 L/kg (wet) (2B以上の値を用いて推定 (2C) ) | 3.162       | BCFBFWIN   |     |             |                  | (Q)SAR            |         | 2C     |               |    |  |        |
| 2 Mackay    |    |       |          |      | BCF |       | 2.6±0.06                              | 2.6         | Zebrafish<br>pH: 8.1 ± 0.1<br>26 ± 1             |     |             |                  |                   |         |        |               |    | Zok, S., et al. (1991)<br>Bioconcentration, metabolism and toxicity of substituted anilines in the zebrafish (Brachydanio rerio).<br>Sci. Total Environ. 109/110: 411-421. | p.3245 |
| 3 SIDS      |    |       |          |      | BCF |       | 2.6±0.06                              | 2.6         | Zebrafish<br>0.2 µg/L<br>pH: 8.1 ± 0.1<br>26 ± 1 |     |             |                  |                   |         |        |               |    | Zok, S., et al. (1991)<br>Bioconcentration, metabolism and toxicity of substituted anilines in the zebrafish (Brachydanio rerio).<br>Sci. Total Environ. 109/110: 411-421. | p.26   |
| 4 USHPV     |    |       |          |      | BCF |       | 2.6                                   | 2.6         | Zebrafish  |     |             |                  | experimental data |         |        |               |    |  |        |