

(案)

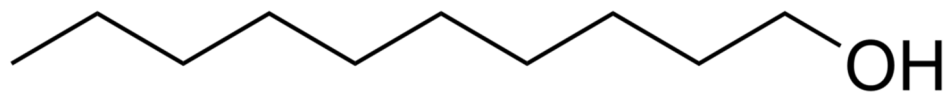
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

デカン-1-オール

優先評価化学物質通し番号 170



平成 29 年 11 月

経 産 省

目 次

29		
30		
31	1 評価対象物質の性状	1
32	1-1 物理化学的性状及び濃縮性.....	1
33	1-2 分解性	4
34	2 【付属資料】.....	6
35	2-1 物理化学的性状等一覧	6
36	2-2 出典	6
37		
38		

39 1 評価対象物質の性状

40 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
41 ータを示す。

42

43 1-1 物理化学的性状及び濃縮性

44 下表に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示す。なお、表中の下
45 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。

46

47 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	—	158.29	—	158.29
融点	°C	6.4 ¹⁾	測定値	6.4 ¹⁾
沸点	°C	229 ¹⁾	101.3 kPa での測定値	229 ¹⁾
蒸気圧	Pa	0.84 ²⁾	20°Cでの測定値の平均	0.80 ¹⁾
水に対する溶解度	mg/L	36 ^{2,3)}	20°Cでの測定値	21.1 ⁴⁾
1-オクタールと水との間の分配係数(logPow)	—	4.5 ⁴⁾	測定値	4.5 ⁴⁾
ヘンリー係数	Pa·m ³ /mol	3.24 ^{5,6)}	測定値	3.24 ^{5,6)}
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	1132 ⁴⁾	4 土壌での測定値の平均	1460 ⁴⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	18 ⁷⁾	BCFBAFWIN による推計値	18 ⁷⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	2	logPow と BCF から設定 ⁸⁾	2
解離定数(pKa)	—	—	解離性の基を有さない物質	— ⁹⁾

48 1) OECD (2006)

49 2) Mackay (2006)

50 3) Barton, A. F. M. (1984)

51 4) ECHA

52 5) HSDB

53

6) PhysProp

7) EPI Suite

8) MHLW, METI, MOE (2014)

9) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない

54 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

55 ①融点

56 評価Ⅰで採用した値は、OECD (2006) に記載された測定値 (6.4 °C) である。複数の報告
57 書においてもこの値が記載されており、評価Ⅱにおいてもこの値 (6.4 °C) を用いる。

58

59 ②沸点

60 評価Ⅰで採用した値は、OECD (2006) に記載された標準圧力 (101.3 kPa) での測定値
61 (229 °C) である。複数の報告書においても近い値が多いことから、評価Ⅱにおいてもこの値
62 (229 °C) を用いる。

63

64 ③蒸気圧

65 評価Ⅰで採用した値は、OECD (2006) に記載された 25℃での測定値を 20℃に補正した
66 値 (0.80 Pa)である。Mackay(2006) では、20℃の蒸気圧の測定値 (0.59 Pa, 1.1 Pa)が記載
67 されていることから、評価Ⅱにおいては、その平均値 (0.84 Pa) を用いる。

68

69 ④水に対する溶解度

70 評価Ⅰで採用した値は、ECHA に記載された OECD TG 105 に準拠した 20℃の測定値
71 (21.1 mg/L) である。複数の報告書について精査した結果、Barton, A. F. M. (1984) IUPAC
72 Solubility data の 25℃の測定値 (37 mg/L) を採用していた報告書が多かったため、
73 Barton, A. F. M. (1984) IUPAC Solubility data について調査したところ、20℃の測定値
74 (36 mg/L) が推奨値とされており、またそのデータは Mackay (2006) にも記してあった。
75 よって、評価Ⅱでは、この値 (36 mg/L)を用いる。

76

77 ⑤logPow

78 評価Ⅰで採用した値は、ECHA に記載された OECD TG 117 に準拠した測定値 (4.5) で
79 ある。複数の報告書においても近い値が多いことから、評価Ⅱにおいてもこの値 (4.5)を用
80 いる。

81

82 ⑥ヘンリー係数

83 評価Ⅰで採用した値は、HSDB,PhysProp に記載されている測定値 (3.24 Pa・m³/mol)で
84 ある。評価Ⅱにおいてもこの値 (3.24 Pa・m³/mol) を用いる。

85

86 ⑦Koc

87 評価Ⅰで採用した値は、ECHA に記載された OECD TG 106 に準拠した測定値 (1460
88 L/kg)である。本値について精査したところ、以下の 4 つの土壌と活性汚泥の吸着係数と脱
89 着係数の各中央値の平均値であることが判明した。

90

91

表 1-2 ECHA の Koc 試験データ

土壌	pH	有機炭素含有率 【%】	Koc 値 【L/kg】	測定温度 【℃】
Silt Loam soil	6.5-6.8	4.7	1010	20
Loamy Sand Soil	5.9-6.0	1.2	1218	20
Clay Loam Soil	5.4-5.6	4.3	1141	20
Sandy soil	5.5	0.51	1160	20
Activated Sludge Solids	6.3-6.4	28.57	1433	20

92

93 評価Ⅱにおいては、活性汚泥を除いた上記 4 つの土壌の値の各吸着係数の平均値 (1132
94 L/kg)を用いる。

95

96 ⑧BCF

97 評価Ⅰで採用した値は、BCFBAF で算出された推計値である。BCF の測定値が得られず、
98 また logPow は評価Ⅱにおいて値を変更しなかったため、評価Ⅱにおいてもこの値 (18)を
99 用いる。

100

101 ⑨BMF

102 評価Ⅰで採用した値は、logPow (4.5) 及び BCF (18L/kg) から化審法における優先評価
103 化学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。) に従
104 って設定したものである。BMF の測定値は得られなかったため、評価Ⅱにおいてもこの値
105 (2) を用いる。

106

107 ⑩解離定数(pKa)

108 評価Ⅰにおいて解離定数は考慮しない。ECHA では当該物質の pKa が 15.76 との記載が
109 あり、環境中では非解離と考えられる。また、OECD (2006)では、「長鎖脂肪族アルコール
110 は極めて弱い酸であり、強塩基性条件下 (pH>約 16) でのみ解離する。環境中において通
111 常考えられる pH 範囲 (pH4~9) では、これらの物質はイオン化されない」とあることか
112 ら、本物質については解離性を考慮しないこととする。

113

114

115 1-2 分解性

116 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

117

118

表 1-3 分解に係るデータのまとめ

項目		半減期 (日)	詳細	
大気	大気における総括分解半減期	NA		
	機序別の半減期	OH ラジカルとの反応	1.0	AOPWIN (V. 1.92) ¹⁾ により推計。反応速度定数の推定値から、OH ラジカル濃度を 5×10^5 molecule/cm ³ として算出 ^{2,3)}
		オゾンとの反応	NA	
		硝酸ラジカルとの反応	NA	
水中	水中における総括分解半減期	NA		
	機序別の半減期	生分解	4	汚水の好気性生分解 ²⁾
		加水分解	-	加水分解の基を持たない ²⁾
		光分解	NA	
土壌	土壌における総括分解半減期	NA		
	機序別の半減期	生分解	4	水中生分解半減期の値と仮定
		加水分解	-	水中加水分解の項参照
底質	底質における総括分解半減期	NA		
	機序別の半減期	生分解	16	水中生分解半減期の4倍と仮定
		加水分解	-	水中加水分解の項参照

119

1) EPI Suite(2012)

3) MOE(2009)

120

2) HSDB

121

NA:情報が得られなかったことを示す

122

-:無視できると考えられることを示す

123

124

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

126

127 ①大気

128

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

130

①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

131

大気中における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値に関する情報は得られなかったため、AOPWIN (v1.92) により推計された 1.54×10^{-11} cm³/molecule/s を半減期算出に採用する。この反応速度定数は HSDB、MOE (2009)にも記載されている。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの 5×10^5 molecule/cm³ とした場合、半減期は 1.0 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (1.0 日) を用いる。

136

137 ②水中

138

水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、生分解と加水分解の機序別

139 の半減期に関する情報が得られた。

140 ②-1 生分解の半減期

141 HSDB では、汚水の好気性生分解の半減期として 4 日のデータがあったので、これを用
142 いる。

143 なお、類似物質として同じ官報公示番号 (2-217) である物質 (2-エチルヘキサノール、
144 トリデシルアルコール等) の分解度試験の結果が得られ、それらはすべて良分解性と判定
145 されており、その結果を踏まえて本物質も良分解との判定がされている。

146 また、OECD (2006) に、OECD TG 301D の結果として分解度 88%、OECD TG 301B の
147 結果として分解度 29% の記載があった。

148 ②-2 加水分解の半減期

149 HSDB では、本物質は加水分解性の基を持たないとの記載があるため、評価Ⅱでは加水
150 分解しないとする。

151

152 ③土壌

153 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。また、機序別の半減期に関
154 する情報も得られなかった。

155 ③-1 生分解の半減期

156 半減期に関するデータは得られなかったため、評価Ⅱにおいては技術ガイダンスに従っ
157 て、土壌中での生分解半減期を水中の生分解半減期の 4 日とする。

158 ③-2 加水分解の半減期

159 HSDB では、本物質は加水分解性の基を持たないとの記載があるため、評価Ⅱでは加水
160 分解しないとする。

161

162 ④底質

163 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
164 する情報も得られなかった。

165 ④-1 生分解の半減期

166 半減期に関するデータは得られなかったため、評価Ⅱにおいては技術ガイダンスに従っ
167 て、底質中での生分解半減期を水中の生分解半減期の 4 倍である 16 日とする。

168 ④-2 加水分解の半減期

169 HSDB では、本物質は加水分解性の基を持たないとの記載があるため、評価Ⅱでは加水
170 分解しないとする。

171

172 **2 【付属資料】**

173 **2-1 物理化学的性状等一覧**

174 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

175

176 **2-2 出典**

177 Barton, A. F. M. (1984) IUPAC solubility data series volume 15

178 ECHA: Information on Chemicals – Registered substances.

179 [http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances,](http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances)

180 (2017-02-23 閲覧).

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

182 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank.

183 [http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB,](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB) (2017-02-23 閲覧).

184 Mackay(2006): Mackay, D., Shiu, W. Y., Ma, K. C., & Lee, S. C. Handbook of

185 physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. 2nd ed.,

186 CRC press, 2006.

187 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

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

189 MOE(2009): 化学物質の環境リスク評価 第7巻, 1-デシルアルコール. 2009.

190 OECD (2006): SIDS Initial Assessment Report, Long Chain Alcohols. 2006.

191 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-02-23 閲覧).

情報源略称	詳細等
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, Version 2013, CRC-Press
ECHA	Information on Chemicals – Registered substances.
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
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」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SIDS	OECD: SIDSレポート

基本情報

優先通し番号	170
公示名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 是非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-是非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-是非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 SIDS	融点	6.4 °C	6.4			2: reliable with restrictions	key study	experimental result				×	○	Budavari, S. (ed.). 1996. Merck Index. 12th ed. Whitehouse Station: Merck Research Laboratories. Lington, A.W. and Bevan, C. 1994. Alcohols. In: Clayton, G.D. and Clayton, F.E. (eds.). Patty's Industrial Hygiene and Toxicology. vol. II, part D. New York: John Wiley & Sons, Inc. Pp. 2585-2760	p.17; p.26; SIDS Dossier p.202
2 Merck	融点	6.4 °C	6.4					-				×			
3 MOE初期評 価	融点	6.4 °C	6.4					-		2B	×			O'Neil, M.J., A. Smiyh, P.E. Heckelman and S. Budavari (eds.) (2001): The merck index - Encyclopedia of chemicals, drugs and biologicals. 13th. Merck and Co., Inc. Whitehouse Station, NJ	p.1
4	融点	6.9 °C	6.9					-		2B	×			Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton. Taylor and Francis. (CD-ROM)	p.1
5	融点	6.4 °C	6.4					-		2B	×			O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM)	p.1
6	融点	7 °C	7					-		2B	×			Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 212. Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM)	p.1
7 Aldrich	融点	5~7 °C	6					-		2B	×				p.838
8 CRC	融点	7 °C[7(1)]	7					-		2B	×				Physical Constants of Organic Compounds
9	融点	7 °C	7					-		2B	×				LABORATORY SOLVENTS AND OTHER LIQUID REAGENTS
10	融点	7 °C	7					-		2B	×				Enthalpy of Fusion
11 EPI Suite	融点	7.89 °C	7.89	MPBPWIN				(Q)SAR	Mean Value		×				
12 HSDB	融点	7 °C	7					-		2B	×			Haynes, W.M. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics, 95th Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2014-2015. p. 3-142	Chemical/Physical Properties: > Melting Point:
13 Mackay	融点	6.9 °C	6.9					-		2B	×			Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th CRC Press, Boca Raton, Florida	p.2549
14 PhysProp	融点	6.9 °C	6.9					-			×				
15 ECHA	流動点	6 °C	6	その他, other guideline: ASTM-D97	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result			×			[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2009, [Report Date]: 2009	001 Key Experimental result

基本情報

優先通し番号	170
公示名称	デカノール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPaにおける 沸点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 SIDS	229 °C	229	229.0113	1013 hPa			2: reliable with restrictions	key study	experimental result		2A	○	○		Beilstein ONLINE.	p.18; p.26; SIDS Dossier p.203
2 Aldrich	231 °C	231	231	760 mmHg					-		2B	×				p.838
3 CRC	229 ° C[229(3)]	229	229	101.325 kPa[760m mHg]					-		2B	×				Physical Constants of Organic Compounds
4	502 K[502(3)]	228.85	502	101.325 kPa[1 atmospher e]					-		2B	×			Rosenthal, D. J., and Teja, A. S., Ind. Eng. Chem. Res. 28, 1693, 1989 Efremov, Yu. V., Zh. Fiz. Khim. 40, 1240, 1966 Quadri, S. K., Khilar, K. C., Kudchadker, A. P., and Patni, M. J., J. Chem. Thermodyn. 23, 67, 1991 Anselme, M. J., and Teja, A. S., Fluid Phase Equilib. 40, 127, 1988	Critical Constants of Organic Compounds
5	229 °C	229	229	101.325 kPa[760m mHg]					-		2B	×			Majer, V., and Svoboda, V., Enthalpies of Vaporization of Organic Compounds, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1985.	Enthalpy of Vaporization
6	229 °C	229	229	760 mmHg					-		2B	×				LABORATORY SOLVENTS AND OTHER LIQUID REAGENTS
7	229 °C	229	229	101.325 kPa					-		2B	×				Flammability of Chemical Substances
8 EPI Suite	238.62 °C	238.62			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method	2C	×				
9 HSDB	229 °C	229							-		2B	×			Haynes, W.M. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 95th Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2014-2015. p. 3-142	Chemical/Physical Properties: > Boiling Point:
10	115~120 ° C	117.5	152.42124	15 mmHg					-		2B	×			O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2013., p. 515	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
11	109.5 °C	109.5	144.0275	8 mmHg					-		2B	×			O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2013., p. 515	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
12 Mackay	231.1 °C	231.1							-		4A	×			Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th CRC Press. Boca Raton, Florida	p.2549
13 Merck	232.9 °C	232.9	232.9	760 mmHg					-		2B	×				
14	115~120 ° C	117.5	152.42124	15 mmHg					-		2B	×				
15	109.5 °C	109.5	144.0275	8 mmHg					-		2B	×				
16 MOE初期評 価	232.9 °C	232.9							-		4A	×			O'Neil, M.J., A. Smiyh, P.E. Heccelman and S. Budavari (eds.) (2001): The merck index - Encyclopedia of chemicals, drugs and biologicals. 13th. Merck and Co., Inc. Whitehouse Station, NJ.	p.1
17	231.1 °C	231.1	231.1	760 mmHg					-		2B	×			Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).	p.1

基本情報

優先通し番号	170
公示名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPaにおける 沸点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
18	232.9 °C	232.9	232.9	760 mmHg					-		2B	×			O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM).	p.1
19	230 °C	230	230	760 mmHg					-		2B	×			Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 212.	p.1
20	231 °C	231							-		4A	×			Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).	p.1
21 PhysProp	231.1 °C	231.1							-		4A	×				
22 ECHA	229 ° C[444.5 °F (= 229 °C)]	229	229	1 atm	その他, other guideline: ASTM-D1120	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×			[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2009, [Report Date]: 2009	001 Key Experimental result

基本情報

優先通し番号	170
公示名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該当	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価 I)	キースタディ-該当 (評価 I)	キースタディ-該当 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 Mackay	1.10 Pa	1.1	1.1	20 °C	その他, evaporation rate-gravimetric method				experimental result		2B	×	○		Gückel, W., Kästel, R., Lewerenz, J., Synnatschke, G. (1982) A method for determining the volatility of active ingredients used in plant protection. Part III: The temperature relationship between vapour pressure and evaporation rate. Pestic. Sci. 13, 161-168.	p.2549
2	0.5866 Pa	0.5866	0.5866	20 °C	その他, evaporation rate-gravimetric method				experimental result		2B	×	○		Gückel, W., Synnatschke, G., Rittig, R. (1973) A method for determining the volatility of active ingredients used in plant protection. Pestic. Sci. 4, 137-147.	p.2549
3	133.3 Pa	133.3	6.8824064	69.5 °C					-		4A	×			Stull, D.R. (1947) Vapor pressure of pure substances: Organic compounds. Ind. Eng. Chem. 39(4), 517-560.	p.2549
4	747 Pa	747	7.4242298	105.0 °C	その他, ebulliometry-differential thermal analysis				experimental result		4A	×			Kemme, H.R., Kreps, S.I. (1969) Vapor pressure of primary n-alkyl chlorides and alcohols. J. Chem. Eng. Data 14(1), 98-102.	p.2549
5	1.0 Pa	1	0.7089026	25 °C	その他, comparative ebulliometry				外挿 (補外)		4C	×			Ambrose, D., Sprake, C.H.S. (1970) Thermodynamic properties of organic oxygen compounds. XXV. Vapour pressures and normal boiling temperatures of aliphatic alcohols. J. Chem. Thermodyn. 2, 631-645.	p.2549
6	124 Pa	124	4.565657	76.23 °C	その他, comparative ebulliometry				外挿 (補外)		4C	×			Ambrose, D., Ellender, J.H., Ellender, Sprake, C.H.S. (1974) Thermodynamic properties of organic oxygen compounds. XXXV. Vapour pressures of aliphatic alcohols. J. Chem. Thermodyn. 6, 909-914.	p.2549
7 Aldrich	1 mmHg	133.32237	6.7097545	170 °C					-		4A	×				p.838
8	8.25 mmHg	1099.9095	13.528066	100 °C					-		4A	×				p.838
9 CRC	1 Pa	1	0.5082787	30 °C					外挿 (補外)	Indicates an extrapolation beyond the region where experimental measurements exist	4C	×			Lide, D. R. , and Kehiaian, H. V. , CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994 Boublik, T. , Fried, V. , and Hala, E. , The Vapor Pressure of Pure Substances, Second Edition, Elsevier, Amsterdam, 1984	Vapor Pressure
10	10 Pa	10	1.4889302	50 °C					外挿 (補外)	Indicates an extrapolation beyond the region where experimental measurements exist	4C	×			Lide, D. R. , and Kehiaian, H. V. , CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994 Boublik, T. , Fried, V. , and Hala, E. , The Vapor Pressure of Pure Substances, Second Edition, Elsevier, Amsterdam, 1984	Vapor Pressure
11	100 Pa	100	3.9128446	75 °C					外挿 (補外)	Indicates an extrapolation beyond the region where experimental measurements exist	4C	×			Lide, D. R. , and Kehiaian, H. V. , CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994 Boublik, T. , Fried, V. , and Hala, E. , The Vapor Pressure of Pure Substances, Second Edition, Elsevier, Amsterdam, 1984	Vapor Pressure

基本情報

優先通し番号	170
公示名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価 I)	キースタディ該非 (評価 I)	キースタディ該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
12	1 kPa	1000	8.4146514	109 °C					外挿 (補外)	Indicates an extrapolation beyond the region where experimental measurements exist	4C	×			Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994 Boublik, T., Fried, V., and Hala, E., The Vapor Pressure of Pure Substances, Second Edition, Elsevier, Amsterdam, 1984	Vapor Pressure
13	10 kPa	10000	14.392724	157.3 °C					-		4A	×			Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994 Boublik, T., Fried, V., and Hala, E., The Vapor Pressure of Pure Substances, Second Edition, Elsevier, Amsterdam, 1984	Vapor Pressure
14	100 kPa	100000	18.847123	230.6 °C					-		4A	×			Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994 Boublik, T., Fried, V., and Hala, E., The Vapor Pressure of Pure Substances, Second Edition, Elsevier, Amsterdam, 1984	Vapor Pressure
15	0.009 kPa	9	6.3801237	25 °C					-		2B	×				LABORATORY SOLVENTS AND OTHER LIQUID REAGENTS
16	0.009 kPa	9	6.3801237	25 °C					-		2B	×				Flammability of Chemical Substances
17	EPI Suite	0.00644 mmHg	0.8585961	0.8585961	20 °C	MPBPWIN	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 September 2008	2C	×	-		
18	HSDB	0.00851 mmHg	1.1345734	0.804302	25 °C				-		2B	×			Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989, p. 4630	Chemical/Physical Properties: > Vapor Pressure:
19	MOE初期評価	8.51E-03 mmHg[8.51×10 ⁻³ mmHg]	1.1345734	0.804302	25 °C				experimental result		2B	×			Daubert, T.E. and R.P. Danner (1989): Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals: Data Compilation. Hemisphere Publishing Corporation. Washington, DC.	p.1
20		1.13 Pa[8.51×10 ⁻³ mmHg (=1.13 Pa)]	1.13	0.80106	25 °C				-		2B	×			Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 212.	p.1
21	PhysProp	0.00851 mmHg	1.1345734	0.804302	25 °C				experimental result		2B	×			DAUBERT,TE & DANNER,RP (1989)	
22	ECHA	<5 Pa	5	5	20 °C	その他,NFT 20-048	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result	4A	×			[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2009, [Report Date]: 2009	001 Key Experimental result
23		15 Pa	15	2.2333953	50 °C	その他,NFT 20-048	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result	4A	×			[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2009, [Report Date]: 2009	001 Key Experimental result
24	SIDS	0.0113 hPa	1.13	0.80106	25 °C			2: reliable with restrictions	key study	experimental result	2A	○	×		Daubert, T.E. and Danner, R.P. 1989. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis.	p.21; p.26; SIDS Dossier p.204

基本情報

優先順序号	170
公称名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキース タデーの 誤非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キース タデー誤 非 (評価Ⅰ)	キース タデー誤 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 Mackay	36 mg/L	36	36	20 °C		その他,shake flask- surface tension				experiment al result		2B	×	○	採用したIUPAC Solubility dataの20℃の測定値の元 文献	Addison, C.C., Hutchinson, S.K. (1949) The properties of freshly formed surfaces. Part XI. Factors influencing surface activity and adsorption rates in aqueous decyl alcohol solutions. J. Chem. Soc. 3387- 3395.	p.2549
2	50 mg/L	50	46.6753219	25 °C		その他,shake flask- turbidimetric method				experiment al result		2B	×			Stearns, R.S., Oppenheimer, H., Simon, E., Harkins, W.D. (1947) Solubilization by solutions of long-chain colloidal electrolytes. J. Chem. Phys. 15, 496-.	p.2549
3	50 mg/L	50	46.6753219	25 °C		その他,shake flask- turbidimetric method-photometer				experiment al result		2B	×			Harkins, W.D., Oppenheimer, H. (1949) Solubilization of polar-nonpolar substances in solutions of long chain electrolytes. J. Am. Chem. Soc. 71, 808-811.	p.2549
4	37 mg/L	37	34.5397382	25 °C		その他,shake flask- surface tension				experiment al result		2B	×			Kinoshita, K., Ishikawa, H., Shinoda, K. (1958) Solubility of alcohols in water determined by the surface tension measurements. Bull. Chem. Soc. Japan 31, 1081-1082.	p.2549
5	32 mg/L	32	34.3613101	15 °C		その他,shake flask- surface tension				experiment al result		2B	×			Vochten, R., Petre, G. (1973) Heat of reversible adsorption at the air-solution interface. II. Experimental determination of the heat of adsorption of some alcohols. J. Colloid Interface Sci. 42, 320- 327.	p.2549
6	10000 mg/L	10000	4061.24662	102.5 °C		その他,polythermic method				experiment al result		4A	×			Zhuravleva, I.K., Zhuravlev, E.F., Lomakina, N.G. (1977) Phase diagrams of ternary systems containing three binary phase separations with upper critical dissociation points. Zh. Fiz. Khim. 51, 1700-1707. Russ. J. Phys. Chem. 51, 994-998.	p.2549
7	8000 mg/L	8000	2806.49694	120.5 °C		その他,polythermic method				experiment al result		4A	×			Zhuravleva, I.K., Zhuravlev, E.F., Lomakina, N.G. (1977) Phase diagrams of ternary systems containing three binary phase separations with upper critical dissociation points. Zh. Fiz. Khim. 51, 1700-1707. Russ. J. Phys. Chem. 51, 994-998.	p.2549
8	37 mg/L	37	34.5397382	25 °C						-		2B	×			Barton, A.F.M. (1984) Alcohols with water. In: IUPAC Solubility Data Series Vol. 15. Pergamon Press, New York, p. 438.	p.2549
9	210 mg/L	210	184.381056	29.6 °C		その他,shake flask- GC/TC				experiment al result		2B	×			Stephenson, R., Stuart, J. (1986) Mutual solubilities: Water-alcohols and water-esters. J. Chem. Eng. Data 31, 56-70.	p.2549
10	35.9 mg/L	35.9	33.5128811	25 °C		その他,dialysis tubing equilibration- GC				experiment al result		2B	×			Etzweiler, F., Senn, E., Schmidt, H.W.H. (1995) Method for measuring aqueous solubilities of organic compounds. Anal. Chem. 67, 655-658.	p.2549
11 CRC	[insoluble]	単位換算不 可								-		3	×				Physical Constants of Organic Compounds
12	0.037 g/kg	37	34.5397382	25 °C						-		2B	×			Solubility Data Series, International Union of Pure and Applied Chemistry, Vol. 15, Pergamon Press, Oxford, 1982	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
13 EPI Suite	28.21 mg/L	28.21	26.3342166	25 °C		WSKOWWIN	-	-	key study	(Q)SAR	WSKOWWIN v1.41a September 2008	2C	×				-
14 HSDB	37 mg/L	37	34.5397382	25 °C						-		2B	×			Yaws CL et al; Waste Manag 17: 541-7 (1997)	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
15 Merck	[Insol in water.]	単位換算不 可								-		3	×				

基本情報

優先通し番号	170
公称名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
16 MOE初期評価	37 mg/L	37	34.5397382	25 °C						experimental result		2B	×			Barton, A.F.M. (1984): The Present Status of the Solubility Parameter for the Estimation of Solubility. First International Symposium on Solubility Phenomena, London, Ontario.	p.1
17	37 mg/1000g	単位換算不可		25 °C						-		3	×			Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).	p.1
18	37 mg/L	37	34.5397382	25 °C						-		2B	×			Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 212. Verschuere, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).	p.1
19 PhysProp	37 mg/L	37	34.5397382	25 °C						experimental result		2B	×			BARTON,AFM (1984)	
20 ECHA	21.1 mg/L	21.1	21.1	20 °C		7 OECD TG 105	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result			×			[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2009, [Report Date]: 2009	001 Key Experimental result
21 SIDS	39.5 mg/L	39.5				その他.measured		2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×			Yalkowsky and Valvani J.Pharm Sci 69 912 (1980) cited in Satyanarayana, D.; Charyulu, R. Narayana; Nagavi, B. G., Asian Journal of Chemistry (1997), 9(3), 418-426	p.22; p.27; SIDS Dossier p.205-206

基本情報

優先通し番号	170
公示名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ECHA	4.5	4.5	25 °C	6	OECD TG 117	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	○	○		[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2009, [Report Date]: 2009	001 Key Experimental result
2 CRC	4.57	4.57	25 °C						-		2B	×			Sangster, J., J. Phys. Chem. Ref. Data, 18, 1111, 1989	Octanol-Water Partition Coefficients
3 HSDB	4.57	4.57							-		2B	×			Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995., p. 81	Chemical/Physical Properties: > Octanol/Water Partition Coefficient:
4 Mackay	3.98	3.98			その他,HPLC- RT correlation				experimental result		2B	×			D'Amboise, M., Hanai, T. (1982) Hydrophobicity and retention in reverse phase liquid chromatography. J. Chromatogr. 5, 229-244.	p.2550
5	4.57	4.57			その他,shake flask				experimental result		2B	×			Hansch, C., Leo, A. (1985) Medchem. Project, Pomona College, Claremont, California.	p.2550
6	4.57	4.57							-		2B	×			Sangster, J. (1993) LOGKOW Databank, Sangster Research Labs., Montreal, Canada.	p.2550
7	4.57	4.57			その他,shake flask				experimental result		2B	×			Hansch, C., Leo, A., Hoekman, D. (1995) Exploring QSAR, Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. ACS Professional Reference Book, American Chemical Society, Washington, DC.	p.2550
8 MOE初期評 価	4.57	4.57							experimental result		2B	×			Hansch, C., A. Leo and D. Hoekman (1995): Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. American Chemical Society, Washington, D.C.	p.1
9	4.57	4.57							-		2B	×			Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM). Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 212. Hansch, C. et al. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington DC, ACS Professional Reference Book: 81	p.1
10 PhysProp	4.57	4.57							experimental result		2B	×			HANSCH,C ET AL. (1995)	
11 SIDS	4.57	4.57					2: reliable with restriction s	key study	experimental result		2A	×			Hansch, C., A. Leo and D. Hoekman. 1995. Exploring QSAR. Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. ACS Professional Reference Book. Washington, DC: American Chemical Society.	p.22; p.27; SIDS Dossier p.205
12 Aldrich	4.4	4.4			-	-	-	-	-		2B	×				Product Number: W236500
13 EPI Suite	3.7876	3.7876			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×				

基本情報

優先通し番号	170
公示名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1	ECHA	Koc	1010~ 1042[Koc (Silt loam soil)]	1010			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	○		study report./2015	Exp Key Adsorption / desorption.002
2		Koc	1218~ 1953[Koc (Loamy sand soil)]	1218			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	○		study report./2015	Exp Key Adsorption / desorption.002
3		Koc	1141~ 1624[Koc (Clay loam soil)]	1141			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	○		study report./2015	Exp Key Adsorption / desorption.002
4		Koc	1160~ 1877[Koc (Sandy soil)]	1160			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	○		study report./2015	Exp Key Adsorption / desorption.002
5		Koc	1433~ 1766[Koc (activated sludge solids)]	1433			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	○		study report./2015	Exp Key Adsorption / desorption.002
6		Koc	1460[Koc Overall arithmetic mean]	1460			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	×		study report./2015	Exp Key Adsorption / desorption.002
7	HSDB	Koc	7300	7300				-	-	-	estimated by calculation		4C	×			SRC.	ENVIRONMENTAL FATE & EXPOSURE: > SOIL ADSORPTION/MOBILITY:
8		Koc	7300	7300							estimated by calculation	determined from a log Kow of 4.57(2) and a regression- derived equation(3)	4C	×			SRC	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Fate:
9		logKoc	2.59	389.045145							-			×			Schuurmann G et al; Environ Sci Technol 40:7005-11 (2006)	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility:
10	MOE初期評価	Koc	96	96			KOCWIN				estimated by calculation		4C	×			U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWIN™ v.1.66.	p.2
11	SIDS	Koc	6330	6330			その他,TGD Hydrophobics method	-	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×			Annex V (2005). Environmental Fate Data: QSAR predictions and comparison with measured values; Annex V to the Long Chain Aliphatic Alcohols Category SIAR..	p43.;decan-1-ol SIDS Dossier p.211-212
12		Koc	2490	2490			その他,TGD Non- hydrophobics method	-	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×			Annex V (2005). Environmental Fate Data: QSAR predictions and comparison with measured values; Annex V to the Long Chain Aliphatic Alcohols Category SIAR..	p43.;decan-1-ol SIDS Dossier p.211-212
13		Koc	190	190			その他,TGD Alcohols method	-	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×			Annex V (2005). Environmental Fate Data: QSAR predictions and comparison with measured values; Annex V to the Long Chain Aliphatic Alcohols Category SIAR..	p43.;decan-1-ol SIDS Dossier p.211-212
14		Koc	96	96			KOCWIN	-	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation	PCKOCWIN	4C	×			Annex V (2005). Environmental Fate Data: QSAR predictions and comparison with measured values; Annex V to the Long Chain Aliphatic Alcohols Category SIAR..	p43.;decan-1-ol SIDS Dossier p.211-212
15	EPI Suite	Koc	1100 L/kg	1100			KOCWIN	-	-	key study	(Q)SAR	KOCWIN v2.00 February 2009	2C	○				-

基本情報

優先通し番号	170
公示名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 PhysProp	0.000032 atm・ m ³ /mol	3.2424					experimental result		2B	○	○		ALTSCHUH, J ET AL. (1999)	Henry's Law Constant
2 HSDB	3.2E-5 atm・m ³ /mol	3.2424					-		2B	○	○		Altschuh J et al; Chemosphere 39: 1871-1887 (1999)	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
3	4.7831E-5 atm・ m ³ /mol	4.846476075					-			×			Yaws CL et al; Waste Manag 17: 541-7 (1997)	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
4 Mackay	3.222 Pa・m ³ /mol	3.222					experimental result		2B	×			Altschuh, J., Brüggemann, 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.2550
5	2.689 Pa・m ³ /mol	2.689					estimated by calculation	computer value	4C	×			Yaws, C., Yang, H.C., Pan, X. (1991) Henry's law constants for 362 organic compounds in water. Chem. Eng. 98(11), 179-185.	p.2550
6 EPI Suite	1.88 Pa・m ³ /mol	1.88					その他, Experimental Data from PhysProp Database		2C	×				
7	5.54E+000 Pa・ m ³ /mol	5.54					(Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	×				

基本情報

優先審査番号	170
公示名称	デカノール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の限界	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-限非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-限非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite					BCF		18.3	18.3	BCFBAFWIN				(Q)SAR			○	○			
2 HSDB		1			BCF		20	20					estimated by calculation	using a log Kow of 4.57 and a regression- derived equation		×			SRC	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Bioconcentration:
3 MOE初期評価		1			BCF		66	66	BCFBAFWIN				estimated by calculation			×			U.S. Environmental Protection Agency, BCFWIN™ v.2.17.	p.2
4 ECHA		1			BCF		20[log BCF=1.3]	20			2: reliable with restrictions	supporting study	(Q)SAR			×			[Reference Type]: other.; [Title]: EPI BCFBAF v3.01. [Author]: US EPA, [Year]: 2010	002 Supporting (Q)SAR
5 SIDS		1			BCF		1530	1530	その他,the Veith et al linear equation	no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation			×			Annex V (2005), Environmental Fate Data: QSAR predictions and comparison with measured values; Annex V to the Long Chain Aliphatic Alcohols Category SIAR.	p.57; SIDS Dossier p.217

基本情報

優先順序号	170
公示名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
其他番号	
其他名称	

解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の脱非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ-脱非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ECHA	pKa	15.76					no	2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR				[Reference Type]: other: , QSAR Method Reporting Format, [Title]: Unnamed, [Year]: 2010, [Report Date]: 2010 [Reference Type]: publication, [Title]: A Rigorous Test for SPARC's Chemical Reactivity Models: Estimation of More Than 4300 Ionization pKa's, implemented in SPARC online prediction tool, [Author]: Hilal SH, Karickhoff SW and Carreira LW , [Year]: 1995, [Bibliographic source]: Quant. Struc. Act. Rel., 14, 348 [Reference Type]: other: , QSAR Prediction Reporting Format, [Title]: Unnamed, [Year]: 2010	Dissociation constant

基本情報

優先順し番号	170
公示名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	pH	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 数	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー 数 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	大気	OHラジカルとの反応		15.3683E-12 cm ³ /molec ule/sec				1.04403699	25 °C		AOPWIN					(Q)SAR		○			
2	水域	生分解									BIOWIN	Days-Weeks				(Q)SAR	Biowin3 Ultimate Biodegradation				
3 PhysProp	大気	OHラジカルとの反応		0.00000000 0015368 cm ³ /molec ule/sec				1.04405737	25 °C							estimated by calculation				MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1993)	
4 HSDB	水域	生分解					36.3 % [A 5-day theoretical BOD]									experimental result	in a standard BOD dilution test using a mixed microbial inoculum			Vaishnav DD et al; Chemosphere 16: 695-703 (1987) Babeu L, Vaishnav DD; J Industr Microbiol 2: 107-15 (1987)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
5	水域	生分解					0.9 % [6hr]									experimental result	Warburg respirometer technique and various activated sludge inoculum.			Babeu L, Vaishnav DD; J Industr Microbiol 2: 107-15 (1987) Gerhold RM, Malaney GW; J Water Pollut Control Fed 38: 562-79 (1966)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
6	水域	生分解					9.2 % [12hr]									experimental result	Warburg respirometer technique and various activated sludge inoculum.			Babeu L, Vaishnav DD; J Industr Microbiol 2: 107-15 (1987) Gerhold RM, Malaney GW; J Water Pollut Control Fed 38: 562-79 (1966)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
7	水域	生分解					29.3 % [24hr]									experimental result	Warburg respirometer technique and various activated sludge inoculum.			Babeu L, Vaishnav DD; J Industr Microbiol 2: 107-15 (1987) Gerhold RM, Malaney GW; J Water Pollut Control Fed 38: 562-79 (1966)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
8	水域	生分解	7.1E-3[1/時間] [a first-order biodegradation rate]			4 日										experimental result	In an aerobic screening test using a sewage inoculum	○		Yonezawa Y et al; Kogai Shigen Kenkyusho Iho 11: 77-82 (1981) (分解速度定数) SRC (半減期)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
9 HSDB	水域	生分解					73 % [theoretical methane after 274 days incubation in the dark]		37 °C							experimental result	a sewage inoculum obtained from a Swedish pilot plant biogas reactor treating municipal solid waste			Ejertsson J et al; Environ Sci Technol 31: 2761-4 (1997)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
10	大気	OHラジカルとの反応		1.5E-11 cm ³ /molec ule/sec	5E+5 molec/le/c m ³ S	25 時間		1.06967157	25 °C							estimated by calculation	a structure estimation method			SRC (反応速度定数) US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Nov, 2012. Available from, as of April 22, 2015: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.html (半減期)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:
11	水域	加水分解														-				Lyman WJ et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Washington, DC: Amer Chem Soc pp. 7-4, 7-5, 8-12, 8-13 (1990)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
12	大気	直接光分解														-				SRC	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
13	大気	OHラジカルとの反応		1.44E-11 cm ³ /molec ule/sec				1.11424122	25 °C							-				Atkinson R; J Phys Chem Ref Data Monograph No. 2 (1994)	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
14 MOE初期評価	水域	生分解 (好氣的)					0.9 % [試験期間6時間のBOD分解率]									experimental result				Gerhold, R.M., Malaney, G.W.(1966); J Water Pollut Control Fed, 38:562-579. [Hazardous Substances Data Bank (http://toxnet.nlm.nih.gov/), 2007.3.14 現在]	p.1
15	水域	生分解 (好氣的)					9.2 % [試験期間12時間のBOD分解率]									experimental result				Gerhold, R.M., Malaney, G.W.(1966); J Water Pollut Control Fed, 38:562-579. [Hazardous Substances Data Bank (http://toxnet.nlm.nih.gov/), 2007.3.14 現在]	p.1

基本情報

優先順し番号	170
公示名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 状態	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ 状態 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
16	水域	生分解 (好氣的)					29.3 % [試験期間 24時間のBOD分解率]									experimental result				Gerhold, R.M., Malaney, G.W. (1966): J Water Pollut Control Fed, 38:562-579. [Hazardous Substances Data Bank (http://toxnet.nlm.nih.gov/, 2007.3.14 現在)]	p.1
17	大気	OHラジカルとの反応		15E-12 cm ³ /molec ule/sec	3E+05~ 3E+06 molecule/c m ³	4.2~42 時間		0.3241429			AOPWIN					estimated by calculation				U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v.1.92. Howard, P.H. et al. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xv.	p.2
18	水域	加水分解														-				Lyman, W.J., Reehl, W.F., and Rosenblatt, D.H. (1990): Handbook of chemical property estimation methods: environmental behavior of organic compounds. American Chemical Society, Washington, D.C., USA. [Hazardous Substances Data Bank (http://toxnet.nlm.nih.gov/, 2007.3.14 現在)].	p.2
19	ECHA	大気	OHラジカルとの反応	15.36831E-12 cm ³ /molec ule/sec		25.1 時間		1.04403631					no	2: reliable with restrictions	supporting study	estimated by calculation				[Reference Type]: other., [Title]: AOPWIN v1.91 Program EPI Suite version 4.0, [Author]: Environmental Protection Agency's Office of Pollution Prevention Toxics and Syracuse Research Corporation (SRC), [Year]: 2009.	Phototransformation in air
20	土壌	生分解 (好氣的)				0.5~1 時間 [#1]	100 % [24 h]#1[test mat. analysis]	0.04166667					yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		×	標準的な試験方法でないとの記載があったので除外	[Reference Type]: other., Update from study director, [Title]: Unnamed, [Year]: 2015, [Report Date]: 2015 [Reference Type]: other., Personal communication, [Title]: Unnamed, [Year]: 2015, [Report Date]: 2015 [Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2015, [Report Date]: 2015	001 Key Experimental result
21	土壌	生分解 (好氣的)				1~2 時間 [#2]	100 % [24 h]#2[test mat. analysis]	0.08333333					yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		×	標準的な試験方法でないとの記載があったので除外	[Reference Type]: other., Update from study director, [Title]: Unnamed, [Year]: 2015, [Report Date]: 2015 [Reference Type]: other., Personal communication, [Title]: Unnamed, [Year]: 2015, [Report Date]: 2015 [Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2015, [Report Date]: 2015	001 Key Experimental result
22	土壌	生分解 (好氣的)				0.25~0.5 時間 [#3]	100 % [24 h]#3[test mat. analysis]	0.02083333					yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		×	標準的な試験方法でないとの記載があったので除外	[Reference Type]: other., Update from study director, [Title]: Unnamed, [Year]: 2015, [Report Date]: 2015 [Reference Type]: other., Personal communication, [Title]: Unnamed, [Year]: 2015, [Report Date]: 2015 [Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2015, [Report Date]: 2015	001 Key Experimental result
23	土壌	生分解 (好氣的)					87 % [28 d][O2 consumption]				その他, OECD 301D (using a suspension of garden soil as the inoculum)		その他, not specified	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result				[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 1999, [Report Date]: 1999	002 Supporting Experimental result
24	水域	生分解 (好氣的)					29 % [29 d]				OECD TG 301B		その他, not specified	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result				[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 1996	001 Supporting Experimental result
25	水域	生分解 (好氣的)					36.3 % [5 days] % ThOD]				その他, BOD5 Method: APHA 1980		その他, not specified	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result				[Reference Type]: review article or handbook, [Title]: Quantitative structure-biodegradability relationships for alcohols, ketones and alicyclic compounds, [Author]: Vaishnav D D, Boethling R S, and Babeu L., [Year]: 1987, [Bibliographic source]: Chemosphere 16(4):695-703.	002 Supporting Experimental result
26	水域	生分解 (好氣的)					54 % [31 d][CO2 evolution]				その他, TSCA test guideline CFR 40 part 796.3100, pp. 165-170		その他, not specified	4: not assignable	supporting study	experimental result				[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 1994	004 Supporting Experimental result
27	水域	生分解 (好氣的)					77 % [30 d][O2 consumption]				その他, Biological Oxygen Demand Test for Insoluble Substances (BODIS).		その他, not specified	4: not assignable	supporting study	experimental result				[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 1999	005 Supporting Experimental result
28	水域	生分解 (好氣的)					88 % [30 d]				OECD TG 301D		no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result				[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2002, [Report Date]: 2002	007 Weight of evidence Experimental result
29	水域	生分解 (好氣的)					74 ± 0.4 % [28 d][CO2 evolution]				OECD TG 301B		no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result				[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2009, [Report Date]: 2009	008 Weight of evidence Experimental result
30	SIDS	大気	OHラジカルとの反応	15.36831E-12 cm ³ /molec ule/sec	5E5 molecule/c m ³	25.1 時間		1.04403631			AOPWIN		no	2: reliable with restrictions		(Q)SAR				Annex V (2005). Environmental Fate Data: QSAR predictions and comparison with measured values; Annex V to the Long Chain Aliphatic Alcohols Category SIAR.	p.38: SIDS Dossier p.210

基本情報

優先順し番号	170
公示名称	デカノール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 結果	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー 結果 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
31	水域	生分解 (好氣的)					88 %[after 30 day(s)]		20 °C		OECD TG 301D		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result				Richterich, K. 2002c. Lorol C 10-1-Decanol: Ultimate biodegradability in the closed bottle test. Final report R 0200257	p.54; SIDS Dossier p.212-213
32	水域	生分解 (好氣的)					77 %[after 30 day(s)]				その他.Biological Oxygen Demand Test for Insoluble Substances (BODIS)		no data	4: not assignable	-	experimental result				Henkel KGaA. 1999c. 1-Decanol: Aerobic biodegradation: BODIS test/ Two-phase closed bottle test. Biological Research and Product Safety/Ecology: Unpublished results; test substance registration No. 6368. test run No. 8.	SIDS Dossier p.213
33	水域	生分解 (好氣的)					54 %[after 31 day(s)]				その他.US EPA OPPTS 835.3100 Aerobic Aquatic Biodegradation Test		no data	4: not assignable	-	experimental result				Vista Chemical Company. 1994. Biodegradability of eleven VISTA ALFOL alcohols. TSR No. 6940-10-05-94.	SIDS Dossier p.213-214
34	水域	生分解 (好氣的)					29 %[after 29 day(s)]		21.2~23.9 °C	7.4~7.6	OECD TG 301B		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result				Huntingdon Life Sciences Ltd. 1996b. Kalcold 1095: Assessment of readily biodegradability. Modified Sturm Test. Report No. 96/KAS223/0327.	p.54; SIDS Dossier p.214-215
35	水域	生分解 (好氣的)					88 %[after 30 day(s)]				その他.Directive 84/449/EEC, C.6 "Biotic degradation - closed bottle test"		no data	4: not assignable	-	experimental result				Henkel KGaA, unpublished data (Registry No. 6368)	SIDS Dossier p.215
36	水域	生分解 (好氣的)					36.3 %[after 5 day(s)]		21±3 °C		その他.5 day BOD according to "Standard Methods for the		no data	4: not assignable	-	experimental result				Babeu, L. & Vaishnav, D.D., J. Ind. Microbiol. 2, 107-115 (1987); Vaishnav, D.D. et al. Chemosphere 16 (1987), 695-703.	SIDS Dossier p.215-216
37	水域	生分解 (好氣的)					66~80 %				その他.Directive 84/449/EEC, C.6 "Biotic degradation - closed bottle test"		no data	4: not assignable	-	experimental result				Henkel KGaA, unpublished data, File 59, Page/Assay 691 Henkel KGaA, unpublished data, Final report 1984 2277 Henkel KGaA, unpublished data, Protocol 32, Page/Assay 691	SIDS Dossier p.216

参考情報

優先通し番号	170
公示名称	デカン-1-オール
CAS登録番号	112-30-1
CAS名称	1-Decanol
その他番号	
その他名称	

分解性

収集データ

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの是非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
1 ECHA		87%	O ₂ consumption		OECD TG 301D	その他,not specified	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result			[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 1999, [Report Date]: 1999	Biodegradation in soil: 002 Supporting Experimental result
2		29%	CO ₂ evolution		OECD TG 301B	その他,not specified	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result			[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 1996	001 Supporting Experimental result
3	readily biodegradable	88%	DOC removal		OECD TG 301D	no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result			[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2002, [Report Date]: 2002	007 Weight of evidence Experimental result
4	readily biodegradable	74.6±0.4 %	CO ₂ evolution		OECD TG 301B	no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result			[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 2009, [Report Date]: 2009	008 Weight of evidence Experimental result
5	not readily biodegradable		O ₂ consumption		OECD TG 301D	その他,not specified	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result			[Reference Type]: study report, [Title]: Unnamed, [Year]: 1996, [Report Date]: 1996	003 Supporting Experimental result
6 SIDS	その他	88%	-		OECD TG 301D	no	2: reliable with restrictions	key study	-			Richterich, K. 2002c. Lorol C 10-1-Decanol: Ultimate biodegradability in the closed bottle test. Final report R 0200257	p.54; 1-DECANOL SIDS Dossier p.212-213
7	その他	>60 %	-		OECD TG 301D	no	2: reliable with restrictions	key study	-			Richterich, K. 2002c. Lorol C 10-1-Decanol: Ultimate biodegradability in the closed bottle test. Final report R 0200257	p.54; 1-DECANOL SIDS Dossier p.212-213
8	その他	29%	-		OECD TG 301D	no	2: reliable with restrictions	key study	-			Richterich, K. 2002c. Lorol C 10-1-Decanol: Ultimate biodegradability in the closed bottle test. Final report R 0200257	p.54; 1-DECANOL SIDS Dossier p.212-213
9	readily biodegradable	88%	-		OECD TG 301D	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result			Richterich, K. 2002c. Lorol C 10-1-Decanol: Ultimate biodegradability in the closed bottle test. Final report R 0200257	p.54; SIDS Dossier p.212-213
10	not readily biodegradable	29%	CO ₂ evolution		OECD TG 301B	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result			Huntingdon Life Sciences Ltd. 1996b. Kalcohol 1095: Assessment of readily biodegradability. Modified Sturm Test. Report No. 96/KAS223/0327	p.54; SIDS Dossier p.214-215