

(案)

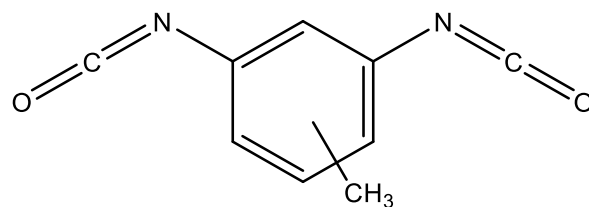
## 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

### 人健康影響に係る評価Ⅱ

### 物理化学的性状等の詳細資料

## 1, 3-ジイソシアナト(メチル)ベンゼン

優先評価化学物質通し番号 129



令和2年9月

経済産業省

## 目 次

23		
24		
25	1 評価対象物質の性状 .....	1
26	1-1 評価対象物質の設定 .....	1
27	1-2 評価対象物質の選定 .....	2
28	1-3 物理化学的性状及び濃縮性 .....	5
29	1-3-1 TDI 混合物の物理化学的性状及び濃縮性 .....	5
30	1-3-2 TDI 混合物の分解性 .....	7
31	1-3-3 2,4-TDA の物理化学的性状及び濃縮性 .....	9
32	1-3-4 2,4TDA の分解性 .....	12
33	2 【付属資料】 .....	15
34	2-1 物理化学的性状等一覧 .....	15
35	2-2 その他 .....	16
36		

37 1 評価対象物質の性状

38 本章では、優先評価化学物質 1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン (以下、「TDI」  
 39 という) のリスク評価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  
 40 を示す。

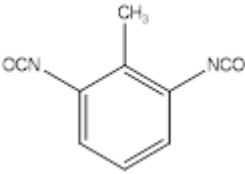
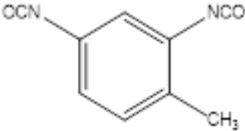
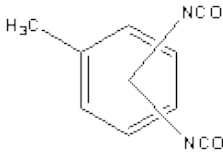
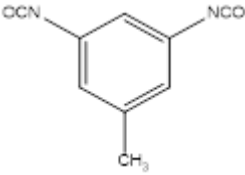
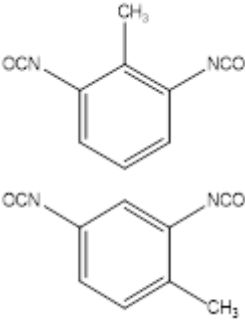
41

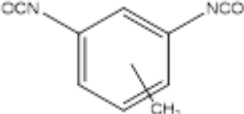
42 1-1 評価対象物質の設定

43 1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン (以下「TDI」という。) は、メチル基の置換  
 44 位置の違いにより複数の異性体及びそれらの混合物が存在する。該当する CAS 登録番号、  
 45 名称、構造式及び平成 28 年度製造・輸入実績の化審法届出情報を表 1-1 に示す。

46

47 表 1-1 優先評価化学物質 129 の CAS 登録番号別製造輸入数量 (平成 28 年度)

CAS 登録番号	名称(CAS Index Name)	構造式	製造輸入数量[t]
91-08-7	2, 6-ジイソシアナトトルエン (Benzene, 1,3-diisocyanato-2-methyl-)		16,155
584-84-9	2, 4-ジイソシアナトトルエン (Benzene, 2,4-diisocyanato-1-methyl-)		66,736
1321-38-6	ジイソシアナト (メチル) ベンゼン (Benzene, diisocyanatomethyl-)		—
14219-05-7	3, 5-ジイソシアナトトルエン (Benzene, 1,3-diisocyanato-5-methyl-)		—
26102-02-3	2, 4 (又は 6) -ジイソシアナトトル エン (Benzene, 1,3-diisocyanato-2(or 4)-methyl-)		—

26471-62-5	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン (Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-)		16,612
------------	---	--	--------

48

49 TDIには2, 4-ジイソシアナトトルエン (以下「2,4-TDI」という。)と2, 6-ジイソ  
50 シアナトトルエン (以下「2,6-TDI」という。)の異性体混合物があり、化学工業日報社(2008)  
51 によれば、市販品は2,4-TDI : 2,6-TDI=95 以上 : 5 以下、80 : 20、65 : 35 の3種類があ  
52 るとされている。また、NITE(2008a)では、2,4-TDI : 2,6-TDI=80 : 20 の混合物が最も一  
53 般的な製品とされている。

54

## 55 1-2 評価対象物質の選定

56 TDI は、その構造から容易に水と反応する。

57 MITI(1988)の既存点検においては、2,4-TDI を試験サンプルとした28日間の分解度試験  
58 が実施されている。その結果、BOD の変化はなかったが、GC 法による直接分析の結果、  
59 (水+被験物質)系及び(汚泥+被験物質)系ともに2,4-TDI は消失し、新たに試験液中に  
60 白色の不溶性物質の生成が見られており、ポリウレアの生成が推定されている。さらに、  
61 TOC 分析の結果、約25%の水溶性物質が確認されており、2, 4-ジアミノトルエン (以  
62 下「2,4-TDA」という。)の生成が確認、尿素体の生成が推定されている。

63 その他、水との反応性は濃度と攪拌状態によっても異なり、TDI が高濃度 (10,000 mg /  
64 L) の場合 TDA への変換が1%未満であったのに対し、10 mg / L 未満の濃度で TDI を十  
65 分に攪拌すると、50%を超えることがあるという報告もある(Yakabe ら,1999)。

66 生じる変化物の割合については TDI の濃度により異なり、TDI が希薄な場合には、二つ  
67 のイソシアナート基全ての加水分解による TDA の生成が優先して起こり、TDI が濃厚な  
68 場合には、イソシアナート基の一つが加水分解されアミンになると直ちに別の TDI と重合  
69 反応し、オリゴウレア、ポリウレアになりやすい(IARC,1986 ; Yakabe ら,1999 ; 日本化学  
70 会,1996)。

71 変化物のうち、ポリウレアは、ECHA(2013)のCoRAPにおいて、一般的に不活性で不溶  
72 性の固体であり、生物学的に利用不可能であるため環境への影響が小さいポリマーである  
73 とされている。

74

75 NITE(2008)及び U.S.EPA(2011)は、TDI と水蒸気との反応性を測定した研究(Dyson  
76 and Hermann,1971)を根拠として、空気中の湿度による TDA の生成の可能性を示唆して  
77 いる。しかしながら、Dyson and Hermann(1971)では、TDI の気中濃度の減衰を報告して  
78 いるものの、変化物を測定していないことから、TDA 生成の有無及び TDI 減少の機構は  
79 不明である。

80 また、異なる湿度条件での TDI の減少率及び変化物である TDA を測定した Holdren ら  
 81 (1984)の研究では、TDA は検出されず、TDI 損失はチャンバーの壁面吸着に起因するもの  
 82 とされている。一方で同報では、TDI が水蒸気と反応する可能性を排除できないとも述べ  
 83 られている。

84 Becker ら(1988)は、TDA の OH ラジカルとの反応速度が TDI に比べて 20 倍以上速いた  
 85 め、大気中では急速に消失すると述べている。しかしながら、TDA の半減期は、化審法リ  
 86 スク評価の技術ガイダンスの 2 倍の OH ラジカル濃度のもとで 1 時間とされており、風速  
 87 を考慮しても、排出源近傍では分解し切らず存在する可能性が考えられる。

88 なお、上記論文を参考にするにあたっては、分析方法によっては、TDI と TDA を区別で  
 89 きない場合もある点に考慮が必要である。

90 このように、大気中における TDI の変化物として、TDA が存在するかについては、現在  
 91 判断に足る根拠が得られなかった。

92

93 TDI (2,4-TDI : 2,6-TDI = 80 : 20) の変化物としては、ポリウレア、TDA 等が想定される。  
 94 そのうち、ポリウレアは生物学的に利用不可能であるため環境への影響が小さいポリマー  
 95 であるといえる。TDA については、2,4-TDA 及び 2,6-TDA が想定されるが、入手できた各  
 96 毒性項目のキースタディーを比較した結果、2,4-TDA の方がいずれの毒性項目においても  
 97 無毒性量が低いことが確認された。

98 以上から、本書におけるリスク評価は、親物質である TDI については、最も一般的な製  
 99 品である 2,4-TDI : 2,6-TDI = 80 : 20 の混合物（以下「TDI 混合物」という。）を、変化物  
 100 については、有害性の観点からもより安全側に立った評価となると考えられる 2,4-TDA を  
 101 評価対象物質とする。

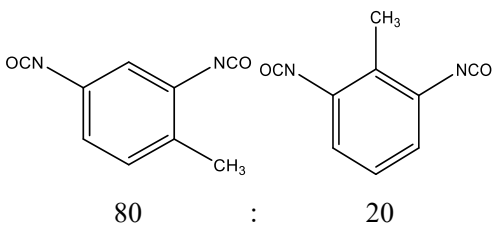
102

103 評価対象物質（親物質）の構造等を表 1-3、評価対象物質（変化物）の構造等を表 1  
 104 -4 に示す。

105

106

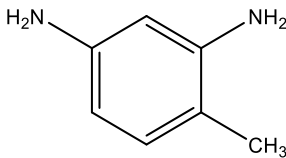
表 1-2 評価対象物質（親物質）の構造等

構造式	
評価対象物質名称	2,4-ジイソシアナトトルエンと2,6-ジイソシアナトトルエンの異性体混合物(TDI 混合物)
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
CAS 登録番号	26471-62-5

107

108

表 1-2 評価対象物質（変化物）の構造等

	
評価対象物質名称	2, 4-ジアミノトルエン(2,4-TDA)
分子式	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>
CAS 登録番号	95-80-7

109

110       なお、化管法においては、政令番号 298 としてトリレンジイソシアネートが指定されて  
111 いる。

112

113 1-3 物理化学的性状及び濃縮性

114 1-3-1 TDI 混合物の物理化学的性状及び濃縮性

115 下表に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。なお、表中の下線部は、評価Ⅱ  
116 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。

117

118

表 1-3 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相当の参考値
分子量	—	174.16	—	174.16
融点	°C	21 <sup>2)</sup>	測定値	21 <sup>2)</sup>
沸点	°C	253 <sup>2)</sup>	1013 hPa における測定値	253.14 <sup>2)</sup>
蒸気圧	Pa	2.1 <sup>2)</sup>	20°C における測定値の算術平均値	2.1 <sup>2)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	(115.9 <sup>3)</sup> )	WSKOWWIN による推計値 (既存点検 <sup>5)</sup> では、「変化のため測定不可」との記載有り)	115.9 <sup>3)</sup>
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	3.43 <sup>4)</sup>	測定値	3.43 <sup>4)</sup>
ヘンリー係数	Pa·m <sup>3</sup> /mol	0.82 <sup>3)</sup>	HENRYWIN による推計値	0.82 <sup>3)</sup>
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	947.3 <sup>3)</sup>	KOCWIN による推計値	947.3 <sup>3)</sup>
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	180 <sup>5)</sup>	濃縮度試験における測定値	180 <sup>5)</sup>
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 <sup>5)</sup>	1
解離定数(pKa)	—	—	解離性の基を有さない物質	— <sup>7)</sup>

119 1) 平成 29 年度第 3 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  
120 ビュー会議(平成 29 年 11 月 28 日)で了承された値

121 2) IUCLID(2000) 5) MITI(1977)

122 3) EPI Suite (2012) 6) MHLW, METI, MOE(2014)

123 4) ECHA 7) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない

124 括弧内はモデルを動かすための参考値であることを示す。

125

126 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

127 ①融点

128 評価Ⅰで採用した値(21 °C)は、IUCLID (2000)に記載された GLP 準拠の EEC のテスト  
129 ガイドライン(A.1, Directive 84/449/EEC, A.1 "Melting point/melting range")による 2,4-  
130 TDI を試験サンプルとした測定値である。2,4-TDI については、その他の情報源においても  
131 19.16~22 °C の範囲である。2,6-TDI については、CRC、HSDB、PhysProp においては  
132 18.3 °C の記載がある。TDI 混合物については信頼性のある測定値が得られていないため、  
133 評価Ⅱにおいては 2,4-TDI を試験サンプルとした測定値(21 °C)を用いる。

134

135 ②沸点

136 評価Ⅰで採用した値は、IUCLID(2000) に記載された GLP 準拠の EEC のテストガイド  
137 ライン(A.2, Directive 84/449/EEC, A.2 "Boiling point/boiling range")による 2,4-TDI:2,6-

138 TDI = 80 : 20 の混合物を試験サンプルとした標準圧力(1,013 hPa)における測定値  
139 (253.0118 °C)と、GLP 準拠の EEC のテストガイドライン(A.2, Directive 84/449/EEC, A.2  
140 "Boiling point/boiling range")による 2,4-TDI を試験サンプルとした標準圧力における測定  
141 値(253.262 °C)の算術平均値(253.14 °C)である。評価Ⅱにおいては TDI 混合物を試験サン  
142 プルとした 253 °C を用いる。

143

#### 144 ③蒸気圧

145 評価Ⅰで採用した値は、IUCLID(2000)に記載された GLP 準拠の EEC のテストガイド  
146 ライン(EU Method A.4, Directive 84/449/EEC, A.4 "Vapour pressure")による 2,4-TDI を  
147 試験サンプルとした 20 °Cにおける測定値(2.1 Pa)である。2,6-TDI については  
148 IUCLID(2000)に GLP 準拠の EEC のテストガイドライン(EU Method A.4, Directive  
149 84/449/EEC, A.4 "Vapour pressure")による 20 °Cにおける測定値(1.6 Pa)がある。TDI 混  
150 合物についての測定値は得られていないため評価Ⅱにおいては、TDI 混合物の主成分であ  
151 る 2,4-TDI を試験サンプルとした値(2.1 Pa) を用いる。

152

#### 153 ④水に対する溶解度

154 評価Ⅰで採用した値は、WSKOWWIN(v1.42)を用いた 25 °Cにおける 2,4-TDI の推計値  
155 (124.2 mg/L)を 20 °Cに補正した値(115.9 mg/L)である。異性体である 2,6-TDI や混合物に  
156 おいても信頼できる情報源に測定値はないことから、評価Ⅱにおいても参考値としてこの  
157 値 (115.9 mg/L)を用いる。

158

#### 159 ⑤logPow

160 評価Ⅰで採用した値は、ECHA に登録された GLP 準拠ではないが OECD のテストガイ  
161 ドライン 117 による 2,4-TDI : 2,6-TDI = 80 : 20 の混合物を試験サンプルとした HPLC 法  
162 (22 °C)による測定値(3.43)である。測定対象は TDI 混合物としており、45.7 %が回収され  
163 ている。評価Ⅱにおいてもこの値 (3.43) を用いる。

164

#### 165 ⑥ヘンリー係数

166 評価Ⅰで採用した値は、HENRYWIN(v3.20)を用いた 20 °Cにおける 2,4-TDI の推計値  
167 (0.82 Pa·m<sup>3</sup>/mol)である。異性体である 2,6-TDI や TDI 混合物においては信頼できる情報  
168 源に測定値はないことから、評価Ⅱにおいてもこの値 (0.82 Pa·m<sup>3</sup>/mol) を用いる。

169

#### 170 ⑦Koc

171 評価Ⅰで採用した値は、KOCWIN(v2.00)を用いた 2,4-TDI の推計値 (947.3 L/kg)である。  
172 異性体である 2,6-TDI や TDI 混合物においては信頼できる情報源に測定値はないことから、  
173 評価Ⅱにおいてもこの値 (947.3 L/kg)を用いる。



174

175 ⑧BCF

176 評価Ⅰで採用した値は、METI(2003)の既存点検事業における 2,4-TDI を試験サンプルと  
 177 した化審法の濃縮度試験結果で、生物濃縮性の判定に用いられた測定値である。定常状態に  
 178 における BCF は第 1 濃度区が 180 L/kg、第 2 濃度区が 130 L/kg であることから、最大値で  
 179 ある 180 L/kg を用いている。その他の情報源として IUCLID(2000)に OECD テストガイ  
 180 ドライン 305C (nonGLP) による測定値(5 未満)の記載があるが、試験サンプルは変化物で  
 181 ある 2,4-TDA を試験サンプルとした試験である。2,6-TDI 及び TDI 混合物については測定  
 182 値が得られていないことから、評価Ⅱにおいても評価Ⅰで採用した値(180 L/kg) を用いる。

183

184 ⑨BMF

185 評価Ⅰで採用した値は、logPow (3.43) 及び BCF (180 L/kg) から化審法における優先評  
 186 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。) に従  
 187 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  
 188 (1) を用いる。

189 1-3-2 TDI 混合物の分解性

190 下表に採用した分解に係るデータを示す。

191

192

表 1-4 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	2.2 反応速度定数の測定値 <sup>2,3)</sup> から、OH ラジカル濃度を $5 \times 10^5$ molecule/cm <sup>3</sup> として算出
		オゾンとの反応	NA
		硝酸ラジカルとの反応	NA
水中	水中における総括分解半減期		NA
	機序別の 半減期	生分解	NA
		加水分解	0.071 測定値 <sup>4)</sup>
		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	NA
		加水分解	1.7 測定値 <sup>5)</sup>
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	NA
		加水分解	0.071 水中加水分解の項参照

193 1) 平成 29 年度第 3 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  
194 ビュー会議 (平成 29 年 11 月 28 日) で了承された値

195 2) ECHA

5) HSDB

196 3) NIST

NA:情報が得られなかったことを示す

197 4) NITE(2008a)

198

199 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  
200 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。

201

202 ①大気

203 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  
204 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。

205 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

206 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、ECHA、NIST に  $7.4 \times 10^{-12}$   
207  $\text{cm}^3/\text{molecule/s}$  の記載がある。この値は、Becker et al. (1988)による TDI 混合物を試験サ  
208 ンプルとした相対法による測定値である。反応速度定数として、 $7.4 \times 10^{-12} \text{cm}^3/\text{molecule/s}$   
209 を採用し、大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従  
210 い  $5 \times 10^5 \text{molecule/cm}^3$  として、半減期を 2.2 日と算出した。評価Ⅱではこの値 (2.2 日)を  
211 用いる。

212

213 ②水中

214 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  
215 の半減期に関する情報が得られた。

216 ②-1 生分解の半減期

217 化審法の既存点検の分解度試験結果では、GC 法による直接分析の結果、(水+被験物質)  
218 系及び(汚泥+被験物質)系共に被験物質は消失し、新たに試験液中に白色の不溶性物質の  
219 生成が見られている。また、被験物質の変化は1日目と28日目で差がないことから、水と  
220 の接触により、速やかに反応が進んだとされている。以上から、2,4-TDI 自体の生分解性  
221 に関する情報は得ることができなかった。

222

223 ②-2 加水分解の半減期

224 TDI は、その構造から容易に水と反応する。生じる変化物の割合については TDI の濃度  
225 により異なり、TDI が希薄な場合には、二つのイソシアナート基全ての加水分解による  
226 TDA の生成が優先して起こり、TDI が濃厚な場合には、イソシアナート基の一つが加水分  
227 解されアミンになると直ちに別の TDI と重合反応し、オリゴウレア、ポリウレアになりや  
228 すい(IARC,1986 ; Yakabe ら,1999 ; 日本化学会,1996)。

229 Yakabe ら(1999)によると、TDI の水中における半減期はその濃度及び攪拌速度に大きく  
230 影響を受けるとされており、TDI 混合物 28 mg/L を常温で激しく攪拌した場合は 1 分未  
231 満、ゆっくり攪拌した場合は 3~5 分、TDI 混合物 1,000 mg/L を 27 °C で激しく攪拌した  
232 場合は 2,4-TDI では 0.7 時間であり、2,6-TDI では 1.7 時間の記載がある。MOE(2002)に

233 は、水と接触すると加水分解を起こし炭酸ガスを発生するとの記載がある。ECHA には、  
234 27 °Cにおいて 10 mg/l では<0.5 時間、1,000 mg/L では 0.7 時間、10,000 mg/l では 1.6 時  
235 間の記載がある。以上のとおり、TDI は濃度や攪拌速度の違いが半減期に影響する。評価Ⅱ  
236 では最も長い値 (1.7 時間 = 0.071 日)を用いる。

237

### 238 ③土壌

239 情報収集の結果、土壌中での総括分解半減期の情報は得られなかった。また、機序別の分  
240 解反応に関する情報も得られなかった。

#### 241 ③-1 生分解の半減期

242 HSDB には、5 kg の TDI を 50 kg の砂と 5 kg の水で覆った場合に、24 時間後に 5.5 %、  
243 8 日後に 3.5 %残存したとの記載がある。しかし、前述の水中での加水分解についての記載  
244 のとおり、TDI は水との接触により速やかに加水分解が起こるため、この分解は加水分解  
245 よる寄与が大きいと推測される。そこで、生分解の半減期に関する情報は得られなかったと  
246 する。

#### 247 ③-2 加水分解の半減期

248 HSDB には、5 kg の TDI を 50 kg の砂と 5 kg の水で覆った場合に、24 時間後に 5.5 %、  
249 8 日後に 3.5 %残存したとの記載がある。これらから半減期はそれぞれ 0.2 日、1.7 日とな  
250 る。この分解には生分解が寄与している可能性もあるが、前述のとおり TDI は水との接触  
251 により速やかに加水分解が起こるため、この分解は加水分解よる寄与が大きいと推測され  
252 る。そこで、加水分解の半減期として評価Ⅱでは 1.7 日を用いる。

253

### 254 ④底質

255 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  
256 る情報も得られなかった。

#### 257 ④-1 生分解の半減期

258 半減期に関するデータは得られなかった。

#### 259 ④-2 加水分解の半減期

260 半減期に関するデータは得られなかったため、底質中での加水分解半減期は、技術ガイダ  
261 ンスに従って、水中の加水分解半減期と同じ 0.071 日とする。

262

### 263 1-3-3 2,4-TDA の物理化学的性状及び濃縮性

264 下表に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。なお、表中の下線部は、評価Ⅱ  
265 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。

266

267

268

表 1-5 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	—	122.17	—	—
融点	°C	99 <sup>2,3)</sup>	測定値	—
沸点	°C	288 <sup>2,3)</sup>	1013 hPa における測定値	—
蒸気圧	Pa	0.012 <sup>2,3)</sup>	20°C における測定値	—
水に対する溶解度	mg/L	3.5×10 <sup>4</sup> <sup>2,3)</sup>	20°C での測定値	—
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	0.074 <sup>2,3)</sup>	測定値	—
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	5.46×10 <sup>-5</sup> <sup>4)</sup>	測定値か推計値か特定できず	—
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	9763 <sup>2,3,5)</sup>	土壌での測定値	—
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	50	濃縮度試験における測定値 <sup>6)</sup>	—
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 <sup>7)</sup>	—
解離定数(pKa)	—	2.7、5.25 <sup>2)</sup>	測定値	—

269

270

271

272

273

274

275

1) 平成 29 年度第 3 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 11 月 28 日)で了承された値

2) ECHA

5) HSDB

3) OECD(2008)

6) MITI(1978)

4) EPI Suite(2012)

7) MHLW, METI, MOE(2014)

276

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

277

## ①融点

278

279

280

ECHA には GLP 準拠の EU のテストガイドライン(EU Method A.1 (Melting/Freezing Temperature))に従って実施された測定値の記載がある。また、OECD(2008)の SIDS においても同じ値の記載がある。評価Ⅱにおいてはこの値(99 °C)を用いる。

281

282

## ②沸点

283

284

285

286

287

288

ECHA には GLP 準拠の EU のテストガイドライン(EU Method A.2 (Boiling Temperature))に従って実施された測定値(288 °C)の記載がある。また、OECD(2008)の SIDS においても同じ値の記載がある。一方、CRC には 292 °C が記載されており、環境省の「化学物質の環境リスク初期評価」においてもこの値が採用されている。評価Ⅱにおいては、GLP 準拠でテストガイドラインに従って実施された測定値(288 °C)を用いる。

289

## ③蒸気圧

290

291

292

293

ECHA には GLP 準拠の EU のテストガイドライン(EU Method A.4 (Vapour Pressure))に従って実施された 25 °C における測定値(0.017 Pa)の記載がある。また、OECD(2008)の SIDS においても同じ値の記載がある。評価Ⅱにおいてはこの値を 20 °C における値に補正した値(0.012 Pa)を用いる。

294

295 ④水に対する溶解度

296 ECHA には GLP 準拠の EU のテストガイドライン(EU Method A.6 (Water Solubility))  
297 に従って実施された 25 °Cにおける測定値( $3.8 \times 10^4$  mg/L)の記載がある。また、  
298 OECD(2008)の SIDS においても同じ値の記載がある。評価Ⅱにおいてはこの値を 20 °Cに  
299 おける値に補正した値( $3.5 \times 10^4$  mg/L) を用いる。

300

301 ⑤logPow

302 ECHA には GLP 準拠の EU のテストガイドライン(EU Method A.8 (Partition  
303 Coefficient))に従って実施された測定値(0.074)の記載がある。また、OECD(2008)の SIDS  
304 においても同じ値の記載がある。評価Ⅱにおいてはこの値(0.074)を用いる。

305

306 ⑥ヘンリー係数

307 専門家によるレビューを経ている情報源である OECD(2008)の SIDS には  $5.46 \times 10^{-5}$  Pa·  
308 m<sup>3</sup>/mol の記載があるが、その出典が不明である。その他の情報源においても測定値は得ら  
309 れていないため、評価Ⅱにおいてはこの値( $5.46 \times 10^{-5}$  Pa·m<sup>3</sup>/mol)を用いる。

310

311 ⑦Koc

312 ECHA 及び HSDB には、Cowen et al. (1998)の実験による好气的条件による 7 日間の実  
313 測値(9763 L/kg) 及び 8 時間の実測値(1339 L/kg)並びに嫌气的条件による 7 日間の実測値  
314 (4454 L/kg)及び 8 時間の実測値(884 L/kg)の記載がある。土壌の性状を表 2-4 に示す。

315

316 表 1-4 Cowen et al. (1998) の研究で用いられたの土壌の性状

土壌	Washington シルト質壤土	Freehold 砂質壤土
pH	5	5.8
有機物含量, %	1.3	1.6
砂含量, %	21	53
粘土含量, %	19	7
シルト含量, %	60	40
カチオン交換容 量, meq/100 g	13.6	17.7
圃場容水量, %	23.05	31.46

317

318 OECD(2008)の SIDS においては好气的条件による 7 日間の実測値(9763 L/kg)が採用さ  
319 れていることから、評価Ⅱにおいてはこの値を用いる。

320

321 ⑧BCF

322 化審法の生物濃縮性の判定に用いられた、MITI(1978)の化審法の魚介類の体内における  
323 化学物質の濃縮度試験においては、第 1 濃度区及び第 2 濃度区ともに魚体中濃度は分析限

324 界以下であり、第1濃度区で5倍以下、第2濃度区で50倍以下であった。評価Ⅱにおいて  
 325 は倍率が高い第2濃度区の値(50 L/kg)を用いる。

326

327 ⑨BMF

328 BMFの測定値は得られなかったため、評価ⅡにおいてはlogPow(0.074)及びBCF(50  
 329 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、  
 330 「技術ガイダンス」という。)に従って設定した値(1)を用いる。

331

332 ⑩pKa

333 ECHAにはGLP準拠のOECDのテストガイドライン112に従って実施された滴定法に  
 334 よる測定値(2.7、5.1)及び分光光度法による測定値(2.7、5.4)が記載されている。このため、  
 335 評価Ⅱでは、これらの算術平均値(2.7、5.25)を用いる。

336 pKaが2.7、5.25の場合、pH5.0、6.0、7.0、8.0、9.0、10.0の水中では、それぞれ44%、  
 337 89%、99%、100%、100%及び100%が非解離種として存在する。

338

339 1-3-4 2,4TDAの分解性

340 下表に採用した分解に係るデータを示す。

341

表 1-5 分解に係るデータのまとめ

項目		半減期 (日)	詳細	
大気	大気における総括分解半減期		NA	
	機序別の 半減期	OHラジカルとの反応	0.084	反応速度定数の測定値 <sup>2-7)</sup> から、OHラジカル濃度を $5 \times 10^5$ molecule/cm <sup>3</sup> として算出 <sup>1)</sup>
		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	262	土壌の生分解による半減期と同等であると仮定
		加水分解	—	加水分解を受けやすい基を有さない物質
		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	262	好氣的生分解の試験データ <sup>4)</sup> から算出
		加水分解	—	加水分解を受けやすい基を有さない物質
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	1,048	土壌の生分解半減期の4倍と仮定 <sup>8)</sup>
		加水分解	—	加水分解を受けやすい基を有さない物質

342 1) 平成29年度第3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  
 343 ビュー会議(平成29年11月28日)で了承された値

344	2) HSDB	6) PhysProp
345	3) MOE(2008)	7) NIST
346	4) ECHA	8) MHLW, METI, MOE(2014)
347	5) NITE(2008b)	NA:情報が得られなかったことを示す

348

349 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  
350 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。

351

352 ①大気

353 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  
354 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。

355 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

356 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、HSDB、MOE(2008)、ECHA、  
357 NITE(2008b)、PhysProp、NIST に  $1.9 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  の記載がある。この値は、  
358 Becker et al. (1988)による 2,4-TDA を試験サンプルとした相対法による測定値である。反  
359 応速度定数として、 $1.9 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  を採用し、大気中 OH ラジカル濃度を技術ガ  
360 イダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従い  $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$  として、半減期を 0.084  
361 日と算出した。評価Ⅱではこの値 (0.084 日)を用いる。

362

363 ②水中

364 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  
365 の半減期に関する情報が得られた。

366 ②-1 生分解の半減期

367 化審法の既存点検の分解度試験結果では、BOD 分解度は 0 %、TOC 分解度は 3.0 %、GC  
368 による分解度は 7.9 %であり、技術ガイダンスに従って半減期は 10,000 日となる。また、  
369 後述の土壌の生分解半減期は 262 日である。評価Ⅱでは土壌における生分解による半減期  
370 と同等であると仮定し 262 日とする。

371 ②-2 加水分解の半減期

372 2,4-TDA は加水分解を受けやすい基を有していない。

373

374 ③土壌

375 情報収集の結果、土壌中での総括分解半減期の情報は得られなかった。また、機序別の分  
376 解反応に関する情報も得られなかった。

377 ③-1 生分解の半減期

378 ECHA では Cowen et al. (1998)による  $^{14}\text{C}$  標識 2,4-TDA を用いた、Washington silt  
379 loam、365 日、25 °Cにおける好氣的生分解の測定値の記載がある。分解度は 0 日 : 1 %、  
380 1 日 : 1.3 %、3 日 : 1.9 %、7 日 : 4.0 %、14 日 : 5.7 %及び 7.9 %、28 日 : 10.8 %、56 日 :

381 14.8%、210日：36.8%、365日：34.2%であった。なお、210日及び365日の結果はマス  
382 バランスが悪いため適切ではないとしている。そこで、3日から56日までの分解度から半  
383 減期262日となる。評価Ⅱでは生分解による半減期を262日とする。

384 ③-2 加水分解の半減期

385 2,4-TDAは加水分解を受けやすい基を有していない。

386

387 ④底質

388 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  
389 る情報も得られなかった。

390 ④-1 生分解の半減期

391 半減期に関する十分なデータは得られなかったため、底質中での生分解半減期は、技術ガ  
392 イダンスに従って、土壌の生分解半減期の4倍である1,048日とする。

393 ④-2 加水分解の半減期

394 2,4-TDAは加水分解を受けやすい基を有していない。

395

396

397

398



399    **2 【付属資料】**

400    **2 - 1 物理化学的性状等一覽**

401        收集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

402

403    出典)

404    Becker et al. (1988): K.H. Becker, V. Bastian, Th. Klein, The reactions of OH radicals  
405    with toluene diisocyanate, toluenediamine and methylenedianiline under simulated  
406    atmospheric conditions, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*,  
407    45(2):195-205, 1988.

408    Cowen et al. (1998): W.F. Cowen, A. M. Gastinger, C. E. Spanier, J. R. Buckel, Sorption  
409    and Microbial Degradation of Toluenediamines and Methylenedianiline in Soil under  
410    Aerobic and Anaerobic Conditions, *Environ. Sci. Technol.*, 32 (5):598–603, 1998.

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

413    DYSON, W. L., & HERMANN, E. R. (1971). Reduction of atmospheric toluene  
414    diisocyanate by water vapor. *American Industrial Hygiene Association Journal*, 32(11),  
415    741-744.

416    ECHA: Information on Chemicals – Registered substances.

417    ECHA (2013): Substance Evaluation Report. Ver. 0.2, CoRAP, 2013.

418    EPA (2011): U.S. Environmental Protection Agency. Toluene Diisocyanate (TDI) And  
419    Related Compounds Action Plan [RIN 2070 -ZA14]

420    Holdren et al. (1984): M.W. Holdren, C.W. Spicer, R.M. Riggin, Gas phase reaction of  
421    toluene diisocyanate with water vapor, *Am. Ind. Hyg. Assoc. J.* 45: 626– 633, 1984.

422    HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank.[http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB)  
423    bin/sis/htmlgen?HSDB, (2017-10-03 閲覧).

424    IARC (1986): International Agency for Research on Cancer. Some chemicals used in  
425    plastics and elastomers. *IARC Monograph on the Evaluation of Carcinogenic Risks to*  
426    *Humans*, 39, 287-323, 1986.

427    IUCLID (2000): EU ECB, IUCLID Dataset. m-tolyidene diisocyanate, 2000.

- 428 METI(2003): 2, 4-ジイソシアナトトルエン(被験物質番号 K-311)のコイにおける濃縮  
429 度試験. 既存化学物質点検, 2003.
- 430 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  
431 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.
- 432 MITI(1978): 4-メチルフェニレン-1, 3-ジアミンの濃縮度試験報告書, 既存化学物  
433 質点検, 1978.
- 434 MITI(1988): 2, 4-ジイソシアナトトルエン(被験物質番号 K-311)の微生物による分解  
435 度試験. 既存化学物質点検, 1988.
- 436 MOE(2002): 化学物質の環境リスク評価 第1巻, トルエンジイソシアネート. 2002.
- 437 MOE(2008): 化学物質の環境リスク評価 第6巻, 2,4-トルエンジアミン. 2008.
- 438 NIST: NIST. Chemistry WebBook. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>, (2017-10-03 閲  
439 覧).
- 440 NITE(2008a): 化学物質の初期リスク評価書, メチル-1,3-フェニレンジイソシアネート.  
441 Ver. 1.0, No. 113, 2008.
- 442 NITE(2008b): 化学物質の初期リスク評価書, 2,4-トルエンジアミン. Ver. 1.0, No. 43, 2008.
- 443 OECD (2008): SIDS Initial Assessment Report, 4-methyl-m-phenyldiamine. 2008.
- 444 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-10-03 閲  
445 覧).
- 446 Yakabe et al. (1999): Yakabe, Y., Henderson, K.M., Thompson, W.C., Pemberton, D.,  
447 Tury, B. and Bailer, R.E. Fate of methylenediphenyl diisocyanate and toluene  
448 diisocyanate in the aquatic environment. Environ. Sci. Technol., 33, 2579-2583, 1999.
- 449 化学工業日報社(2008): 15308 の化学商品, 2008.
- 450 日本化学会編(1996): 化学防災指針集成, 丸善, 東京, 1996.
- 451
- 452 **2-2 その他**
- 453 特になし。
- 454

情報源略称	詳細等
ECHA	Information on Chemicals - Registered substances
EHC	WHO/IPCS: 「環境保健クライテリア (EHC) 」
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUCLID	EU ECB International Uniform Chemical Information Database
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

基本情報

PACS F 等	129004
PACS Name 等	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価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 EHC	融点	4.7~6 ° C[65:35 mix]	5.35					-		2B	×	×			2.2. Physical and Chemical Properties
2 EHC	融点	12.5~13.5 °C[80:20]	13					-		2B	×	×			2.2. Physical and Chemical Properties
3 HSDB	凝固点	11~14 °C	12.5					-		2B	×	×	Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. 3rd ed., Volumes 1-26. New York, NY: John Wiley and Sons, 1978- 1984., p. V15: 790 (1981)	CHEMICAL/PHYSICA L PROPERTIES: > MELTING POINT:	
4 MOE初期評 価	融点	20 °C	20					-		2B	×	×	SRC, Syracuse Research Corporation (2007): SRC PhysProp Database, (http://esc.syrres.com./interkow/physdemo .htm)	p.1	
5 NITE初期リ スク評価書	融点	19.5~21.5 °C[2.4-TD]	20.5					-		2B	×	×	Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ	p.2	
6 NITE初期リ スク評価書	凝固点	7.2 °C[2.6- TD]	7.2					-		2B	×	×	Verschueren, K. (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., JohnWiley & Sons, Inc., New York, NY	p.3	
7 PhysProp	融点	20 °C	20					-		2B	×	×			Melting Pt
8 REACH登録 情報	凝固点	9.5~10 ° C[Sublimati on: no]	9.75	EU Method A.1	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	×	study report, 1995, 1995-05-31		Exp Key Melting point/freezing point.001
9 REACH登録 情報	凝固点	4 ° C[Decomp osition: ambiguous  Sublimatio n: ambiguous ]	4	EU Method A.1	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	×	study report, 1995, 1995-11-01		Exp Key Melting point/freezing point.002

基本情報

登録番号	129004
PACS F 等	129004
PACS Name 等	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

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 ディー該非 (評価 I)	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 EHC	121 °C	121	156.4706	10 mmHg					-		2B	×	×		WINDHOLZ, M., ed. (1983) The Merck Index: an encyclopedia of chemicals and drugs, 10th ed., Rahway, New Jersey, Merck and Company, p. 1363.	2.2. Physical and Chemical Properties
2 EHC	251 °C	251	251	760 mmHg					-		2B	×	×			2.2. Physical and Chemical Properties
3 HSDB	125 °C	125							-		4A	×	×		ITC/USEPA; Information Review #231 (Draft) Toluene Diisocyanates p.2 (1981)	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
4 MOE初期評価	251 °C	251							-		4A	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2007): SRC PhysProp Database, ( <a href="http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm">http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm</a> )	p.1
5 NITE初期リスク評価書	251 °C[2,4-TDI]	251	251.0118	1.013E+05 Pa					-		2B	×	×		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.	p.2
6 NITE初期リスク評価書	129~133 °C[2,6-TDI]	131	166.9825	2.4 kPa					-		2B	×	×		IPCS, International Programme on Chemical Safety (1999) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva. ( <a href="http://www.ilo.org/public/english/protectio n/safework/cis/products/icsc/dtasht/index.htm">http://www.ilo.org/public/english/protectio n/safework/cis/products/icsc/dtasht/index.htm</a> から引用)	p.3
7 PhysProp	251 °C	251							-		4A	×	×			Boiling Pt
8 REACH登録情報	253~255 °C[Decomposition: ambiguous [65/35 TDI has a boiling point of 252 - 255 °C at	254	254.0119	1013 hPa	EU Method A.2	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	×		study report, 1995, 1995-11-01	Exp Key Boiling point.001
9 REACH登録情報	252~254 °C	253	253.0118	1013 hPa	EU Method A.2	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	○		study report, 1995, 1995-05-31	Exp Key Boiling point.002

基本情報

PACS F 等	129004
PACS Name 等	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA IN	Benzene, 1,3-disocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

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
1 EHC	1.9 mmHg	253.3125	4.0543406	94 °C					-		4A	×	×		WOOLRICH, P.F. & RYE, W.A. (1969) Urethanes. Engineering, medical control and toxicologic consideration. J. occup. Med., 11(4): 184-190.	2.2. Physical and Chemical Properties
2 EHC	0.01 mmHg	1.3332237	1.3332237	20 °C					-		2B	×	×			2.2. Physical and Chemical Properties
3 HSDB	0.5 mmHg[80% 2,4,20% 2,6]	66.661184	47.256289	25 °C					-		2B	×	×		American Conference of Governmental Industrial Hygienists, Inc. Documentation of the Threshold Limit Values, 4th ed., 1980. Cincinnati, Ohio: American Conference of Governmental Industrial Hygienists, Inc., 1980., p. 401	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
4 HSDB	2.3E-2 mmHg	3.0664145	2.1737893	25 °C					-		2B	×	×		Hann RW Jr, Jensen PA; Water quality characteristics of hazardous materials. Texas A&M Univ., College Station Environ Eng Div. NTIS-PB-285946. p. 1751 (1977)	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE:
5 MOE初期評価	2.3E-02 mmHg	3.0664145	2.1737893	25 °C					experimental result		2B	×	×		Hann Jr, R.W. and P.A. Jensen (1977): Water quality characteristics of hazardous materials. Texas A&M Univ., College Station Environ Eng Div. NTIS/PB285946.	p.1
6 NITE初期リスクリスク評価書	1 Pa[2,4-TDI]	1	1	20 °C					-		2B	×	×		Verschueren, K. (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., JohnWiley & Sons, Inc., New York, NY	p.2
7 NITE初期リスクリスク評価書	100 Pa[2,4-TDI]	100	3.0639164	80 °C					-		4A	×	×		Verschueren, K. (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., JohnWiley & Sons, Inc., New York, NY	p.2
8 NITE初期リスクリスク評価書	2 Pa[2,6-TDI]	2	2	20 °C					-		2B	×	×		IPCS, International Programme on Chemical Safety (1999) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva. ( <a href="http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtash/index.htm">http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtash/index.htm</a> から引用)	p.3
9 PhysProp	0.023 mmHg	3.0664145	2.1737893	25 °C					experimental result		2B	×	×		HANN,RWJR & JENSEN,PA (1977)	Vapor Pressure
10 REACH登録情報	0.014 hPa	1.4	1.4	20 °C	EU Method A.4	yes	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×	×		study report, 1995, 1995-11-01	Calc Key Vapour pressure.001
11 REACH登録情報	0.015 hPa	1.5	1.5	20 °C	EU Method A.4	yes	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×	×		study report, 1995, 1995-05-31	Calc Key Vapour pressure.002

基本情報

PACS F 等	129004
PACS Name 等	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価 I)	キースタ ディー該非 (評価 I)	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	124.2 mg/L[2B以上 の値を用いて 推定 (2C) ]	124.2	115.9415	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	○	×			
2 HSDB	[Isocyanates hydrolyze readily in water]	単位換算不 可								-		3	×	×		Six C, Richter F; Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 7th ed. (1999-2012). New York, NY: John Wiley & Sons; Isocyanates, Organic. Online Posting Date: 15 Jan 2003	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
3 MOE初期評 価	3.76E+01 mg/L	37.6	35.0998421	25 °C						estimated by calculation		4C	×	×		Meylan, W.M., P.H. Howard and R.S. Boethling (1996): Improved method for estimating water solubility from octanol/water partition coefficient. Environ. Toxicol. Chem. 15: 100-106.	p.1
4 PhysProp	37.57 mg/L	37.57	35.0718369	25 °C						estimated by calculation		4C	×	×		MEYLAN,WM ET AL. (1996)	Water Solubility
5 REACH登録 情報	124 mg/L[moder ately soluble (100-1000 mg/L)]	124	115.754798	25 °C		WSKOWWIN	no	2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR	WSKOWWIN (v1.41)	4C	×	×		publication, 2008	QSAR Key Water solubility.002

基本情報

PACS F 等	129004
PACS Name 等	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

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 EPI Suite	3.74	3.74			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2 MOE初期評 価	3.74	3.74							estimated by calculation		4C	×	×		Meylan, W.M. and P.H. Howard (1995): Atom/fragment contribution method for estimating octanol- water partition coefficients. J. Pharm. Sci. 84: 83-92.	p.1
3 PhysProp	3.74	3.74							estimated by calculation		4C	×	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1995)	Log P (octanol-water)
4 REACH登録 情報	3.43	3.43	22 °C	7[pH not stated but value around 7 presume d.]	OECD TG 117	no	2: reliable with restriction s	key study	experimental result		1B	○	○		publication, 2000	Exp Key Partition coefficient.001



基本情報

PACS F 等	129004
PACS Name 等	1,3-ジイソシアナト(メチル)ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA-IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

▲ 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 EPI Suite	Koc	947.3 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定 (2C)]	947.3				KOCWIN				(Q)SAR		2C	○	×			

基本情報

PACS F 等	129004
PACS Name 等	1,3-ジイソシアナト(メチル)ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m <sup>3</sup> /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価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 EPI Suite	0.82 Pa・m <sup>3</sup> /mol	0.82					(Q)SAR		2C	○	×			
2 PhysProp	0.0000111 atm・ m <sup>3</sup> /mol	1.1247075					estimated by calculation		4C	×	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1991)	Henry's Law Constant

基本情報

PACS F 等	129004
PACS Name 等	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

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Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1			BCF		<=85.14 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C) ]	85.14	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2 IUCLID		1	0.3 mg/L		BCF		<5	5	OECD TG 305C						1B	○	×			p.33-34
3 NITE初期リス ク評価書		2	0.08 µg/L		その他	定常状態	130[2.4- TDI]	130	化審法TG				experimental result		1B	×	×		通商産業省 (1977) 通商産業公報 (1977年12月1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.9
4 NITE初期リス ク評価書		2	0.08 µg/L		その他		25~ 380[2.4- TDI]	202.5	化審法TG				experimental result		1B	×	×		通商産業省 (1977) 通商産業公報 (1977年12月1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.9
5 NITE初期リス ク評価書		1	0.8 µg/L		その他	定常状態	180[2.4- TDI]	180	化審法TG				experimental result		1B	○	○		通商産業省 (1977) 通商産業公報 (1977年12月1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.9
6 NITE初期リス ク評価書		1	0.8 µg/L		その他		43~ 210[2.4- TDI]	126.5	化審法TG				experimental result		1B	×	×		通商産業省 (1977) 通商産業公報 (1977年12月1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.9

基本情報

PACS F 等	129004
PACS Name 等	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
------	----	---	------	------------	----	-------	-----	-------------	--------------------------	------	---------	-------------------	----	----	--------

基本情報

PACS F 等	129004
PACS Name 等	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA-IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期(day)	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の詳細	キースタディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 HSDB	大気	OHラジカルとの反応		7.07E-12 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec	5E+5 molecule/c m <sup>3</sup>	20 時間		2.26945879								-		×		Atkinson R; J Phys Chem Ref Data Monograph No. 1 (1989) (反応速度)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation: (and Other Chemical/Physical Properties.)
2 HSDB	水域	加水分解														experimen tal result		×		Sopach ED, Boltromeyuk LP; Gig Sanit 7: 10-3 (1974)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:
3 HSDB	大気	直接光分解														-		×		SRC Lyman WJ et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Washington, DC: Amer Chem Soc pp. 8-12 (1990)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Fate:
4 HSDB	大気	総括分解				3.3 時間 [The loss rate of toluene diisocyanate in irradiated clean air was first order with a half-life of 3.3 hrs]										experimen tal result	Experiments were performed in the environmental chamber to assess the importance of toluene diisocyanate's photolysis, reaction with free radicals, and adsorption onto particulate matter as atmospheric removal	×		Duff PB; Proc of the SPI Tech/Mark Conf 29: 9-14 (1985)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Fate:
5 HSDB	土壌	加水分解				1.7 日										experimen tal result		○		Brochhagen, F.K., Grievesson, B.M., Environmental Aspects of Isocyanates in Water and Soil, Cellular Polymers 3(1984)	P.13
6 NITE初期リスク評価書	大気	OHラジカルとの反応		7.07E-12 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec	5E+05~ 1E+06 molecule/c m <sup>3</sup>	1~2 日		1.51297252	25 °C							experimen tal result		×		SRC, Syracuse Research Corporation (2004) AopWin Estimation Software, ver. 1.90, North Syracuse, NY.	p.6
7 NITE初期リスク評価書	水域	加水分解				1.7 時間 [2,6-TDI]激しく攪拌]										experimen tal result		○		Brown, S.L., Chan, F.Y., Jones, J.L., Liu, D.H. and McCaleb, K.E. (1975) Research program on hazard priority ranking of manufactured chemicals (chemicals 21-40), NTIS PB-263 162, Stanford Research Institute, Menlo Park, CA.	p.7
8 NITE初期リスク評価書	水域	加水分解				0.5 秒[TDI]				7						experimen tal result		×		Brown, S.L., Chan, F.Y., Jones, J.L., Liu, D.H. and McCaleb, K.E. (1975) Research program on hazard priority ranking of manufactured chemicals (chemicals 21-40), NTIS PB-263 162, Stanford Research Institute, Menlo Park, CA.	p.7

PACS F等	129004
PACS Name等	1,3-ジイソシアナト(メチル)ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期(day)	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価II)	備考	文献	ページ番号等
9 NITE初期リスク評価書	水域	生分解(好氣的)					0 %[2,4-TDI]生物化学的酸素消費量(BOD)測定]				化審法TG					experimental result		×		経済産業省(2003a) 経済産業公報(2003年10月14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.7-8
10 NITE初期リスク評価書	水域	生分解(好氣的)					100 %[2,4-TDI]ガスクロマトグラフ(GC)測定]				化審法TG					experimental result		×		経済産業省(2003a) 経済産業公報(2003年10月14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.7-8
11 NITE初期リスク評価書	水域	生分解(好氣的)					15 %[2,4-TDI]化学的酸素消費量(COD)測定]				その他,好氣的生分解性試験					experimental result		×		Matsui, S., Okawa, Y. and Ota, R. (1988) Experience of 16 years operation and maintenance of the Fukushima industrial wastewater treatment plant of the Kashima petrochemical complex-II. Biodegradability of 37 organic substances and 28 process wastewaters. Wat. Sci. Tech., 20, 201-210.	p.8
12 NITE初期リスク評価書	大気	オゾンとの反応														-		×		Brown, S.L., Chan, F.Y., Jones, J.L., Liu, D.H. and McCaleb, K.E. (1975) Research program on hazard priority ranking of manufactured chemicals (chemicals 21-40), NTIS PB-263 162, Stanford Research Institute, Menlo Park, CA.	p.6
13 NITE初期リスク評価書	水域	加水分解														-		×		IARC, International Agency for Research on Cancer (1986) Some chemicals used in plastics and elastomers. IARC Monograph on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans, 39, 287-323. Yakabe, Y., Henderson, K.M., Thompson, W.C., Pemberton, D., Tury, B. and Bailor, R.E. (1999) Fate of methylenediphenyl diisocyanate and toluene diisocyanate in the aquatic environment. Environ. Sci. Technol., 33, 2579-2583. 日本化学会編(1996) 化学防災指針集成, 丸善, 東京.	p.7
14 NITE初期リスク評価書	水域	加水分解														experimental result		×		Sopach, E.D. and Boltromeyuk, L.P. (1974) Gig Sanit., 7, 10-13. (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB から引用)	p.7
15 NITE初期リスク評価書	水域	加水分解					<1分[激しく攪拌]			[室温]						experimental result		×		Yakabe, Y., Henderson, K.M., Thompson, W.C., Pemberton, D., Tury, B. and Bailor, R.E. (1999) Fate of methylenediphenyl diisocyanate and toluene diisocyanate in the aquatic environment. Environ. Sci. Technol., 33, 2579-2583.	p.7
16 NITE初期リスク評価書	水域	加水分解					3~5分[ゆっくと攪拌]									experimental result		×		Yakabe, Y., Henderson, K.M., Thompson, W.C., Pemberton, D., Tury, B. and Bailor, R.E. (1999) Fate of methylenediphenyl diisocyanate and toluene diisocyanate in the aquatic environment. Environ. Sci. Technol., 33, 2579-2583.	p.7

PACS F等	129004
PACS Name等	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評価II)	備考	文献	ページ番号等
17 NITE初期リスク評価書	水域	加水分解				0.7 時間 [2,4-TDI] 激しく攪拌]										experimental result		×		Yakabe, Y., Henderson, K.M., Thompson, W.C., Pemberton, D., Tury, B. and Bailor, R.E. (1999) Fate of methylenediphenyl diisocyanate and toluene diisocyanate in the aquatic environment. Environ. Sci. Technol., 33, 2579-2583.	p.7
18 PhysProp	大気	OHラジカルとの反応		0.00000000 000707 cm³/molec ule/sec				2.26945879	25 °C							experimental result		×		ATKINSON,R (1989)	Atmospheric OH Rate Constant
19 REACH登録情報	水域	生分解 (好氣的)					0 % [O2 consumption [28 d]				OECD TG 302C		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		×		study report, 1986, 1986-05-31	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
20 REACH登録情報	水域	加水分解	0[1時間]						27 °C		その他, Specific study protocol for this test material.		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		×		publication, 1984	Exp Supporting Hydrolysis.005
21 REACH登録情報	大気	その他, 光分解			4 mg/l [Sensitiser (for indirect photolysis); other: NO2, O3, NH3, Triethylene diamine, (NH4)2SO4 Sensitiser concentration: 4 mg/l]		0~21 % [Sampling time 1 h]		27 °C		その他, Laboratory study of degradation of TDI in air, photolytic decomposition.		no	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		×		study report, 1993, 1993-05-05	Exp Supporting Phototransformation in air.002
22 REACH登録情報	大気	OHラジカルとの反応		6.3E-12 cm³/molec ule/sec		1.71 日		2.54683708			AOPWIN		no	2: reliable with restrictions	supporting study	(Q)SAR		×		publication, 2008, 2008-03-01	QSAR Supporting Phototransformation in air.003
23 REACH登録情報	水域	加水分解				0.5~1.6 時間 [4-methyl-m-phenylene diisocyanate]	50~90 % [Total recovery degradation at pH 6.3 and 27 °C: Degradation (in %): = 50 ... 90 after 2hour(s)] [4-methyl-m-phenylene diisocyanate]		27 °C	6.3	記載なし		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) だが、対象物質は試験物質を包含している	×		study report, 1989, 1989-08-31 study report, 1991, 1991-11-17 study report, 1994, 1994-02-10	Read across Substances Key Hydrolysis.006
24 REACH登録情報	土壌	生分解					0 % [4 mo]		22 °C		その他, laboratory		no	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		×		study report, 1981, 1981-01-01 publication, 1981	Exp Supporting Biodegradation in soil.001
25 REACH登録情報	土壌	生分解					0 % [4 mo]		22 °C		その他, laboratory		no	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		×		study report, 1981 publication, 1981	Exp Supporting Biodegradation in soil.002
26 REACH登録情報	土壌	生分解					0 % [4 mo]		22 °C		その他, field trial		no	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		×		study report, 1981, 1981-01-01 publication, 1981	Exp Supporting Biodegradation in soil.003
27 REACH登録情報	水域	加水分解				0.5 分			[Ambient]		記載なし		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		×		publication, 1999	Exp Key Hydrolysis.001

PACS F等	129004
PACS Name等	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
28 REACH登録情報	大気	OHラジカルとの反応		0.00000000000074 cm <sup>3</sup> /molec	100000000 molecule/c m <sup>3</sup> [Sensiti ser (for indirect photolysis): OH Sensiti ser concentration: up to 100000000 molecule/c m <sup>3</sup> ]			1.08E-02	25 °C				no	2: reliable with restrictions	key study	experimen tal result		○		publication, 1988	Exp Key Phototransformati on in air.001
29 REACH登録情報	水域	加水分解					0~0.4 % [0 to 0.4% degradation after 30 days at pH 7 and 27°C.]		27 °C	7	記載なし		no	2: reliable with restrictions	supporting study	experimen tal result		×		study report, 1980, 1980-01-31	Exp Supporting Hydrolysis.002



参考情報

PACS F 等	129004
PACS Name 等	1, 3-ジイソシアナト (メチル) ベンゼン
CASRN	26471-62-5
CA_IN	Benzene, 1,3-diisocyanatomethyl-
その他番号	
その他名称	
SMILES	

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 IUCLID	その他	0%			OECD TG 302C	no							p.33
2 REACH登録情報		0%	O_2 consumption		OECD TG 302C	no	2: reliable with	key study	experimental result			1986, 1986.5.31.	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001

情報源略称	詳細等
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
CCD	Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 16th, John Wiley & Sons
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics, 97th, CRC-Press
ECHA	Information on Chemicals - Registered substances
EHC	WHO/IPCS: 「環境保健クライテリア (EHC) 」
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
Howard FATE	Handbook of Environmental FATE & EXPOSURE
Howard Deg	Handbook of Environmental Degradation Rates
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
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」
NIST	NIST Chemistry WebBook
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
SIDS	OECD: SIDSレポート
SPARC	SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry

基本情報

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価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 Aldrich	融点	97~99 °C	98					-		2B	×	×			p.868
2 CCD	融点	99 °C	99					-		2B	×	×			
3 CRC	融点	99 °C	99					-		2B	×	×			Physical Constants of Organic Compounds
4 EHC	融点	99 °C	99					-		2B	×	×			2.2. Physical and Chemical Properties
5 EPI Suite	融点	67.32 °C	67.32	MPBPWIN				(Q)SAR	Weighted Value	2C	×	×			
6 HSDB	融点	99 °C	99					-		2B	×	×		Haynes, W.M. (ed.) CRC Handbook of Chemistry and Physics. 91st ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 2010-2011, p. 3-486	Chemical/Physical Properties: > Melting Point:
7 MOE初期評 価	融点	99 °C	99					-		2B	×	×		IPCS (1998): International Chemical Safety Cards. 0582. 2,4-Toluenediamine.	p.1
8 MOE初期評 価	融点	99 °C	99					-		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
9 MOE初期評 価	融点	97~99 °C	98					-		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: 126. Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).	p.1
10 NITE初期リ スク評価書	融点	99 °C	99					-		2B	×	×		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.	p.2
11 PhysProp	融点	99 °C	99					-		2B	×	×			Melting Pt
12 REACH登録 情報	融点	99 °C	99	EU Method A.1	yes (incl. certificate )	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	○		study report, 2000, 2000-05-30	(JS Member) Exp Key Melting point/freezing point.002
13 REACH登録 情報	融点	99 °C	99	EU Method A.1	yes (incl. certificate )	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	○		study report, 2000, 2000-05-30	Exp Key Melting point/freezing point.001
14 SIDS	融点	99 °C	99	-	-	-	key study	experimental result	DSC	2A	×	○		I.I.I. (2000): Determination of physical properties of 2,4-TDA. International Isocyanate Institute Inc., Manchester, Ill Project 146, part 2 from June, 2000.	p.12

基本情報

登録番号	
PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

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 Aldrich	283~285 ° C	284	284	760 mmHg					-		2B	×	×			p.868
2 CCD	280 °C	280	280	760 mmHg					-		2B	×	×			
3 CRC	292 °C	292	292	101.325 kPa[760 mmHg (101.325 kPa)]					-		2B	○	○			Physical Constants of Organic Compounds
4 EHC	280 °C	280							-		4A	×	×			2.2. Physical and Chemical Properties
5 EPI Suite	270.43 °C	270.43			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown	2C	×	×			
6 HSDB	292 °C	292							-		4A	×	×		Haynes, W.M. (ed.) CRC Handbook of Chemistry and Physics. 91st ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 2010-2011, p. 3-486	Chemical/Physical Properties: > Boiling Point:
7 MOE初期評 価	292 °C	292							-		4A	×	×		IPCS (1998): International Chemical Safety Cards. 0582. 2,4-Toluenediamine.	p.1
8 MOE初期評 価	292 °C	292	292	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
9 MOE初期評 価	283~285 ° C	284	284	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: 126.	p.1
10 MOE初期評 価	283~285 ° C	284							-		4A	×	×		Verschuere, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).	p.1
11 NITE初期リ スク評価書	292 °C	292	292.0127	1.013E+05 Pa					-		2B	×	×		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.	p.8
12 PhysProp	292 °C	292							-		4A	×	×			Boiling Pt
13 REACH登録 情報	288±2 ° C[Uncertai nty of ±2° C]	288		[Stated as atmospheri c pressure]	EU Method A.2	yes (incl. certificat e)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×	×		study report, 2000, 2000-05-30	(JS Member) Exp Key Boiling point.002

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4 -ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4 -メチル - 1, 3 -フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

▲ 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
14 REACH登録 情報	288±2 ° C[Uncertai nty of ±2° C]	288		[Stated as atmospheri c pressure]	EU Method A.2	yes (incl. certificat e)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×	×		study report, 2000, 2000-05-30	Exp Key Boiling point.001
15 SIDS	288 °C	288			-	-	-	key study	experimental result	DSC	4A	×	×		I.I.I. (2000): Determination of physical properties of 2,4-TDA. International Isocyanate Institute Inc., Manchester, Ill Project 146, part 2 from June, 2000.	p.12

基本情報

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA_IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

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 ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 CRC	100 Pa	100	1.208882	100.4 °C					-		4A	×	×		TRCVP, Vapor Pressure Database, Version 2.2P, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX .	Vapor Pressure
2 CRC	1 kPa	1000	2.148558	145.3 °C					-		4A	×	×		TRCVP, Vapor Pressure Database, Version 2.2P, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX .	Vapor Pressure
3 CRC	10 kPa	10000	3.77513	202.9 °C					-		4A	×	×		TRCVP, Vapor Pressure Database, Version 2.2P, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX .	Vapor Pressure
4 CRC	100 kPa	100000	6.55364	279.5 °C					-		4A	×	×		TRCVP, Vapor Pressure Database, Version 2.2P, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX .	Vapor Pressure
5 EHC	1.47 kPa	1470	2.692384	150 °C					-		4A	×	×			2.2. Physical and Chemical Properties
6 EHC	2.27 kPa	2270	2.994654	160 °C					-		4A	×	×			2.2. Physical and Chemical Properties
7 EHC	4.80 kPa	4800	3.431088	180 °C					-		4A	×	×			2.2. Physical and Chemical Properties
8 HSDB	1.70E-4 mmHg	0.022665	1.61E-02	25 °C					-		2B	×	×		Daubert TE, Danner RP; Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, DC: Taylor and Francis (1987)	Chemical/Physical Properties: > Vapor Pressure:
9 HSDB	1 mmHg	133.3224	1.244356	106.5 °C					-		4A	×	×		Lewis, R.J. Sr. (ed) Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials. 11th Edition. Wiley-Interscience, Wiley & Sons, Inc. Hoboken, NJ. 2004., p. V3: 3481	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
10 MOE初期評 価	0.13 kPa	130	1.213347	106.5 °C					-		4A	×	×		IPCS (1998): International Chemical Safety Cards. 0582, 2,4-Toluenediamine.	p.1
11 MOE初期評 価	0.0227 Pa[1.70× 10 <sup>-4</sup> mmHg (=0.0227 Pa) (25°C)]	0.0227	1.61E-02	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: 126.	p.1

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

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 NITE初期リスク評価書	0.13 kPa	130	1.213347	106.5 °C					-		4A	×	×		IPCS, International Programme on Chemical Safety (2000) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva. (http://www.ilo.org/public/english/protction/safework/cis/products/icsc/dtasht/index.htm から引用)	p.2
13 PhysProp	0.00017 mmHg	0.022665	1.61E-02	25 °C					experimental result		2B	×	×		DAUBERT, TE & DANNER, RP (1987)	Vapor Pressure
14 REACH登録情報	0.017±0.002 Pa [Uncertainty of ±0.002] [The vapour pressure of the test material, obtained by extrapolation, is 0.017 Pa at 25°C.]	0.017	1.21E-02	25 °C	EU Method A.4	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	外挿 (補外)		4C	×	×		study report, 2000, 2000-05-30	(JS Member) Calc Key Vapour pressure.002
15 REACH登録情報	0.017±0.002 Pa [Uncertainty of ±0.002] [The vapour pressure of the test material, obtained by extrapolation, is 0.017 Pa at 25°C.]	0.017	1.21E-02	25 °C	EU Method A.4	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	外挿 (補外)		4C	×	×		study report, 2000, 2000-05-30	Calc Key Vapour pressure.001
16 SIDS	0.017 Pa	0.017	1.21E-02	25 °C	その他, effusion method	-	-	key study	experimental result	This value is derived from an experiment using the effusion method.	2A	○	○	-	I.I.I. (2000): Determination of physical properties of 2,4-TDA. International Isocyanate Institute Inc., Manchester, III Project 146, part 2 from June, 2000.	p.12-13

基本情報

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2,4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1,3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価 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 CCD	[Soluble]	単位換算不可								-		3	x	x			
2 CRC	[very soluble]	単位換算不可								-		3	x	x			Physical Constants of Organic Compounds
3 HSDB	3.18E+4 mg/L	31800	29685.5047	25 °C						estimated by calculation		4C	x	x		US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Jan, 2011. Available from, as of Nov 9, 2012: <a href="http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episutedl.htm">http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episutedl.htm</a>	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
4 HSDB	[Very soluble in water]	単位換算不可								-		3	x	x		Haynes, W.M. (ed.) CRC Handbook of Chemistry and Physics. 91st ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 2010-2011, p. 3-486	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
5 HSDB	[Soluble in water]	単位換算不可								-		3	x	x		Lewis, R.J. Sr.; Hawley's Condensed Chemical Dictionary 15th Edition. John Wiley & Sons, Inc. New York, NY 2007., p. 1251	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
6 MOE初期評価	7.74 g/L	7740								-		4A	x	x		HSDB (1998): US National Library of Medicine	p.1
7 MOE初期評価	5.0E+04 mg/L	50000	46675.3219	25 °C						-		2B	x	x		European Chemicals Bureau (2000): IUCLID (International Uniform Chemical Information Data Base) Data Set.	p.1
8 MOE初期評価	3.5E+04 mg/L	35000	35000	20 °C						-		2B	x	x		European Chemicals Bureau (2000): IUCLID (International Uniform Chemical Information Data Base) Data Set.	p.1
9 MOE初期評価	3.78E+04 mg/L	37800	37800	20 °C						-		2B	x	x		European Chemicals Bureau (2000): IUCLID (International Uniform Chemical Information Data Base) Data Set.	p.1
10 MOE初期評価	4.07E+04 mg/L	40700	37993.712	25 °C						-		2B	x	x		European Chemicals Bureau (2000): IUCLID (International Uniform Chemical Information Data Base) Data Set.	p.1
11 NITE初期リスク評価書	74.8 g/L	74800	69826.2815	25 °C						estimated by calculation		4C	x	x		SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY. ( <a href="http://esc.syrres.com/interkow/physd emo.htm">http://esc.syrres.com/interkow/physd emo.htm</a> から引用)	p.2
12 NITE初期リスク評価書	[易溶]	単位換算不可								-		3	x	x		IPCS, International Programme on Chemical Safety (2000) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva. ( <a href="http://www.ilo.org/public/english/prot ection/safework/cis/products/icsc/dtas h/index.htm">http://www.ilo.org/public/english/prot ection/safework/cis/products/icsc/dtas h/index.htm</a> から引用)	p.2



PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価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
13 PhysProp	74820 mg/L	74820	69844.9517	25 °C						estimated by calculation		4C	×	×		MEYLAN,WM ET AL. (1996)	Water Solubility
14 REACH登録 情報	38 g/L	38000	35473.2446	25 °C	[No details of pH measur ent are included in the study report.]	EU Method A.6	yes (incl. certificat e)	1: reliable without restriction	key study	experimenta l result		1A	○	○		study report, 2000, 2000-05-30	(JS Member) Exp Key Water solubility.002
15 REACH登録 情報	38 g/L	38000	35473.2446	25 °C	[No details of pH measur ent are included in the study report.]	EU Method A.6	yes (incl. certificat e)	1: reliable without restriction	key study	experimenta l result		1A	○	○		study report, 2000, 2000-05-30	Exp Key Water solubility.001
16 SIDS	38 g/L	38000	35473.2446	25 °C		その他.flask method	-	-	key study	experimenta l result	This value is derived from an experiment using the flask method.	2A	×	×	-	I.I.I. (2000): Determination of physical properties of 2,4-TDA. International Isocyanate Institute Inc., Manchester, III Project 146, part 2 from June, 2000.	p.12-13
17 既存点検事業	[水に可溶]	単位換算不 可								-		3	×	×			

基本情報

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA_IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

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 EPI Suite	0.1563	0.1563			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2 HSDB	0.14	0.14							-		2B	×	×		Debneth AK et al; Environ Mol Mutagen 19(1): 37-52 (1992)	Chemical/Physical Properties: > Octanol/Water Partition Coefficient:
3 MOE初期評価	0.14	0.14							-		2B	×	×		分配係数計算プログラム°C Log P", アダムネット(株).	p.1
4 MOE初期評価	0.14	0.14		7.4					-		2B	×	×		Hansch, C., Leo, A., and Hoekman, D. (1995): Exploring QSAR Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants, Washington D.C., ACS Professional Reference Book: 33.	p.1
5 MOE初期評価	0.14	0.14							-		2B	×	×		Debnath, A.K. et al. (1992): A QSAR Investigation of the Role of Hydrophobicity in Regulating Mutagenicity in the Ames Test: 1. Mutagenicity of Aromatic and Heteroaromatic Amines in Salmonella typhimurium TA98 and TA100, Environmental and Molecular Mutagenesis, 19: 37-52.	p.1
6 NITE初期リスク評価書	0.14	0.14							experimental result		2B	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.	p.2
7 NITE初期リスク評価書	0.14	0.14							estimated by calculation		4C	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.	p.2
8 PhysProp	0.14	0.14							experimental result		2B	×	×		DEBNATH,AK ET AL. (1992)	Log P (octanol-water)
9 REACH登録情報	0.074	0.074	25 °C	7.36~7.61	EU Method A.8	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	○		study report, 2000, 2000-05-30	(JS Member) Exp Key Partition coefficient.002
10 REACH登録情報	0.074	0.074	25 °C	7.36~7.61	EU Method A.8	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	○		study report, 2000, 2000-05-30	Exp Key Partition coefficient.001
11 SIDS	0.074	0.074	25 °C		その他, shaking flask method	-	-	key study	experimental result	using the shaking flask method	2A	×	×		I.I.I. (2000): Determination of physical properties of 2,4-TDA. International Isocyanate Institute Inc., Manchester, Ill Project 146, part 2 from June, 2000.	p.12-13

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4 -ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

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
12 SIDS	0.34	0.34	20 °C		-	-	-	key study	estimated by calculation	-	4C	x	x	-	Leo Hansch.	p.12-13

基本情報

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA-IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

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 EPI Suite	Koc	9.106 L/kg	9.106			-	KOCWIN	-	-	key study	(Q)SAR	KOCWIN v2.00 February 2009	2C	×	×			-
2 HSDB	Koc	1331	1331		5	21% sand; 60% silt; 19% clay					experimental result		2B	×	×	Environmental Fate:では、 文献がMeylan WM et al; Environ Sci Technol 26: 1560-67 (1992)とされてい る	Cowen WF et al; Environ Sci Technol 32: 598-603 (1998)	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility;
3 HSDB	Koc	1346	1346		5.8	53% sand; 40% silt; 7% clay					experimental result		2B	×	×	Environmental Fate:では、 文献がMeylan WM et al; Environ Sci Technol 26: 1560-67 (1992)とされてい る	Cowen WF et al; Environ Sci Technol 32: 598-603 (1998)	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility;
4 HSDB	Koc	713	713		5	21% sand; 60% silt; 19% clay					experimental result		2B	×	×		Cowen WF et al; Environ Sci Technol 32: 598-603 (1998)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Fate:
5 HSDB	Koc	1054	1054		5.8	53% sand; 40% silt; 7% clay					experimental result		2B	×	×		Cowen WF et al; Environ Sci Technol 32: 598-603 (1998)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Fate:
6 MOE初期評価	Koc	120	120				KOCWIN				estimated by calculation		4C	×	×		U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWINTM v.1.66	p.2
7 NITE初期リス ク評価書	Koc	120	120								estimated by calculation		4C	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) PckocWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.	p.2
8 REACH登録情 報	Koc	[In the case of TDA, measured Kd or Koc values may be of little value as the sorption of TDA is dominated by an irreversible chemical reaction which is governed by chemical kinetics.]	9763				その他,Measuring the sorption in soils, under anaerobic conditions using 14C labeled 2,4- TDA.	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		3	×	×		study report, 2002, 2002-07-25	(JS Member) Exp Key Adsorption / desorption.004
9 REACH登録情 報	Koc	9763 L/kg[7 days Koc = 9763 l/kg]	9763				その他,Measuring the sorption and desorption in soils, under aerobic conditions, using 14C labeled 2,4- TDA.	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	○		study report, 1996, 1996-07-31	(JS Member) Exp Key Adsorption / desorption.005

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

↑  
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
10 REACH登録情報	Koc	4454 L/kg[7 days Koc = 4454 l/kg]	4454				その他, Measuring the sorption and desorption in soils, under anaerobic conditions, using 14C labeled 2,4-TDA.	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		study report, 1996, 1996-07-31	(JS Member) Exp Key Adsorption / desorption.006
11 REACH登録情報	Koc	4454 L/kg[7 days Koc = 4454 l/kg]	4454				その他, Measuring the sorption and desorption in soils, under anaerobic conditions, using 14C labeled 2,4-TDA.	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		study report, 1996, 1996-07-31	Exp Key Adsorption / desorption.001
12 REACH登録情報	Koc	9763 L/kg[7 days Koc = 9763 l/kg]	9763				その他, Measuring the sorption and desorption in soils, under aerobic conditions, using 14C labeled 2,4-TDA.	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	○		study report, 1996, 1996-07-31	Exp Key Adsorption / desorption.002
13 REACH登録情報	Koc	1339 L/kg[Under aerobic conditions, Koc values were determined to be 1339 l.kg-1 after 8 hours and 9763 l.kg-1 after 7 days.] after 8 hours]	1339				その他, Measuring the sorption in soils, under anaerobic conditions using 14C labeled 2,4-TDA.	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		study report, 2002, 2002-07-25	Exp Key Adsorption / desorption.003

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

▲ 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
14 REACH登録情報	Koc	9763 L/kg[Under aerobic conditions, Kocvalues were determined to be 1339 l.kg-1after 8 hours and 9763 l.kg-1after 7 days.]after 7 days]	9763				その他,Measuring the sorption in soils, under anaerobic conditions using 14C labeled 2,4-TDA.	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	○		study report, 2002, 2002-07-25	Exp Key Adsorption / desorption.003
15 REACH登録情報	Koc	884 L/kg[Under anaerobic conditions Kocvalues were found to be 884 l.kg-1and 4454 l.kg-1after 8 hours and 7 days respectively.]after 8 hours]	884				その他,Measuring the sorption in soils, under anaerobic conditions using 14C labeled 2,4-TDA.	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		study report, 2002, 2002-07-25	Exp Key Adsorption / desorption.003
16 REACH登録情報	Koc	4454 L/kg[Under anaerobic conditions Kocvalues were found to be 884 l.kg-1and 4454 l.kg-1after 8 hours and 7 days respectively.]after 7 days]	4454				その他,Measuring the sorption in soils, under anaerobic conditions using 14C labeled 2,4-TDA.	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		study report, 2002, 2002-07-25	Exp Key Adsorption / desorption.003
17 SIDS	Koc	9763 L/kg	9763			-	-	-	-	key study	experimental result	-	2A	○	○	-		p.28; p.202

基本情報

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA_IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m <sup>3</sup> /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価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 EPI Suite	5.19E-005 Pa・ m <sup>3</sup> /mol	0.0000519					その他, Experimental Data from PhysProp Database		2C	×	×			
2 EPI Suite	7.52E-005 Pa・ m <sup>3</sup> /mol	0.0000752					(Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	×	×			
3 HSDB	9.52E-10 atm・ m <sup>3</sup> /mol	9.64614E-05					estimated by calculation		4C	×	×		US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Jan, 2011. Available from, as of Nov 9, 2012: <a href="http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedi.htm">http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedi.htm</a>	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
4 NITE初期リスク評価書	8.02E-05 Pa・ m <sup>3</sup> /mol[8.02×10 <sup>-5</sup> Pa・m <sup>3</sup> /mol (7.92× 10 <sup>-10</sup> atm・m <sup>3</sup> /mol)]	0.0000802					estimated by calculation		4C	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY. ( <a href="http://esc.syrres.com./interkow/p_hysdemo.htm">http://esc.syrres.com./interkow/p_hysdemo.htm</a> から引用)	p.2
5 PhysProp	0.000000000792 atm・m <sup>3</sup> /mol	8.02494E-05					estimated by calculation		4C	×	×		MEYLAN, WM & HOWARD, PH (1991)	Henry's Law Constant
6 SIDS	0.0000546 Pa・	0.0000546			-	key study	-		2A	○	○	-		p.12

基本情報

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c1)N)C

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 HSDB		1	1 mg/L		BCF	-	1.9~3.3	2.6	化審法TG				experimental result		1B	×	×		Chemicals Inspection and Testing Institute: Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4-89074-101-1 (1992)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Bioconcentration:
2 MOE初期評価		2	0.03 mg/L	6週	BCF	-	<50	50					experimental result		2B	×	○		独立行政法人製品評価技術基盤機構: 既存化学物質安全性点検データ. (http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html, 2005.10.21 現在).	p.2
3 MOE初期評価		1	0.3 mg/L	6週	BCF	-	<5	5					experimental result		2B	×	×		独立行政法人製品評価技術基盤機構: 既存化学物質安全性点検データ. (http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html, 2005.10.21 現在).	p.2
4 NITE初期リスク評価書	低濃縮性	2	0.03 mg/L		その他		<50	50	化審法TG				experimental result		1B	×	○		通商産業省 (1977) 通商産業公報 (1977年12月1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
5 NITE初期リスク評価書	低濃縮性	1	0.3 mg/L		その他		<5	5	化審法TG				experimental result		1B	×	×		通商産業省 (1977) 通商産業公報 (1977年12月1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 REACH登録情報		2	0.03 ppm		BCF		<50	50	OECD TG 305C	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1B	×	○		publication, 1992	Exp Key Bioaccumulation: aquatic / sediment_002
7 REACH登録情報		1	0.3 ppm		BCF		<5	5	OECD TG 305C	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1B	×	×		publication, 1992	Exp Key Bioaccumulation: aquatic / sediment_002
8 SIDS		1	0.03 mg/L		BCF		<50 L/kg	50				key study	experimental result		2B	×	○		CITI (1992): Biodegradation and bioaccumulation data on existing chemicals based on the CSCL Japan	p.30-31
9 SIDS		1	0.3 mg/L		BCF		<5 L/kg	5				key study	experimental result		2B	×	×		CITI (1992): Biodegradation and bioaccumulation data on existing chemicals based on the CSCL Japan	p.30-31
10 既存点検事業		2	0.03 ppm	2週	Rawデータ	-	<=50	50	化審法TG				experimental result		1A	×	○			
11 既存点検事業		2	0.03 ppm	2週	Rawデータ	-	<=50	50	化審法TG				experimental result		1A	×	○			
12 既存点検事業		2	0.03 ppm	3週	Rawデータ	-	<=50	50	化審法TG				experimental result		1A	○	○			
13 既存点検事業		2	0.03 ppm	3週	Rawデータ	-	<=50	50	化審法TG				experimental result		1A	○	○			
14 既存点検事業		2	0.03 ppm	4週	Rawデータ	-	<=50	50	化審法TG				experimental result		1A	○	○			
15 既存点検事業		2	0.03 ppm	4週	Rawデータ	-	<=50	50	化審法TG				experimental result		1A	○	○			
16 既存点検事業		2	0.03 ppm	6週	Rawデータ	-	<=50	50	化審法TG				experimental result		1A	○	○			
17 既存点検事業		2	0.03 ppm	6週	Rawデータ	-	<=50	50	化審法TG				experimental result		1A	○	○			





基本情報

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 HSDB	pKa	5.35	算出不可			SPARC				estimated by calculation		×		SPARC; pKa/property server. Ver 4.5., Sept. 2009. Available from, as of Nov 8, 2012: <a href="http://archemcalc.com/sparc/">http://archemcalc.com/sparc/</a>	Environmental Fate:
2 REACH登録情報	pKa	5.1±0.1[the titration method]pKa #1]	算出不可			OECD TG 112	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		○	The titrimetric method is the preferred method and is regarded as more accurate where two end-points are less than 3 units apart. The titrimetric results are therefore regarded as definitive, but the spectrophotometric results provide corroboration, particularly for the second pKa.	study report, 2000, 2000-05-30	(JS Member) Exp Key Dissociation constant.002
3	pKa	2.7±0.2[the titration method]pKa #2]	算出不可			OECD TG 112	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		○	The titrimetric method is the preferred method and is regarded as more accurate where two end-points are less than 3 units apart. The titrimetric results are therefore regarded as definitive, but the spectrophotometric results provide corroboration, particularly for the second pKa.	study report, 2000, 2000-05-30	(JS Member) Exp Key Dissociation constant.002
4	pKa	5.4[spectrophotometry]	算出不可			OECD TG 112	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		○	The titrimetric method is the preferred method and is regarded as more accurate where two end-points are less than 3 units apart. The titrimetric results are therefore regarded as definitive, but the spectrophotometric results provide corroboration, particularly for the second pKa.	study report, 2000, 2000-05-30	(JS Member) Exp Key Dissociation constant.002

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
5	pKa	2.7[spectrophotometry]	算出不可			OECD TG 112	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		○	The titrimetric method is the preferred method and is regarded as more accurate where two endpoints are less than 3 units apart. The titrimetric results are therefore regarded as definitive, but the spectrophotometric results provide corroboration, particularly for the second pKa.	study report, 2000, 2000-05-30	(JS Member) Exp Key Dissociation constant.002
6	pKa	5.1±0.1[the titration method]pKa #1]	算出不可			OECD TG 112	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		○	The titrimetric method is the preferred method and is regarded as more accurate where two endpoints are less than 3 units apart. The titrimetric results are therefore regarded as definitive, but the spectrophotometric results provide corroboration, particularly for the second pKa.	study report, 2000, 2000-05-30	Exp Key Dissociation constant.001
7	pKa	2.7±0.2[the titration method]pKa #2]	算出不可			OECD TG 112	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		○	The titrimetric method is the preferred method and is regarded as more accurate where two endpoints are less than 3 units apart. The titrimetric results are therefore regarded as definitive, but the spectrophotometric results provide corroboration, particularly for the second pKa.	study report, 2000, 2000-05-30	Exp Key Dissociation constant.001

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
8	pKa	5.4[spectrophotometry]	算出不可			OECD TG 112	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		○	The titrimetric method is the preferred method and is regarded as more accurate where two end-points are less than 3 units apart. The titrimetric results are therefore regarded as definitive, but the spectrophotometric results provide corroboration, particularly for the second pKa.	study report, 2000, 2000-05-30	Exp Key Dissociation constant.001
9	pKa	2.7[spectrophotometry]	算出不可			OECD TG 112	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		○	The titrimetric method is the preferred method and is regarded as more accurate where two end-points are less than 3 units apart. The titrimetric results are therefore regarded as definitive, but the spectrophotometric results provide corroboration, particularly for the second pKa.	study report, 2000, 2000-05-30	Exp Key Dissociation constant.001
10	SPARC pKa	2.19	算出不可		7	SPARC	-	-	key study	(Q)SAR	SPARC v4.6 October 2011 release w4.6.1691- s4.6.1687	×	-		-
11	pKa	5.43	算出不可		7	SPARC	-	-	key study	(Q)SAR	SPARC v4.6 October 2011 release w4.6.1691- s4.6.1687	×	-		-
12	pKa	2.19~5.43	算出不可			SPARC				(Q)SAR	SPARC	×			

基本情報

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-90-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(cc1)N)C

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	pH	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該当	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該当(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等	
1 EHC	水域	生分解					45 %[observed total organic carbon removal was 45% in 4 h]				その他, bench-scale treatability study for 2,4-DAT using acclimated sludge					experimental result			x		MATSUI, S., MURAKAMI, T., SASAKI, T., HIROSE, Y., & IGUMA, Y. (1975) Activated sludge degradability of organic substances in the wastewater of the Kashima petroleum and petrochemical industrial complex in Japan. Prog. Water Technol., 7:645-659.	3.4. Release into the Environment, Distribution, and Transformation
2 EPI Suite	大気	OHラジカルとの反応		200.1360E-12 cm <sup>3</sup> /mole*sec				8.02E-02	25 °C		AOPWIN					(Q)SAR			x			
3 EPI Suite	水域	生分解									BIOWIN	Weeks-Months				(Q)SAR	Biowin3 Ultimate Biodegradation		x			
4 Howard Deg	土壌	総括分解				4320 時間					その他, Scientific judgement based upon estimated unacclimated aqueous aerobic biodegradation half-life.					-			x			p.302
5 Howard Deg	土壌	総括分解				672 時間					その他, Scientific judgement based upon estimated unacclimated aqueous aerobic biodegradation half-life.					-			x			p.302
6 Howard Deg	大気	総括分解				2.7 時間					その他, Based upon estimated photooxidation half-life in air.					-			x			p.302
7 Howard Deg	大気	総括分解				0.27 時間					その他, Based upon estimated photooxidation half-life in air.					-			x			p.302
8 Howard Deg	水域	総括分解				1740 時間					その他, Based upon estimated photooxidation half-life in water.					-			x			p.302
9 Howard Deg	水域	総括分解				31 時間					その他, Based upon estimated photooxidation half-life in water.					-			x			p.302

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(cc1)N)C

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温 度	pH	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの該 非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (群番Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
10 Howard Deg	水域	生分解 (好 氣的)				4320 時間					その他,Scientific judgement based upon unacclimated aerobic aqueous screening test data which confirmed resistance to biodegradation (Sasaki, S (1978)).					-		x		Sasaki, S. The scientific aspects of the chemical substance control law in Japan. In: Aquatic Pollutants: Transformation and Biological Effects. Hutzinger, O. et. al., eds. Pergamon Press, Oxford, UK. pp. 283-98. 1978.	p.302
11 Howard Deg	水域	生分解 (好 氣的)				672 時間					その他,Scientific judgement based upon unacclimated aerobic aqueous screening test data which confirmed resistance to biodegradation (Sasaki, S (1978)).					-		x		Sasaki, S. The scientific aspects of the chemical substance control law in Japan. In: Aquatic Pollutants: Transformation and Biological Effects. Hutzinger, O. et. al., eds. Pergamon Press, Oxford, UK. pp. 283-98. 1978.	p.302
12 Howard Deg	水域	生分解 (嫌 氣的)				17280 時間					その他,Scientific judgement based upon estimated unacclimated aqueous aerobic biodegradation half-life.					-		x			p.302
13 Howard Deg	水域	生分解 (嫌 氣的)				2688 時間					その他,Scientific judgement based upon estimated unacclimated aqueous aerobic biodegradation half-life.					-		x			p.302

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2,4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1,3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	pH	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(群備Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等	
14 Howard Deg	水域	光分解				1740 時間					その他,Scientific judgement based upon estimated half-life for reaction of aromatic amines with hydroxyl radicals in water (Mill, T (1989), Guesten, H et al. (1981)). It is assumed that 2,4-iaminoluene reacts twice as fast as aniline.					-			x		Mill, T. Structure-activity relationships for photooxidation processes in the environment. Environ. Toxicol. Chem. 8: 31-43. 1989. Guesten, H., Filby, W.G., and Schoop, S. Prediction of hydroxyl radical reaction rates with organic compounds in the gas phase. Atmos. Environ. 15: 1763-5. 1981.	p.303
15 Howard Deg	水域	光分解				31 時間					その他,Scientific judgement based upon estimated half-life for reaction of aromatic amines with hydroxyl radicals in water (Mill, T (1989), Guesten, H et al. (1981)). It is assumed that 2,4-iaminoluene reacts twice as fast as aniline.					-			x		Mill, T. Structure-activity relationships for photooxidation processes in the environment. Environ. Toxicol. Chem. 8: 31-43. 1989. Guesten, H., Filby, W.G., and Schoop, S. Prediction of hydroxyl radical reaction rates with organic compounds in the gas phase. Atmos. Environ. 15: 1763-5. 1981.	p.303
16 Howard Deg	大気	OHラジカルとの反応			300000 molecule/cm <sup>3</sup>	2.7 時間					その他,Based upon estimated rate constant for reaction with hydroxyl radicals in air (Atkinson, R (1987A)).					-			x		Atkinson R Aschmann S M. Winer A.M., and Pitts, J.N., Jr. Kinetics of the gas-P12186 r e 11ClO <sub>2</sub> S Of NO <sub>3</sub> radicals with a series of dialkenes, cycloalkenes, and monoterpenes at 295 K. Environ. Sci. Technol. 18: 370-5. 1984A.	p.303

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ-該非 (群備Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
17 Howard Deg	大気	OHラジカルとの反応			3000000 molecule/cm <sup>3</sup>	0.27 時間					その他, Based upon estimated rate constant for reaction with hydroxyl radicals in air (Atkinson, R (1987A)).					-		x		Atkinson R Aschmann S M, Winer A.M., and Pitts, J.N., Jr. Kinetics of the gas-P112186 f € 11Cl0n\$ Of NO3 radicals with a series of dialkenes, cycloalkenes, and monoterpenes at 295 K. Environ. Sci. Technol. 18: 370-5. 1984A.	p.303
18 Howard Deg	水域	加水分解														-		x			p.303
19 Howard FATE	大気	OHラジカルとの反応				7.99 日					記載なし					estimated by calculation		x		GEMS; Graphical Exposure Modeling System. Fate of atmospheric pollutants (FAP) data base. Office of Toxic Substances USEPA (1985)	I p.501、502
20 Howard FATE	水域	光分解					45 %[TOC]after 4-hr exposure to activated sludge in a fill and draw apparatus]									experimental result		x		Matsui S et al; Prog Water Technol 7: 645-59 (1975)	I p.501
21 HSDB	水域	生分解 (好氣的)					0 %[theoretical BOD in 2 weeks using an activated sludge inoculum at 30 mg/L]				化審法TG					experimental result		x		Chemicals Inspection and Testing Institute; Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4-89074-101-1 (1992)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
22 HSDB	水域	生分解 (好氣的)					45 %[in the theoretical organic carbon of toluene-2,4-diamine after 4 hr exposure to activated sludge in a fill and draw apparatus]									estimated by calculation	activated sludge in a fill and draw apparatus	x		Matsui S et al; Prog Water Technol 7: 645-59 (1975)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
23 HSDB	水域	生分解 (好氣的)														experimental result		x		Freedman DL et al; J Hazard Mater 49: 1-14 (1996)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
24 HSDB	水域	加水分解														-		x		Lyman W J et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Washington, DC: Amer Chem Soc pp. 7-4, 7-5 (1990)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:



PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	pH	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの該 非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
25 HSDB	大気	直接光分解														-		×		SRC	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:
26 HSDB	大気	OHラジカルとの反応		1.92E-10 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec				8.36E-02	25 °C							-		○		Atkinson R; J Phys Chem Ref Data Monograph 1 (1989)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:
27 HSDB	大気	OHラジカルとの反応		1.9E-10 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec				8.44E-02	25 °C							estimated by calculation		○		US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.1. Jan. 2011. Available from, as of Nov 9, 2012: <a href="http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/epsuite/di.htm">http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/epsuite/di.htm</a>	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
28 MOE初期評価	水域	生分解 (好氣的)					0 % [BOD]									experiment al result		×		独立行政法人製品評価技術基盤機構: 既存化学物質安全性点検データ, ( <a href="http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html">http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html</a> , 2005.10.21 現在).	p.1
29 MOE初期評価	水域	生分解 (好氣的)					3.0 % [TOC]									experiment al result		×		独立行政法人製品評価技術基盤機構: 既存化学物質安全性点検データ, ( <a href="http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html">http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html</a> , 2005.10.21 現在).	p.1
30 MOE初期評価	水域	生分解 (好氣的)					7.9 % [GC]									experiment al result		×		独立行政法人製品評価技術基盤機構: 既存化学物質安全性点検データ, ( <a href="http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html">http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html</a> , 2005.10.21 現在).	p.1
31 MOE初期評価	大気	OHラジカルとの反応		192E-12 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec	3E+05~ 3E+06 molecule/cm ^3	0.33~3.3 時 間		2.53E-02	25 °C							experiment al result		○		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: 126. (反応速度定数) Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., and Michalenko, E.M. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: xiv. (OHラジカル濃度)	p.1
32 MOE初期評価	水域	加水分解														-		×		Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., and Michalenko, E.M. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington DC, Lewis Publishers: 302-303.	p.2
33 MOE初期評価	水域	生分解 (好氣的)														-		×		通産省公報 (1977.11.30)	p.1

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(cc1)N)C

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	pH	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(評備II)	備考	文献	ページ番号等
34 NIST	大気	OHラジカルとの反応		1.91E-10±6.97E-11 cm <sup>3</sup> /mole·sec[Reference reaction: Cyclohexene + OH → Products][Pressure: 1.01 bar][Bath gas: N <sub>2</sub> ]				0.084005621	298 K		その他.Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result		○		The reactions of OH radicals with toluene diisocyanate, toluenediamine and methylenedianiline under simulated atmospheric conditions, Becker, K.H.; Bastian, V.; Klein, T. J. Photochem. Photobiol. A 45, 195 (1988).	1,3-Benzenediamine, 4-methyl- + OH → Products
35 NITE初期リスク評価書	大気	OHラジカルとの反応		1.9E-10 cm <sup>3</sup> /mole·sec	5E+05~1E+06 molecule/cm <sup>3</sup>	1~2 時間		5.63E-02	25 °C							experimental result		○		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) AopWin Estimation Software, ver. 1.90, North Syracuse, NY.	p.4
36 NITE初期リスク評価書	大気	直接光分解														-		×		U.S. NLM, U.S. National Library of Medicine (2002) HSDB, Hazardous Substances Data Bank. ( <a href="http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB">http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB</a> から引用)	p.4
37 NITE初期リスク評価書	水域	光分解														-		×		U.S. NLM, U.S. National Library of Medicine (2002) HSDB, Hazardous Substances Data Bank. ( <a href="http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB">http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB</a> から引用)	p.4
38 NITE初期リスク評価書	水域	加水分解														-		×		Lyman, W. J. et al. (1982) Handbook of Chemical Property Estimation Methods NY, McGraw-Hill, New York, pp. 2-14, 7-4, 5, 14-13. (U.S. NLM: HSDB, 2002 から引用)	p.4
39 NITE初期リスク評価書	水域	生分解 (好氣的)					0 % [生物化学的酸素消費量(BOD)測定]				化審法TG					experimental result		×		通商産業省(1977)通商産業公報(1977年12月1日), 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報. ( <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用)	p.4-5
40 NITE初期リスク評価書	水域	生分解 (好氣的)					3.0 % [全有機炭素(TOC)測定]				化審法TG					experimental result		×		通商産業省(1977)通商産業公報(1977年12月1日), 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報. ( <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用)	p.4-5
41 NITE初期リスク評価書	水域	生分解 (好氣的)					7.9 % [ガスクロマトグラフ(GC)測定]				化審法TG					experimental result		×		通商産業省(1977)通商産業公報(1977年12月1日), 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報. ( <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用)	p.4-5
42 NITE初期リスク評価書	水域	生分解					≥50 % [アニンリン及び2,4-トルエンジアミンを用いて活性汚泥を220日間馴化(5時間後)]				記載なし					experimental result		×		Sato, H. (1987) Analysis of products in the biodegradation process of MDA and TDA, Complete Report to the International Isocyanate Institute. (GDCh BUA, 1998 から引用)	p.5

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(cc1)Nc

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	情報源におけるケーススタディの有無	値の種類	値の種類の詳細	ケーススタディ該当 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
43 NITE初期リスク評価書	水域	生分解									その他、産業用及び公共用下水処理排水を用いた易生分解性試験である修正OECDスクリーニング試験					experimental result		×		Bayer (1981) Interne Untersuchungen der Bayer AG zum Einsatz von 2,4-Toluyldiamin in einem modifizierten OECD-Screening Test mit Belebtschlamm aus kommunalen-industriellen Klaranlagen. (GDCh BUA, 1998 から引用)	p.5
44 NITE初期リスク評価書	水域	生分解					45 % [TOC測定による分解率(4時間)]				その他、モデル下水処理プラントでの実験					experimental result		×		Matsui, S., Murakami, T., Sasaki, T., Hirose, Y. and Iguma, Y. (1975) Activated sludge degradability of organic substances in the waste water of the Kashima petroleum and petrochemical industrial complex in Japan. Progr. Water Tech. 7, 645-659.	p.5
45 PhysProp	大気	OHラジカルとの反応		0.00000000192 cm <sup>3</sup> /molec/ule/sec				8.36E-02	25 °C							experimental result		○		ATKINSON, R (1989)	Atmospheric OH Rate Constant
46 REACH登録情報	水域	生分解 (嫌氣的)				203 時間 [50% degradation in 203 hour that is t1/2 = 203 hour, based on determination of 1st order rate constant.]	50 % [203 h]		35±1 °C	6.9	記載なし		no	3: not reliable		experimental result		×		publication, 2001	Exp Disregarded Biodegradation in water: screening tests.001
47 REACH登録情報	大気	OHラジカルとの反応		0.0000000019 cm <sup>3</sup> /molec/ule/sec [Rate constant (for indirect photolysis): = 0.0000000019 cm <sup>3</sup> /(molecule*s ec)]	100000000 molecule/cm <sup>3</sup> [Sensitise r concentration: up to 100000000 molecule/cm <sup>3</sup> ]	1 時間		4.22E-04	25 °C		記載なし		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		○		Becker KH, Bastian V & Klein T, 1988. The reactions of OH radicals with TDI, TDA and MDA under simulated atmospheric conditions. J.Photochem.Photobiol. A 45: 195-205	Exp Key Phototransformation in air.001
48 REACH登録情報	水域	光分解				≥1 年 [Environmental direct photolysis half-life = >1 year]					記載なし		yes	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		×		study report, 1997, 1997-04-06	Exp Key Phototransformation in water.001
49 REACH登録情報	水域	生分解 (好氣的)				128 時間 [50% degradation in 128 hours that is t1/2 = ca. 128 hours, based on determination of 1st order rate constant.]	50 % [128 h]		35±1 °C	6.9	記載なし		no	3: not reliable		experimental result		×		publication, 2001	Exp Disregarded Biodegradation in water: screening tests.002

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの該 非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (群備Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
50 REACH登録 情報	水域	生分解 (好 氣的)					4 %[Radioche m. meas.4% biodegradatio n after exposure of 28 days]		22±2 °C		OECD TG 301B		yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experiment al result		x		study report, 2009, 2009-08-23	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.003
51 REACH登録 情報	水域	生分解 (好 氣的)					7±0.57 %[7% biodegradatio n (standard deviation +/- 0.57%) after exposure 63 days.]		22±2 °C		OECD TG 301B		yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experiment al result		x		study report, 2009, 2009-08-23	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.003
52 REACH登録 情報	水域	生分解 (好 氣的)					0 %[DOC removal]28 d]		22±2 °C		OECD TG 301E		no	2: reliable with restrictions	key study	experiment al result		x		study report, 2005, 2005-05-30	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.004
53 REACH登録 情報	水域	生分解					0 %[BOD]28 d]		25±1 °C		OECD TG 301F		no data	2: reliable with restrictions	key study	experiment al result		x		study report, 1994, 1994-06-29	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.005
54 REACH登録 情報	水域	生分解					2 %[DOC removal]28 d]				OECD TG 301F		no data	2: reliable with restrictions	key study	experiment al result		x		study report, 1994, 1994-06-29	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.005
55 REACH登録 情報	水域	生分解					1.4 %[residue analysis]28 d]				OECD TG 301F		no data	2: reliable with restrictions	key study	experiment al result		x		study report, 1994, 1994-06-29	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.005
56 REACH登録 情報	水域	生分解 (好 氣的)					100 %[DOC removal]6 d]				OECD TG 302B		no	2: reliable with restrictions	key study	experiment al result		x		study report, 1993, 1993-02-15	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.006
57 REACH登録 情報	水域	生分解 (好 氣的)					34 %[COD removal]4 h]		25 °C		記載なし		no	2: reliable with restrictions	supporting study	experiment al result		x		Matsui S, Murakami T, Sasaki T, Hirose Y & Iguma Y, 1975, Activated sludge degradability of organic substances in the waste water of the Kashima petroleum and petrochemical industrial complex in Japan, Progress in Water Technol. 7 (3/4): 645-59	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.007
58 REACH登録 情報	水域	生分解 (好 氣的)					24 %[TOC removal]2 h]		25 °C		記載なし		no	2: reliable with restrictions	supporting study	experiment al result		x		Matsui S, Murakami T, Sasaki T, Hirose Y & Iguma Y, 1975, Activated sludge degradability of organic substances in the waste water of the Kashima petroleum and petrochemical industrial complex in Japan, Progress in Water Technol. 7 (3/4): 645-59	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.007
59 REACH登録 情報	水域	生分解 (好 氣的)					45 %[TOC removal]4 h]		25 °C		記載なし		no	2: reliable with restrictions	supporting study	experiment al result		x		Matsui S, Murakami T, Sasaki T, Hirose Y & Iguma Y, 1975, Activated sludge degradability of organic substances in the waste water of the Kashima petroleum and petrochemical industrial complex in Japan, Progress in Water Technol. 7 (3/4): 645-59	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.007

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該非(群備II)	備考	文献	ページ番号等
60 REACH登録情報	水域	生分解(好氣的)					100 %[After 26 days of incubation at 35°C, 2,4-TDA (at both 50 and 100 mg/l) was degraded to 100%.]		35 °C		記載なし		no	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		x		Internal memo, 1987	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.008
61 REACH登録情報	水域	生分解(好氣的)					0 %[BOD]2 wk]		25±2 °C		OECD TG 301C		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		x		publication, 1992	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.009
62 REACH登録情報	水域	生分解(好氣的)					3 %[TOC removal]2 wk]				OECD TG 301C		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		x		publication, 1992	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.009
63 REACH登録情報	水域	生分解(好氣的)					7.9 %[GC]2 wk]		25±2 °C		OECD TG 301C		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		x		publication, 1992	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.009
64 REACH登録情報	水域	生分解(好氣的)	1.2E-2[1/時間]first order rate constant k=1.2*10(-2)per hour.]								記載なし			2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		x		publication, 1995	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.011
65 REACH登録情報	土壌	生分解(嫌氣的)					0 %[Radiochem. meas.]73 d]		30 °C		記載なし		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		x		study report, 1996, 1996-07-31	Exp Key Biodegradation in soil.001
66 REACH登録情報	土壌	生分解(好氣的)					14.8 %[Radiochem. meas.]56 d]		25 °C		記載なし		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		○		study report, 1996, 1996-07-31	Exp Key Biodegradation in soil.002
67 REACH登録情報	土壌	生分解(嫌氣的)					1.3 %[Radiochem. meas.]364 d[Soil No.#1]				記載なし		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		x		study report, 2002, 2002-07-25	Exp Key Biodegradation in soil.003
68 REACH登録情報	土壌	生分解(嫌氣的)					1 %[Radiochem. meas.]364 d[Soil No.#2]				記載なし		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		x		study report, 2002, 2002-07-25	Exp Key Biodegradation in soil.003
69 REACH登録情報	大気	OHラジカルとの反応		0.0000000019 cm^3/molec/sec[Rate constant (for indirect photolysis): = 0.0000000019 cm^3/(molecule*s ec)]	100000000 molecule/cm^3[Sensitizer concentration: up to 100000000 molecule/cm^3]	1 時間		4.22E-04	25 °C		記載なし		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		○		Becker KH, Bastian V & Klein T., 1988, The reactions of OH radicals with TDI, TDA and MDA under simulated atmospheric conditions, J.Photochem.Photobiol. A 45: 195-205	(JS Member) Exp Key Phototransformation in air.002

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(cc1)N)C

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	pH	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該否	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該否(群備Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
70 REACH登録情報	水域	光分解				≥1年 [Environmental direct photolysis half-life = >1 year]					記載なし		yes	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		×		study report, 1997, 1997-04-06	(JS Member) Exp Key Phototransformation in water.002
71 REACH登録情報	水域	光分解				493分			22 °C		記載なし		no	3: not reliable		experimental result		×		Ekiçi P, Angerhofer D & Parlir H, 2001, Photoinduced reactions of selected azo dye metabolites in water, Fres.Environ.Bull. 10 (3): 245-56	(JS Member) Exp NS Phototransformation in water.004
72 REACH登録情報	水域	光分解				80.4分			22 °C		記載なし		no	3: not reliable		experimental result		×		Ekiçi P, Angerhofer D & Parlir H, 2001, Photoinduced reactions of selected azo dye metabolites in water, Fres.Environ.Bull. 10 (3): 245-56	(JS Member) Exp NS Phototransformation in water.005
73 SIDS	水域	生分解(好氣的)					0 %[BOD]				OECD TG 301F					experimental result		×		Yakabe Y. (1995): The study of the environmental fate of TDA, MDA and oligoureas of TDI and MDI: Biodegradability test of 2,4-diaminotoluene and 4,4'-diaminodiphenylmethane. III report 11170, project number 105-FE-ENV, part III	p.24
74 SIDS	水域	生分解(好氣的)					2 %[DOC]				OECD TG 301F					experimental result		×		Yakabe Y. (1995): The study of the environmental fate of TDA, MDA and oligoureas of TDI and MDI: Biodegradability test of 2,4-diaminotoluene and 4,4'-diaminodiphenylmethane. III report 11170, project number 105-FE-ENV, part III	p.24
75 SIDS	水域	生分解(好氣的)					1.4 %[residual amount]				OECD TG 301F					experimental result		×		Yakabe Y. (1995): The study of the environmental fate of TDA, MDA and oligoureas of TDI and MDI: Biodegradability test of 2,4-diaminotoluene and 4,4'-diaminodiphenylmethane. III report 11170, project number 105-FE-ENV, part III	p.24
76 SIDS	土壌	生分解					1.9 %[after 3 days]				その他.using 14 C labeled TDA					experimental result		○		Cowen W.F. et al. (1996): Sorption and microbial degradation of Toluenediamines and Methylendianiline in soil under aerobic and anaerobic conditions. III report 11230, Project number 116-AM-ENV.	p.26
77 SIDS	土壌	生分解					4 %[after 7 days]				その他.using 14 C labeled TDA					experimental result		○		Cowen W.F. et al. (1996): Sorption and microbial degradation of Toluenediamines and Methylendianiline in soil under aerobic and anaerobic conditions. III report 11230, Project number 116-AM-ENV.	p.26
78 SIDS	土壌	生分解					7.9 %[after 14 days]				その他.using 14 C labeled TDA					experimental result		○		Cowen W.F. et al. (1996): Sorption and microbial degradation of Toluenediamines and Methylendianiline in soil under aerobic and anaerobic conditions. III report 11230, Project number 116-AM-ENV.	p.26
79 SIDS	土壌	生分解					10.8 %[after 28 days]				その他.using 14 C labeled TDA					experimental result		○		Cowen W.F. et al. (1996): Sorption and microbial degradation of Toluenediamines and Methylendianiline in soil under aerobic and anaerobic conditions. III report 11230, Project number 116-AM-ENV.	p.26

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(cc1)N)C

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	pH	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの該 非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (群備Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
80	SIDS	土壌	生分解				14.8 % [after 56 days]				その他, using 14 C labeled TDA					experimental result		O		Cowen W.F. et al. (1996): Sorption and microbial degradation of Toluenediamines and Methylenedianiline in soil under aerobic and anaerobic conditions, III report 11230, Project number 116-AM-ENV.	p.26
81	SIDS	大気	OHラジカルとの反応		5E5 molecule/cm <sup>3</sup>	2時間									key study	estimated by calculation		x		Becker K.H. et al. (1988): The reactions of OH radicals with toluene diisocyanate, toluenediamine and methylenedianiline under simulated atmospheric conditions. J. Photochem. Photobiol. 45, 195-205	p.27
82	SIDS	水域	生分解 (好氣的)				51 % [theoretical CO <sub>2</sub> yield over 36 days]				OECD TG 301B				key study	experimental result		x		Kim M-N et al. (2002): Toxicity and biodegradation of diamines. J. Environ. Sci. Health Vol. B37: 53-64	p.24
83	SIDS	水域	生分解 (好氣的)				4 % [after 28 days]				OECD TG 301B				key study	experimental result		x		Caspers et al. (1986): Ecotoxicity of TDI, MDI, TDA, MDA. Report to the Ili by Bayer AG, Leverkusen. Project E-CE-41	p.24
84	SIDS	水域	生分解 (好氣的)				100 % [after 6 days] [DOC elimination]				その他 Zahn-Wellens-Test				key study	experimental result		x		BASF (1993): Zahn-Wellens-Test on 2,4- and 2,6-TDA (1993), unpublished report	p.24
85	SIDS	水域	生分解 (好氣的)				93 % [COD]				その他 Zahn-Wellens-Test				key study	experimental result		x		BASF (1993): Zahn-Wellens-Test on 2,4- and 2,6-TDA (1993), unpublished report	p.24
86	SIDS	水域	生分解 (好氣的)				100 % [After 26 days of incubation at 35 °C, 2,4-TDA in both concentrations was degraded to 100 %.]		35 °C		その他, With an electrolytic respirometer					experimental result		x		Snyder (Air Products and Chemicals Inc.), (1987): Internal Memorandum to P.J. Usinowicz	p.24
87	SIDS	水域	生分解 (好氣的)				34 % [After 4 hours COD fell by 34 % from 105 mg/l to 69 mg/l]				その他, With a fill-and draw type unit					experimental result		x		Matsui S. et al. (1975): Activated sludge degradability of organic substances in the waste water of the Kashima petroleum and petrochemical industrial complex in Japan. Progress in Water Technology, 7 (3/4), 645-659	p.24
88	SIDS	水域	生分解 (好氣的)				24 % [TOC decreased within 2 hours by 24 % from 58 mg/l to 44 mg/l]				その他, With a fill-and draw type unit					experimental result		x		Matsui S. et al. (1975): Activated sludge degradability of organic substances in the waste water of the Kashima petroleum and petrochemical industrial complex in Japan. Progress in Water Technology, 7 (3/4), 645-659	p.24
89	SIDS	水域	生分解 (好氣的)				45 % [within 4 hours by 45 % from 58 mg/l to 32 mg/l]				その他, With a fill-and draw type unit					experimental result		x		Matsui S. et al. (1975): Activated sludge degradability of organic substances in the waste water of the Kashima petroleum and petrochemical industrial complex in Japan. Progress in Water Technology, 7 (3/4), 645-659	p.24

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	pH	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該否	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該否(群備Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
90 SIDS	水域	光分解				28.6 日[in summer]marginal conditions: pure water from close to the surface, 10th degree of longitude, 50th degree of latitude, clear sky, typical ozone concentrations in the atmosphere]					その他 GC-SOLAR program				key study	estimated by calculation		x		Bayer (1997): Determination of the Quantum Yield and Assessment of the Environmental Half-life of the direct Photodegradation of 2,4-Diaminotoluene in Water, Report HPO-141 of 7.04.1997	p.25
91 SIDS	水域	光分解				>1 年[in winter]marginal conditions: pure water from close to the surface, 10th degree of longitude, 50th degree of latitude, clear sky, typical ozone concentrations in the atmosphere]					その他 GC-SOLAR program				key study	estimated by calculation		x		Bayer (1997): Determination of the Quantum Yield and Assessment of the Environmental Half-life of the direct Photodegradation of 2,4-Diaminotoluene in Water, Report HPO-141 of 7.04.1997	p.25
92 SIDS	水域	光分解				44 日[in June]marginal conditions: pure water from close to the surface, stagnant water, geographic and climatic conditions of 50th degree of latitude, no contribution of another mono- or bimolecular elimination process]					その他 Frank & Klopffer program					estimated by calculation		x			p.25



PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの該 非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
93 SIDS	水域	光分解				>1 年[in the winter months[marginal conditions: pure water from close to the surface, stagnant water, geographic and climatic conditions of 50th degree of latitude, no contribution of another mono- or bimolecular elimination process]]					その他, Frank & Klopffer program					estimated by calculation		x			p.25
94 既存点検事業	水域	生分解					0 % [酸素消費量による結果]				化審法TG					experimental result		O			
95 既存点検事業	水域	生分解					3.0 % [TOC計による結果]				化審法TG					experimental result		O			
96 既存点検事業	水域	生分解					7.9 % [GCによる結果]				化審法TG					experimental result		x			

参考情報

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2, 4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA_IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1, 3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

分解性

収集データ

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
1 NITE初期リスク評価書	not readily biodegradable	0%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result			通商産業省 (1977) 通商産業公報 (1977年12月1日), 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報 ( <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用).	P. 5
2 NITE初期リスク評価書	not readily biodegradable	3%	TOC removal		化審法TG	-	-	-	experimental result			通商産業省 (1977) 通商産業公報 (1977年12月1日), 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報 ( <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用).	P. 5
3 NITE初期リスク評価書	not readily biodegradable	7.90%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result			通商産業省 (1977) 通商産業公報 (1977年12月1日), 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報 ( <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用).	P. 5
4 SIDS	その他	0 % [no biodegradation of 2,4-TDA was observed]			OECD TG 301E	-	-	-					p.23
5 SIDS	その他	0 % [no biodegradation was found]			OECD TG 301E	-	-	-				Bayer (1981a): OECD Screening test with 2,4-TDA, unpublished report.	p.23-24
6 SIDS	その他	0 % [no biodegradation of 2,4- and 2,6-TDA was achieved]			その他, MITI (I) test	-	-	-				Fujiwara (1982): Studies on the effect of TDA and MDA on plankton daphnia. Report to the III from 25.3.1982, Project FE-E-26. CITI (1992): Biodegradation and bioaccumulation data on existing chemicals based on the CSCL Japan.	p.24
7 SIDS		1.40%	その他, residual amount		OECD TG 301F	-	-	-				Yakabe Y. (1995): The study of the environmental fate of TDA, MDA and oligoureas of TDI and MDI: Biodegradability test of 2,4-diaminotoluene and 4,4'-diaminodiphenylmethane. III report 11170, project number 105-FE-ENV, part III.	p.24

PACS F 等	129006
PACS Name 等	2,4-ジアミノトルエン
CASRN	95-80-7
CA IN	1,3-Benzenediamine, 4-methyl-
その他番号	
その他名称	4-メチル-1,3-フェニレンジアミン
SMILES	Nc1ccc(c(c1)N)C

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
8 SIDS		2%	DOC removal		OECD TG 301F	-	-	-	-			Yakabe Y. (1995): The study of the environmental fate of TDA, MDA and oligoureas of TDI and MDI: Biodegradability test of 2,4-diaminotoluene and 4,4'-diaminodiphenylmethane. III report 11170, project number 105-FE-ENV, part III.	p.24
9 SIDS		0%	O <sub>2</sub> consumption		OECD TG 301F	-	-	-	-			Yakabe Y. (1995): The study of the environmental fate of TDA, MDA and oligoureas of TDI and MDI: Biodegradability test of 2,4-diaminotoluene and 4,4'-diaminodiphenylmethane. III report 11170, project number 105-FE-ENV, part III.	p.24
10 SIDS		51%	CO <sub>2</sub> evolution		OECD TG 301B	-	-	-	-			Kim M-N et al, (2002): Toxicity and biodegradation of diamines, J. Environ. Sci. Health Vol. B37: 53-64.	p.24
11 既存点検事業		7.90%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result				K0200
12 既存点検事業		3%	TOC removal		化審法TG	-	-	-	experimental result				K0200
13 既存点検事業		0%	O <sub>2</sub> consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result				K0200