

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26

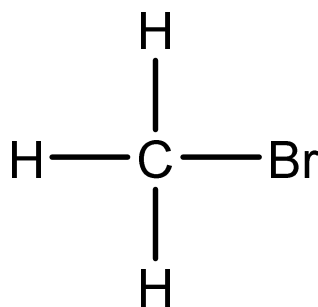
優先評価化学物質のリスク評価(一次)

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

ブロモメタン(別名臭化メチル)

優先評価化学物質通し番号 9



平成 28 年 6 月

経済産業省

目 次

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

1 評価対象物質の性状

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

1-1 物理化学的性状及び濃縮性

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

表 1-1 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ¹⁾

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	—	94.93	—	94.93
融点	℃	-93.66 ^{2),3),4)}	測定値か推計値か不明だが、信頼性の定まった情報源から得られたデータ	-93.66 ^{2),3),4)}
沸点	℃	3.56 ^{2),3),4),5),6)}	1atm,測定値か推計値か不明であるが、OECD(2001)のキースタディとして Merck(2013)の値	3.56 ^{2),3),4),5),6)}
蒸気圧	Pa	<u>1.89×10⁵</u> ³⁾	測定値か推計値か不明だが、信頼性の定まった情報源から得られたデータ	1.89×10 ⁶ ²⁾
水に対する溶解度	mg/L	1.5×10 ⁴ ²⁾	25℃の測定値を 20℃に換算した値であり、信頼性の定まった情報源から得られたデータ	1.5×10 ⁴ ²⁾
1-オクタールと水との間の分配係数(logPow)	—	<u>1.08</u> ⁷⁾	20±1℃,測定値	1.94 ²⁾
ヘンリー係数	Pa·m ³ /mol	<u>743.7</u> ⁸⁾	測定値	682 ⁹⁾
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	<u>170</u> ^{2),9),10)}	信頼性の定まった情報源から得られた 3 つのデータの算術平均値	172 ^{2),9)}
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	<u>3.16</u> ¹¹⁾	logPow を用いて推計	8.85 ¹²⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ¹¹⁾	1
解離定数	—	—	解離性の基を有さない物質	— ¹³⁾

1) 平成 27 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 27 年 11 月 4 日）で了承された値

2) OECD(2001)

8) PhysProp(2015-10-02 閲覧)

3) Merck(2013)

9) Mackay (2006)

4) NITE(2008)

10) IUCLID(2000)

5) ECHA(2015-10-02 閲覧)

11) MHLW, METI, MOE(2014)

6) EHC(1995)

12) EPI Suite(2012)

7) MITI(1988)

13) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

①融点

評価Ⅰでは OECD(2001)に記載された値(-93.66 ℃)を用いた。この値は測定方法または推計方法の詳細が不明であるが、SIDS のキースタディである。さらに、他の信頼性が定まった情

1 報源（「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等につ
2 いて」の「3. 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報源。以下、同じ）に記載されたデ
3 ータもほぼ同様の値であるため、評価Ⅱにおいてもこの値 (-93.66 °C) を用いる。

4 5 ②沸点

6 評価Ⅰでは OECD(2001)に記載された値(3.56 °C)を用いた。この値は測定方法または推計
7 方法の詳細が不明であるが、SIDS のキースタディである。他の信頼性が定まった情報源に記
8 載されたデータもほぼ同様の値であるため、評価Ⅱにおいてもこの値 (3.56 °C) を用いる。

9 10 ③蒸気圧

11 評価Ⅰでは OECD(2001)に記載された値(1.89×10^6 Pa)を用いた。この値は測定方法または推
12 計方法の詳細が不明であるが、SIDS のキースタディである。OECD(2001)には、1,893kPa
13 (1,420mmHg) と記載されているが、1,420mmHg であれば 189.3kPa となる。元文献を確認
14 したところ 1,420mmHg と記載されており、他の信頼性が定まった複数の情報源に記載され
15 たデータも同じ値 (1,420mmHg) が採用されていることから、評価Ⅱにおいては 1.89×10^5
16 Pa(1,420 mmHg) を用いる。

17 18 ④水に対する溶解度

19 評価Ⅰでは OECD(2001)に記載された測定値(1.5×10^4 mg/L (25°Cの測定値を 20 °Cに換算))
20 を用いた。この値は SIDS のキースタディである。記載された実験条件・方法が適切である
21 ことから、評価Ⅱにおいてもこの値 (1.5×10^4 mg/L) を用いる。

22 23 ⑤logPow

24 評価Ⅰでは OECD(2001)に記載された測定値(1.94) を用いた。このデータは実測値で SIDS
25 のキースタディであるが、GLP 試験ではない。一方で既存化学物質安全性点検結果 (MITI
26 1988) では、25±1 °Cにおける実測値(1.08)が得られており、評価Ⅱにおいてはこの値(1.08)
27 を用いる。

28 29 ⑥ヘンリー係数

30 評価Ⅰでは Mackay(2006)の複数ある信頼性ランク 2B の2データの平均値($682 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$)
31 を用いた。一方、方法の詳細が不明であるが、PhysProp には実測値が掲載されており、HSDB
32 でも同じ値が採用されていることから、評価Ⅱにおいてはこの値 ($743.7 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$) を用い
33 る。

34 35 ⑦Koc

36 評価Ⅰでは OECD(2001)及び Mackay(2006)の信頼性ランク 2B の値(172 L/kg)を用いた。土
37 壌のタイプが異なる3つの測定値(164 L/kg、172 L/kg、174 L/kg)を記載した文献が複数(OECD
38 2001、Mackay 2006、IUCLID2000)あることから、評価Ⅱではこれら3つの算術平均値(170 L/kg)
39 を用いる。

40 41 ⑧BCF

42 評価Ⅰでは BCFBAFver.3.01 を用いて推定した値(8.85 L/kg)を用いた。化審法において、
43 logPow の試験結果 (1.08) より「高濃縮性ではない」と判定されている。また、SIDS レポー
44 トや他の信頼性が定まった情報源に記載のあるデータは推定値や詳細不明の値である。評価
45 Ⅱにおいて採用する logPow の値(1.08)を用いてカテゴリアプローチの手法による推算を行

1 った結果 $\log BCF = -0.576$ となった。本手法においては $\log BCF$ の推計結果が 0.5 を下回った
2 場合は $\log BCF$ と $\log Pow$ の相関関係が低くなることから、化審法における優先評価化学物質
3 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。) に従って、評価
4 II では 3.16 を用いる。

5

6 ⑨BMF

7 評価 I では BMF は $\log Pow$ と BCF の値から技術ガイダンスに従って設定した値(1)を用い
8 た。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 (1) を用いる。

9

1 1-2 分解性

2 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

3
4

表 1-2 分解に係るデータのまとめ¹⁾

項目		半減期 (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	OH ラジカルとの反応	402 25℃、OH ラジカル濃度 5×10^5 molecule/cm ³ での測定値 ²⁾ 。
		オゾンとの反応	NA
		硝酸ラジカルとの反応	2,100 25℃での反応速度定数の測定値 ³⁾ から硝酸ラジカル濃度 2.4×10^8 molecule/cm ³ として算出 ⁴⁾
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	10,000 化審法の分解度試験データ(15-17%) ⁵⁾ から生分解半減期へ換算 ⁴⁾
		加水分解	20 25℃で2つある測定データのうち、PH7.0での半減期 ²⁾
		光分解	— 290nm以上の光をほとんど吸収しないため、直接光分解を無視できる。 ^{2),3),6)}
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	10,000 化審法の分解度試験データ(15-17%) ⁵⁾ から生分解半減期へ換算 ⁴⁾
		加水分解	20 水中加水分解の項参照
底質	底質における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	40,000 化審法の分解度試験データ(15-17%) ⁵⁾ から生分解半減期へ換算 ⁴⁾
		加水分解	20 水中加水分解の項参照

5 1) 平成27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
6 ビュー会議(平成27年11月4日)で了承された値

7 2) OECD(2001)

8 3) NITE(2008)

9 4) MHLW, METI, MOE(2014)

10 5) METI(1988)

11 6) Howard(1989)

12 NA:情報が得られなかったことを示す

13 -無視できると考えられることを示す

14

15 上記分解項目について、精査概要を以下に示す。なお、「総括分解半減期」とは、分解の機
16 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。

17

18 ①大気

19 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。

20 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

21 半減期算出に採用した反応速度定数データは SIDS のキースタディで、reliability (2) の測
22 定値である。測定は、温度2パターン(-8℃、25℃)、濃度3パターン(5×10^5 molecule/cm³、
23 1×10^6 molecule/cm³、 2×10^6 molecule/cm³)で実施されており、それぞれの値が報告されている。
24 評価IIにおいては技術ガイダンスに従って25℃、OH ラジカル濃度 5×10^5 molecule/cm³の半
25 減期(1.1年 ≒ 402日)を用いる。

26 ①-2 オゾンとの反応の半減期

1 大気中でのオゾンとの反応の半減期に関する情報は得られなかった。

2 ①-3 硝酸ラジカルとの反応の半減期

3 25°Cでの反応速度定数の測定値 ($1.57 \times 10^{-17} \text{ cm}^3/\text{molecule}/\text{sec}$) (NITE 2008) が得られた。
4 この測定結果を技術ガイダンスに従い硝酸ラジカル濃度 $2.4 \times 10^8 \text{ molecule}/\text{cm}^3$ とし、半減期に
5 換算すると 2,100 日 (約 6 年) となる。評価Ⅱにおいてはこの値(2,100 日)を用いる。

7 ②水中

8 水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、生分解、加水分解、光分解の
9 機序別の反応に関する情報が得られた。

10 ②-1 生分解の半減期

11 化審法の分解度試験 (OECD TG301D) の測定結果(METI 1988)から BOD による分解度が
12 17%及び 15%との結果が得られた。これらの試験結果を技術ガイダンスに従って生分解半減
13 期に換算すると 10,000 日となる。評価Ⅱにおいてはこの値(10,000 日)を用いる。なお、信
14 頼性が定まった情報源(OECD 2001)では「水中での生分解は重要でないことが予想される。」
15 との記載があった。一方で、他の信頼性が定まった情報源では 28 日 (Howard 1991) と記載
16 があった。元文献を確認したところブロモメタンの試験結果ではなく、トリブロモメタンの
17 試験結果を元に専門家判断により導いた値であるため採用しない。

18 ②-2 加水分解の半減期

19 OECD(2001)に記載された reliability (2) の測定データが得られた。測定結果は 2 つあり、
20 (1)25 °C、pH 7.0 での反応速度定数データ($4.09 \times 10^{-7} \text{ sec}^{-1}$)を半減期に換算した 20 日、(2)25 °C
21 での反応速度定数データ($3 \times 10^{-7} \text{ sec}^{-1}$)を半減期に換算した 26.7 日である。評価Ⅱにおいては
22 試験の条件が揃っている(1)の結果の値 (20 日)を用いる。なお、化審法の分解度試験 (OECD
23 TG301D)には、ブロモメタンは水中で 28 日後、約 30~40%加水分解されるとの記載があり、
24 OECD(2001)とほぼ整合が取れていると考えられる。

25 評価Ⅱではこの値を水中溶存態に適用する。

26 ②-3 光分解の半減期

27 信頼性が定まった情報源では、ブロモメタンは、290 nm 以上の光をほとんど吸収しないた
28 め大気 (対流圏) では直接光分解は起こらない (OECD 2001、Howard 1989、NITE 2008) と
29 ある。よって、水中での直接光分解は無視できる。

31 ③土壌

32 土壌での総括分解半減期に関する情報及び加水分解の機序別に関する情報は得られなかつ
33 たが、生分解の機序別の反応に関する情報が得られた。

34 ③-1 生分解の半減期

35 信頼性が定まった情報源(OECD 2001)では、「臭化メチルの生分解は、土壌中のその短い滞
36 留時間での主要なプロセスであるとは考えられない」との記載がある。さらに、臭化メチル
37 ガス (20 万 ppm) をステンレス製鋼箱に 2 種類の土壌 (砂、粘土) を入れ、好気性および
38 嫌気性、滅菌および非滅菌の状態に分けて測定を行ったところ、表 1-3 のような結果が得ら
39 れたと記載があった。この結果から、ブロモメタンは非滅菌状態で微生物の活性を阻害する
40 性質があるとの考察があった。また、化審法の分解度試験 (OECD TG301D) の測定結果(METI
41 1988)から BOD による分解度が 17%及び 15%との結果が得られた。これらの試験結果を技
42 術ガイダンスに従って生分解半減期に換算すると、10,000 日となる。評価Ⅱにおいてはこの
43 値(10,000 日)を用いる。

1

表 1-3 OECD の土壌における半減期の考察のまとめ

土壌の種類	嫌気性・好気性の区分	半減期（時間）	
		滅菌	非滅菌
砂	好気性	47	35
	嫌気性	80	144
粘土	好気性	2.5	3.8
	嫌気性	34	39

2

3 ③-2 加水分解の半減期

4 半減期に関するデータは得られなかった。評価Ⅱにおいては技術ガイダンスに従って、土
5 壌中での加水分解半減期を水中の加水分解半減期と同じ値(20 日)を用いる。

6

7 ④底質

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

10 ④-1 生分解の半減期

11 半減期に関するデータは得られなかった。評価Ⅱにおいては技術ガイダンスに従って、底
12 質中での生分解半減期を水中生分解半減期の 4 倍の値(40,000 日)を用いる。

13 ④-2 加水分解の半減期

14 半減期に関するデータは得られなかった。評価Ⅱにおいては技術ガイダンスに従って、底
15 質中での加水分解半減期を水中の加水分解半減期と同じ値(20 日)を用いる。

16

17

2 【付属资料】

2-1 物理化学的性状等一覧

収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

出典)

ATSDR(1992): Agency for Toxic Substances and Disease Registry. “Toxicological Profile of BROMOMETHANE”, Toxicological Profiles. 19902

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

CRC(2003): Lide, D. R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 84th ed., CRC Press, 2003–2004.

CRC(2009): Lide, D. R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 90th ed., CRC Press, 2009–2010.

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

CRC(2015): Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 96th ed., CRC Press, 2015-2016.

ECHA: ECHA. Information on Chemicals – Registered substances.

<http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>, (2015-10-02 閲覧).

EHC(1995): International Program of Chemical Safety (IPCS). “METHYL BROMIDE”, Environmental Health Criteria. No. 166. 1995.

<http://www.inchem.org/documents/ehc/ehc/ehc166.htm>

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

Howard(1989): Howard, P. H. et al. Handbook of Environmental Fate and Exposure Data For Organic Chemicals. Lewis publishers, 1989.

Howard(1991): Howard, P. H. et al. Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis publishers, 1991.

HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank.

<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, (2015-10-02 閲覧).

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

Mackay(2006): Mackay, D., Shiu, W. Y., Ma, K. C., & Lee, S. C. Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. 2nd ed., CRC press, 2006.

Merck(2013): The Merck Index. 15th ed.

- 1 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
2 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.
- 3 MITI(1988): MITI. 臭化メタン (被験物質番号 K-171) の1-オクタノールと水との間の分
4 配係数試験. 試験番号 80171K, 既存化学物質点検, 1988
- 5 MITI(1988): MITI. 臭化メタン (被験物質番号 K-171)の微生物による分解度試験. 試験番
6 号 20171, 既存化学物質点検, 1988.
- 7 MITI(1988): MITI. 臭化メタン (被験物質番号 K-171)の物理化学性状の測定. 試験番号
8 80171K, 既存化学物質点検, 1988.
- 9 MITI(1988): MITI. 臭化メタン (被験物質番号 K-171)の解離定数の測定. 試験番号
10 80171K, 既存化学物質点検, 1988.
- 11 MOE(2002): MOE. 化学物質の環境リスク評価 第1巻, 臭化メチル. 2002.
- 12 NIST: NIST. Chemistry WebBook. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>, (2015-09-29 閲覧).
- 13 NITE(2008): NITE. 化学物質の初期リスク評価書, ブロモメタン. Ver. 1.0, No. 126, 2008.
- 14 OECD(2001): OECD. SIDS Initial Assessment Report, Methyl bromide. 2001.
- 15 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2015-10-02 閲覧).

16

17 2-2 その他

18 特になし。

情報源略称	詳細等
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
ATSDR	ATSDR(米国毒性物質疾病登録局):「Toxicological Profile」
CCD	Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics
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)
Mackay	Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Second Edition
Merck	The Merck Index, 15th Ed, Merck & Co, 2013
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,
SIDS	OECD: SIDSレポート
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果

基本情報

優先通し番号	9
物質名称	プロモタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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IIにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	融点	-94 °C	-94							2B	×			p.486
2 ATSDR	融点	-93.7 °C	-93.7							2B	×		Windholz M, ed. 1983. The Merck index: An encyclopedia of chemicals, drugs, and biologicals. Rahway, NJ: Merck and Company, Inc, 865..	p.53
3 CCD	凝固点	-94 °C	-94							2B	×			Methyl Bromide
4 CRC	融点	-93.7 °C[-93.7(0.4)]	-93.7							2B	×		Frenkel, M., Chirico, R. D., Diky, V. V., Kazakov, A., and Muzny, C. D., ThermoData Engine, NIST Standard Reference Database 103b, Version 5.0 (Pure Compounds, Binary Mixtures, and Chemical Reactions, TDE-SOURCE Version 5.1), National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD – Boulder, CO, 2010, <http://www.nist.gov/srd/nist103b.cfm>..	Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
5 EHC	凝固点	-93 °C	-93							2B	×		Matheson gas data book (1980) The Matheson gas data book. East Rutherford, New Jersey, Matheson Gas products (A Division of Will Ross), vol 6, pp 361-363..	2.2.1 Physical properties Table 1
6 EPI Suite	融点	-105.39 °C	-105.39	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
7 HSDB	融点	-93.68 °C	-93.68							2B	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
8 IUCLID	融点	-93 °C	-93		no data					4A	×			p.9
9 Mackay	融点	-93.68 °C	-93.68							2B	×		Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, CRC Press, LLC. Boca Raton, Florida..	p.1123
10 Merck	融点	-93.66 °C	-93.66							2B	○			Monograph Number: 0006029
11 MOE初期評価	融点	-94 °C	-94							2B	×		IPCS (1994) International Chemical Safety Cards.	p.1
12 NITE初期リスク評価書	融点	-93.66 °C	-93.66							2B	○		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ..	p.2
13 PhysProp	融点	-93.7 °C	-93.7							2B	×			p.1
14 REACH登録情報	融点	-94 °C	-94		no data	2: reliable with restrictions	weight of evidence	その他,handbook		4A	×		The Merck Index: an Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals.2001,Merck and Co., Inc.	Other WoE Melting point/freezing point.001
15 SIDS	融点	-93.66 °C	-93.66				key study			2A	○			p.5, 7, Dossier p.59
16 既存点検事業	融点	-93.7 °C	-93.7							4A	×		化学防災指針3(丸善株式会社).	K0171

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモメタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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IIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	4 °C	4									4A	×			p.486
2 ATSDR	3.6 °C	3.6			-	-	-	-	-		4A	×		Windholz M, ed. 1983. The Merck index: An encyclopedia of chemicals, drugs, and biologicals. Rahway, NJ: Merck and Company, Inc. 865..	p.53
3 CCD	3.46 °C	3.46	3.46	760 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×			Methyl Bromide
4 CRC	3.4 °C [3.4(0.1)]	3.4	3.4	760 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×		Frenkel, M., Chirico, R. D., Diky, V. V., Kazakov, A., and Muzny, C. D., ThermoData Engine, NIST Standard Reference Database 103b, Version 5.0 (Pure Compounds, Binary Mixtures, and Chemical Reactions, TDE-SOURCE Version 5.1), National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD – Boulder, CO, 2010, <http://www.nist.gov/srd/nist103b.cfm>..	Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
5	3.5 °C	3.5			-	-	-	-	-		4A	×			Flammability of Chemical Substances (Section 16)
6 EHC	3.56 °C	3.56	3.56	1 atm	-	-	-	-	-		2B	○		Matheson gas data book (1980) The Matheson gas data book. East Rutherford, New Jersey, Matheson Gas products (A Division of Will Ross), vol 6, pp 361-363.. Windholz M, ed. 1983.	2.2.1 Physical properties Table 1
7 EPI Suite	26.06 °C	26.06			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
8 HSDB	3.5 °C	3.5									4A	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
9 IUCLID	3.6 °C [Decomposition temperature: 194 degree C]	3.6	3.606227	1013 hPa			no data				4A	×			p.9
10 Mackay	3.5 °C	3.5			-	-	-	-	-		4A	×		Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, CRC Press, LLC. Boca Raton, Florida..	p.1123
11 Merck	3.56 °C	3.56			-	-	-	-	-		4A	○		Egan, Kemp, J. Am. Chem. Soc. 60, 2097 (1938).	Monograph Number: 0006029
12 MOE初期評価	4 °C	4			-	-	-	-	-		4A	×		IPCS (1994) International Chemical Safety Cards.	p.1
13 NITE初期リスク評価書	3.56 °C	3.56	3.566226	101300 Pa							2B	○		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ..	p.2
14 PhysProp	3.5 °C	3.5			-	-	-	-	-		4A	×			p.1
15 REACH登録情報	3.56 °C	3.56	3.56	101.325 kPa			no data	4: not assignable	weight of evidence	その他(測定値)	4A	○		2001	Other WoE Boiling point_001
16 SIDS	3.56 °C	3.56	3.56	1 atm			その他?		key study		2A	○			p.5, 7, Dossier p.59

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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IIにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
17 既存点検事 業	3.56 °C	3.56			-	-	-	-	-		4A	×	-	化学防災指針3 (丸善株式会社)	K0171

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	ブロモメタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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Ⅱにおけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	1420 mmHg[2.0 M in diethyl ether]	189317.8	189317.8	20 °C							2B	×			p.487
2	3945 mmHg[2.0 M in diethyl ether]	525956.7	58975.74	55 °C							4A	×			p.487
3	1420 mmHg	189317.8	189317.8	20 °C							2B	×			p.486
4 ATSDR	1420 mmHg	189317.8	189317.8	20 °C	-	-	-	-	-		2B	×	-	Mabey WR, Smith JH, Podoll RT, et al. 1982. Aquatic fate process data for organic priority pollutants. Report to U.S. Environmental Protection Agency, Office of Water Regulations and Standards, Washington, DC, by SRI International, Menlo Park, CA. EPA 440/4-81-014..	p.53
5 CCD	1250 mmHg	166653	166653	20 °C	-	-	-	-	-		2B	×	-		Methyl Bromide
6 EHC	1893 kPa	1893000	1893000	20 °C	-	-	-	-	-		2B	×	1893 kPa (1420 mmHg)	Windholz M (1983) The Merck index, 10th ed. Rahway, New Jersey, Merck & Co., Inc., p 865..	2.2.1 Physical properties Table 1
7 EPI Suite	211000 Pa[2B以上の値を用いて推定(2C)]	211000	149578.5	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
8 HSDB	1893 kPa[1420 mm Hg]	1893000	1893000	20 °C							2B	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
9	1620 mmHg	215982.2	153110.4	25 °C							2B	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE:
10 IUCLID	1660 hPa	166000	166000	20 °C		no data					4A	×			p.9
11 Mackay	256550 Pa	256550	181869	25 °C	-	-	-	-	内挿(補間)	interpolated-Antoine eq. regression, temp range -96.3 to 3.6°C	4C	×	-		p.1123

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモentan (別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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IIにおけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
12	217700 Pa	217700	154328.1	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-Antoine eq.	4C	×	217700 (calculated-Antoine eq., Dreisbach 1959, 1961) $\log(P/\text{mmHg}) = 6.95965 - 986.59/(238.32 + t/^\circ\text{C})$; temp range -58 to 53°C (Antoine eq. for liquid state, Dreisbach 1959, 1961) $\log(P/\text{mmHg}) = 6.95965 - 986.590/(238.32 + t/^\circ\text{C})$; pressure range of 10 to 1500 mmHg (Antoine eq. from correlation of selected lit. data, Li & Rossini 1961)	Dreisbach, R.R. (1955–1961) Physical Properties of Chemical Compounds. Am. Chem. Soc. Adv. Chem. Series 15 (1955), 22 (1959) and 29 (1961). Washington DC..	p.1123
13	183900 Pa	183900	130367.2	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-Antoine eq.	4C	×	183900 (calculated-Antoine eq., Weast 1972–73) $\log(P/\text{mmHg}) = [-0.2185 \times 5925.9/(T/K)] + 7.482362$; temp range -96.3 to 190°C (Antoine eq., Weast 1972–73)	Weast, R.C., Editor (1972–73) Handbook of Chemistry and Physics. 53rd Edition, CRC Press Inc., Cleveland, Ohio..	p.1123
14	218930 Pa	218930	155200.1	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-Antoine eq.	4C	×	218930 (calculated-Antoine eq., Kudchadker et al. 1979) $\log(P/\text{mmHg}) = 7.08823 - 1044.42/(244.684 + t/^\circ\text{C})$ (Antoine eq., Kudchadker et al. 1979)	Kudchadker, A.P., Kudchadker, S.A., Shukla, R.P., Patnaik, P.R. (1979) Vapor pressures and boiling points of selected halomethanes. J. Phys. Chem. Ref. Data 8, 449–517..	p.1123
15	187000 Pa	187000	187000	20 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×	-	Thomas, R.G. (1982) Volatilization from water. Chapter 15. In: Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Environmental Behavior of Organic Compounds. Lyman, W.J., Reehl, W.F., Rosenblatt, D.H., Editors, McGraw-Hill, New York..	p.1123

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモメタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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Ⅱにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
16	219000 Pa	219000	155249.7	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated- Antoine eq.	4C	×	216900, 219000 (calculated- Antoine eq., Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 6.20369 – 1041.723/(244.36 + t/°C); temp range –69.9 to 4.5°C (Antoine eq. from reported exptl. data, Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 6.2243 – 1049.898/(245.319 + t/°C); temp range –70 to 3.6°C (Antoine eq. from reported exptl. data, Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 6.21313 – 1044.42/(224.684 + t/°C); temp range not specified (Antoine eq., Riddick et al. 1986)	Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1984) The Vapor Pressures of Pure Substances. 2nd Edition, Elsevier, Amsterdam..	p.1123
17	216900 Pa	216900	153761	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated- Antoine eq.	4C	×	216900, 219000 (calculated- Antoine eq., Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 6.20369 – 1041.723/(244.36 + t/°C); temp range –69.9 to 4.5°C (Antoine eq. from reported exptl. data, Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 6.2243 – 1049.898/(245.319 + t/°C); temp range –70 to 3.6°C (Antoine eq. from reported exptl. data, Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 6.21313 – 1044.42/(224.684 + t/°C); temp range not specified (Antoine eq., Riddick et al. 1986)	Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1984) The Vapor Pressures of Pure Substances. 2nd Edition, Elsevier, Amsterdam..	p.1123

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモメタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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IIにおけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
18	217680 Pa	217680	154313.9	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-Antoine eq.	4C	×	217680 (calculated-Antoine eq., Stephenson & Malanowski 1987) log (PL/kPa) = 6.08455 – 986.59/(-34.83 + T/K); temp range 201–296 K (Antoine eq., Stephenson & Malanowski 1987) log (P/mmHg) = 29.3988 – 2.0406 × 103/(T/K) – 7.9966 · log (T/K) – 4.1899 × 10–10 · ((T/K) + 5.0174 × 10–6 · (T/K)2); temp range 179–467 K (vapor pressure eq., Yaws 1994)	Stephenson, R.M., Malanowski, S. (1987) Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds. Elsevier Science Publishing Co., Inc., New York..	p.1123
19	218630 Pa	218630	154987.4	25 °C	-	-	-	-	その他,selected and summary of literature data, temp range 179.48–318.15 K	-	2B	×	-	Stephenson, R.M., Malanowski, S. (1987) Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds. Elsevier Science Publishing Co., Inc., New York..	p.1123
20	Merck 1420 mmHg	189317.8	189317.8	20 °C	-	-	-	-	-	-	2B	○	-	-	Monograph Number: 0006029
21	MOE初期評価 166 kPa	166000	166000	20 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×	-	Lewis, R.J., Jr (1993) Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 12th Ed., New York, Van Nostrand Reinhold.	p.1
22	NITE初期リスク評価書 189 kPa	189000	189000	20 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×	-	Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ..	p.2
23	PhysProp 1620 mmHg	215982.2	153110.4	25 °C	-	-	-	-	experimental result	-	2B	×	-	DAUBERT,TE & DANNER,RP (1985).	p.1
24	REACH登録情報 1420 mmHg	189317.8	189317.8	20 °C	-	no data	4: not assignable	weight of evidence	その他 (測定値)	experimental and handbook	4A	×	-	1978	Other WoE Vapour pressure.001
25	SIDS 1893 kPa(1,420 mmHg)	1893000	1893000	20 °C	-	その他,?	-	key study	-	-	2A	×	-	-	p.5, 7, Dossier p.59-60
26	既存点検事業 1140.8 mmHg	152094.2	207910.6	15.6 °C	-	-	-	-	-	-	4A	×	-	-	K0171

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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IIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	0.9 g/L	900	900	20 °C								2B	×		Verschueren K. 1983. Handbook of environmental data on organic chemicals. 2nd ed. New York: Van Nostrand Reinhold Company, 835-836..	p.53
2	13.4~18.1 g/L	15750	15750	20 °C								2B	×		EPA. 1986b. Health and environmental effects profile for methyl bromide. Cincinnati, OH: U.S. Environmental Protection Agency, Office of Health and Environmental Assessment. ECAO-CIN-P182. EPA/600/X-86/171..	p.53
3	13 g/L	13000	13000	20 °C								2B	×		Lyman WJ, Reehl WF, Rosenblatt DH. 1982. Handbook of chemical property estimation methods: Environmental behavior of organic compounds. New York, NY: McGraw-Hill Book Company..	p.53
4 CCD	[forms a voluminous crystalline hydrate with cold water.]											3	×			Methyl Bromide
5 CRC	1.8 mass %[1 atm]	18329.9389	18329.9389	20 °C								2B	×		Mackay, D., and Shiu, W. Y., J. Phys. Chem. Ref. Data, 10, 1175, 1981..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
6	18.3 g/Kg[1 atm]	18300	18300	20 °C								2B	×		Mackay, D., and Shiu, W. Y., J. Phys. Chem. Ref. Data, 10, 1175, 1981..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
7	[slightly soluble]											3	×	sl H_2_O		Physical Constants of Organic Compounds (Section 3) etc
8 EHC	15.4 g/L	15400	14375.9991	25 °C								2B	×		Wilhelm E, Battino R, & Wilcock RJ (1977) Low pressure solubility of gases in liquid water. Chem Rev, 77: 219-262..	2.2.1 Physical properties Table 1
9	18 g/L	18000	18000	25 °C								2B	×		Mackay D & Shiu WK (1981) A critical review of Henry's Law Constants for chemicals of environmental interest. J Phys Chem Ref Data, 10: 1175-1199..	2.2.1 Physical properties Table 1
10	16 g/L	16000	16000	20 °C								2B	×		Atochem (1987) Fumyl-o-gas. Fiche de donnees de securite. Paris, Groupe Elf Aquitaine, 4 pp..	2.2.1 Physical properties Table 1

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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IIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
11	[forms a voluminous crystalline hydrate (CH3Br.2OH 2O) below 4 °C]											3	x		Windholz M (1983) The Merck index, 10th ed. Rahway, New Jersey, Merck & Co., Inc., p 865..	2.2.1 Physical properties Table 1
12	18.5 g/L	18500	18500	20 °C								2B	x		Wilhelm E, Battino R, & Wilcock RJ (1977) Low pressure solubility of gases in liquid water. Chem Rev, 77: 219-262..	2.2.1 Physical properties Table 1
13	EPI Suite	3235 mg/L[2B以上の値を用いて推定(2C)]	3235	3019.89333	25 °C					(Q)SAR		2C	x			
14	HSDB	15200 mg/L	15200	14189.2979	25 °C							2B	x			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
15		18.5 g/L	18500	18500	25 °C							2B	x			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
16		13.4 g/L	13400	12508.9863	25 °C							2B	x			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
17	IUCLID	16 g/L[Methyl bromide slowly hydrolyses to bromohydric acid and methanol]	16000	21606.8143	0 °C			no data				4A	x			p.10
18	Mackay	14400 mg/L	14400	13442.4927	25 °C							2B	x		Irmann, F. (1965) Eine einfache korrelation zwischen wasserloslichkeit und struktur von kohlenwasserstoffen und halogenkohlenwasserstoffen. Chem. Eng. Tech. 37, 789-798..	p.1123
19		900 mg/L	900	900	20 °C							2B	x		Verschueren, K. (1977) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals. Van Nostrand Reinhold, New York..	p.1123
20		15223 mg/L	15223	14210.7685	25 °C					その他,summary of literature data, temp range 5-80°C		2B	x		Horvath, A.L. (1982) Halogenated Hydrocarbons. Solubility-Miscibility with Water. Marcel Dekker, Inc., New York and Basel..	p.1123

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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IIにおけるキースタディ	備考	文献	ページ番号等
21	17500 mg/L	17500	17500	20 °C		-	-	-	-	-	-	2B	×		Windholz, M., Budavari, S., Blumetti, R.F., Otterbein, E.S., Editors (1983) The Merck Index. 10th Edition, Merck & Co., Inc., Rahway, New Jersey..	p.1123
22	13400 mg/L	13400	12508.9863	25 °C		-	-	-	-	-	-	2B	×		Jolles, Z.E., Editor (1966) Bromine and Its Compound. Ernest Benn, London..	p.1123
23	12930 mg/L	12930	12070.2382	25 °C		-	-	-	-	-	-	2B	×		Korenman, I.M., Gur'ev, I.A., Gur'eva, Z.M. (1971) Solubility of liquid aliphatic compounds in water. Zh. Fiz. Khim 45, 1866. (VINITI No. 2885-71)..	p.1123
24	13410 mg/L	13410	12518.3213	25 °C		その他,vapor saturation-gravitational method, measured range 10-32°C	-	-	-	-	-	2B	×		Haight, G.P. (1951) Solubility of methyl bromide in water and in some fruit juices. Ind. Eng. Chem. 43, 1827-1828..	p.1123
25	20700 mg/L	20700	20700	20 °C		その他,gravitational method	-	-	-	-	-	2B	×	20700, 24140 (20°C, 25°C, gravitational method, Glew & Moelwyn-Hughes 1953)	Glew, D.N., Moelwyn-Hughes, E.A. (1953) Chemical statics of the methyl halides in water. Disc. Faraday Soc. 15, 150-161..	p.1123
26	24140 mg/L	24140	22534.8454	25 °C		その他,gravitational method	-	-	-	-	-	2B	×	20700, 24140 (20°C, 25°C, gravitational method, Glew & Moelwyn-Hughes 1953)	Glew, D.N., Moelwyn-Hughes, E.A. (1953) Chemical statics of the methyl halides in water. Disc. Faraday Soc. 15, 150-161..	p.1123
27	Merck 1.75 g/100 g	17500	17500	20 °C		-	-	-	-	-	-	2B	×	Soly in water (20°, 748 mm): 1.75 g/100 g of soln		Monograph Number: 0006029
28	MOE初期評価 1.5 mL/100 mL	25500	25500	20 °C		-	-	-	-	-	-	4A	×		IPCS (1994) International Chemical Safety Cards.	p.1
29	NITE初期リスク評価書 17.5 g/L	17500	17500	20 °C		-	-	-	-	-	-	2B	×		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ..	p.2
30	PhysProp 15200 mg/L	15200	14189.2979	25 °C		-	-	-	-	experimental result	-	2B	×		DAUBERT,TE & DANNER,RP (1985).	p.1
31	REACH登録情報 1.32 g/L	1320				EU Method A.6,EU Method A.6 (Water Solubility)	yes	4: not assignable	weight of evidence	その他(測定値)	Literature search	4A	×			1992 Other WoE Water solubility.001
32	1.38 g/L	1380				EU Method A.6,EU Method A.6 (Water Solubility)	yes	4: not assignable	weight of evidence	その他(測定値)	Literature search	4A	×			1992 Other WoE Water solubility.001
33	SIDS 16.1 g/L[Apparent solubility]	16100	15029.4536	25 °C			その他,?		key study	experimental result		2A	○			p.5, 7, Dossier p.60

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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IIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
34 既存点検事 業	18 g/L	18000	18000	20±1 °C		その他,昭和63 年3月11日付け 63基第98号別 添に定められた 方法に準拠	-	-	-	experiment al result	-	4A	×	-		K0171

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモetan(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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IIにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	1.1	1.1			-	-	-	-	-		2B	×		Callahan MA, Slimak MW, Gabel NW, et al. 1979. Water-related environmental fate of 129 priority pollutants. Vol. I. Introduction and technical background, metals and inorganics, pesticides and PCBs. Report to U.S. Environmental Protection Agency, Office of Water Planning and Standards, Washington, DC., by Versar Incorporated, Springfield, VA. EPA-440/4-79-029a. NTIS No. PB80-204373..	p.53
2 CRC	1.19	1.19	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×		Mackay, D., Shiu, W. Y., and Ma, K. C., Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Lewis Publishers/CRC Press, Boca Raton, FL, 1992..	Octanol-Water Partition Coefficients (Section 16)
3 EHC	1.19	1.19			-	-	-	-	-		2B	×		Hansch C & Leo A (1979) Substituent constants for correlation in chemistry and biology. New York, Chichester, Brisbane, Toronto, John Wiley & Sons, p 173..	2.2.1 Physical properties Table 1
4 EPI Suite	1.18	1.18			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
5 HSDB	1.19	1.19									2B	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT:
6 IUCLID	99~99	99	1254 °C								4A	×			p.9
7 Mackay	1.19	1.19	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	×		Leo, A., Jow, P.Y.C., Silipo, C., Hansch, C. (1975) Calculation of hydrophobic constant (Log P) from π and f constants. J. Med. Chem. 18, 865-868..	p.1123
8	1.19	1.19	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×		Hansch, C., Leo, A.J. (1979) Substituents Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, New York..	p.1123
9	1.19	1.19	25 °C		-	-	-	-	その他,recommended		2B	×		Sangster, J. (1989) Octanol-water partition coefficients of simple organic compounds. J. Phys. Chem. Ref. Data 18, 1111-1230..	p.1123
10 MOE初期評価	1.19	1.19			-	-	-	-	-		2B	×		IPCS (1994) International Chemical Safety Cards.	p.1

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモメタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
11	NITE初期リ スク評価書	1.19	1.19			-	-	-	-	experimental result	-	2B	×	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2005) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY..	p.2
12		1.18	1.18			-	-	-	-	その他(推定 値),推定値	-	4C	×	-	SRC, Syracuse Research Corporation (2005) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY..	p.2
13	PhysProp	1.19	1.19			-	-	-	-	experimental result	-	2B	×	-	HANSCH,C ET AL. (1995).	p.1
14	REACH登録 情報	1.99	1.99	25 °C	[pH - not available]	その他,California Notice 87-6 Arizonz Groundwater Protection Data	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×		1990	Exp Key Partition coefficient.001
15	SIDS	1.94±0.31	1.94	25 °C		その他,FIFRA Guideline 63- 11	no		key study	experimental result		2A	×			p.5, 7, Dossier p.60
16	既存点検事業	1.08	1.08	25±1 °C		その他,昭和 63年3月11日 付け63基第98 号別添に定め られた方法に よる	-	-	-	experimental result	-	4A	○	-		K0171

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	0.013 atm・m ³ /mol	1317.225			-	-	-	-	2B	×		Lyman WJ, Reehl WF, Rosenblatt DH. 1982. Handbook of chemical property estimation methods: Environmental behavior of organic compounds. New York, NY: McGraw-Hill Book Company..	p.53
2	0.197 atm・m ³ /mol	19961.025			-	-	-	-	2B	×		Mabey et al. 1982.	p.53
3 CRC	0.63 kPa m ³ /mol	630			-	-	-	-	2B	×		Mackay, D., Shiu, W. Y., and Ma, K. C., Illustrated Handbook of Physical- Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Vol. III, Lewis Publishers/CRC Press, Boca Raton, FL, 1993..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
4 EHC	0.533 kPa・m ³ /mol	533			-	-	estimated by calculation	-	4C	×	calculated using atmospheric pressure	Windholz M (1983) The Merck index, 10th ed. Rahway, New Jersey, Merck & Co., Inc., p 865..	2.2.1 Physical properties Table 1
5 EPI Suite	617 Pa・m ³ /mol	617					(Q)SAR		2C	×			
6 HSDB	7.34E-3 atm・m ³ /mol	743.7255							2B	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
7 IUCLID	6.24E-3 atm・m ³ /mol	632.268							4A	×			p.11
8 Mackay	631 Pa・m ³ /mol	631			-	-	-	-	2B	×	631*; 621 (exptl.-concn ratio, measured range 5–80°C; calculated-P/C, Glew & Moelwyn-Hughes 1953) log {H/(mmHg・L/mol)} = 73.022 – 22.261・log (T/K) – 4254.8/(T/K); temp range 278.16–253.16 K (Glew & Moelwyn-Hughes 1953)	Glew, D.N., Moelwyn-Hughes, E.A. (1953) Chemical statics of the methyl halides in water. Disc. Faraday Soc. 15, 150–161..	p.1123
9	687.4 Pa・m ³ /mol	687.4			-	-	その他(推定値), computed value	-	4C	×		Yaws, C.L., Yang, J.C., Pan, X. (1991) Henry's law constants for 362 organic compounds in water. Chem. Eng. November, 179–185..	p.1123
10	204 Pa・m ³ /mol	204			-	-	-	-	2B	×	204, 515 (0, 22°C, distilled water, headspace-GC, Elliott & Rowland 1993)	Elliott, S., Rowland, F.S. (1993) Nucleophilic substitution rates and solubilities for methyl halides in seawaters. Geophys. Res. Lett. 20, 1043–1046..	p.1123

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
11	515 Pa・m ³ /mol	515			-	-	-	-	2B	×	204, 515 (0, 22°C, distilled water, headspace-GC, Elliott & Rowland 1993)	Elliott, S., Rowland, F.S. (1993) Nucleophilic substitution rates and solubilities for methyl halides in seawaters. Geophys. Res. Lett. 20, 1043-1046..	p.1123
12	596 Pa・m ³ /mol	596			-	-	-	-	2B	×	-	De Bruybn W.J., Saltzman, E.S. (1997) The solubility of methyl bromide in pure water, 35‰ sodium chloride and seawater. Marine Chem. 56, 51-57..	p.1123
13	490 Pa・m ³ /mol	490			-	-	その他,selected from reported experimental determined values	-	2B	×	490 (20°C, selected from reported experimental determined values, Staudinger & Roberts 2001) log K _{AW} = 3.468 - 1221/(T/K) (summary of literature data, Staudinger & Roberts 2001)	Staudinger, J., Roberts, P.V. (2001) A critical compilation of Henry's law constant temperature dependence relations for organic compounds in dilute aqueous solutions. Chemosphere 44, 561-576..	p.1123
14	621 Pa・m ³ /mol	621			-	-	estimated by calculation	calculated-P/C	4C	×	631*; 621 (exptl.-concn ratio, measured range 5-80°C; calculated-P/C, Glew & Moelwyn-Hughes 1953) log {H/(mmHg・L/mol)} = 73.022 - 22.261・log (T/K) - 4254.8/(T/K); temp range 278.16-253.16 K (Glew & Moelwyn-Hughes 1953)	Glew, D.N., Moelwyn-Hughes, E.A. (1953) Chemical statics of the methyl halides in water. Disc. Faraday Soc. 15, 150-161..	p.1123
15	733 Pa・m ³ /mol	733			-	-	-	-	2B	×	-	Swain, C.G., Thornton, E.R. (1962) Initial-state and transition-state isotope effects of methyl halides in light and heavy water. J. Phys. Chem. 66, 822-826..	p.1123
16	652 Pa・m ³ /mol	652			-	-	その他(推定値),calculated as 1/K _{AW} , C _{W/C_A} , reported as exptl.	-	4C	×	652 (calculated as 1/K _{AW} , C _{W/C_A} , reported as exptl., Hine & Mookerjee 1975)	Hine, J., Mookerjee, P.K. (1975) The intrinsic hydrophilic character of organic compounds. Correlations in terms of structural contributions. J. Org. Chem. 40, 292-298..	p.1123
17	533 Pa・m ³ /mol	533			-	-	estimated by calculation	calculated-P/C	4C	×	-	Mackay, D., Shiu, W.Y. (1981) A critical review of Henry's law constants for chemicals of environmental interest. J. Phys. Chem. Ref. Data 10, 1175-1199..	p.1123

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

ヘンリー係数

収集データ

	情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
18		19958 Pa・m ³ /mol	19958			-	-	estimated by calculation	calculated-P/C	4C	×		Mabey, W., Smith, J.H., Podoll, R.T., Johnson, H.L., Mill, T., Chiou, T.W., Gate, J., Waight-Partridge, I., Jaber, H., Vandenberg, D. (1981-1982) Aquatic Fate Process for Organic Priority Pollutants. EPA Report, No.440/4-81-14..	p.1123
19		1317 Pa・m ³ /mol	1317			-	-	estimated by calculation	calculated-P/C	4C	×		Thomas, R.G. (1982) Volatilization from water. Chapter 15. In: Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Environmental Behavior of Organic Compounds. Lyman, W.J., Reehl, W.F., Rosenblatt, D.H., Editors, McGraw-Hill, New York..	p.1123
20		20260 Pa・m ³ /mol	20260			-	-	-	-	2B	×	20260 (20-25°C and low ionic strength, Pankow & Rosen 1988; Pankow 1990)	Pankow, J.F., Rosen, M.E. (1988) The determination of volatile compounds in water by purging directly to a capillary column with whole column cryotrapping. Environ. Sci. Technol. 22, 398-405..	p.1123
21		10690 Pa・m ³ /mol	10690			-	-	estimated by calculation	calculated-P/C	4C	×		Mackay, D., Shiu, W.Y. (1990) Physical-chemical properties and fate of volatile organic compounds: An application of the fugacity approach. pp.183-204. In: Significance and Treatment of Volatile Organic Compounds in Water Supplies. Ram, N.M., Christman, R.F., Cantor, K.P., Editors, Lewis Publishers Inc., Chelsea, MI..	p.1123
22	NITE初期リス ク評価書	632 Pa・m ³ /mol[632 Pa・m ³ /mol (6.24×10 ⁻³ atm・m ³ /mol)]	632			-	-	その他(推定 値),推定値	-	4C	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2005) HenryWin Estimation Software, ver. 3.10, North Syracuse, NY..	p.2
23	PhysProp	0.00734 atm・ m ³ /mol	743.7255			-	-	experimental result	-	2B	○		YATES,SR & GAN,J (1998).	p.1
24	SIDS	0.00624 atm・ m ³ /mol	632.268			-	key study	estimated by calculation	Calculated using atmospheric pressure	4C	×			p.7, Dossier p.64

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモetan(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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IIにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	logKoc	0.77	5.888436554			-	-	-	-	-	-	-	2B	×		Mabey WR, Smith JH, Podoll RT, et al. 1982. Aquatic fate process data for organic priority pollutants. Report to U.S. Environmental Protection Agency, Office of Water Regulations and Standards, Washington, DC, by SRI International, Menlo Park, CA. EPA 440/4-81-014..	p.53
2 EPI Suite	Koc	48.23 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定 (2C) 1	48.23				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×			
3 HSDB	Koc	9~22	15.5										2B	×			ENVIRONMENTAL FATE:
4 IUCLID	Koc	172	172			Naaldwijk loamy sand							4A	○			p.16
5	Koc	174	174			Aalsmeer loam							4A	○			p.16
6	Koc	164	164			Boskoop peaty clay							4A	○			p.16
7	Koc	106	106								その他(推定 値)		4A	×			p.16
8 Mackay	logKoc	2.215	164.0589773			Boskoop peaty clay							2B	○	2.236, 2.241, 2.215 (Naaldwijk loamy sand, Aalsmeer loam, Boskoop peaty clay, Howard 1989)	Howard, P.H., Editor (1989) Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. Vol. I, Large Production and Priority Pollutants. Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan..	p.1123
9	logKoc	2.236	172.1868575			Naaldwijk loamy sand							2B	○	2.236, 2.241, 2.215 (Naaldwijk loamy sand, Aalsmeer loam, Boskoop peaty clay, Howard 1989)	Howard, P.H., Editor (1989) Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. Vol. I, Large Production and Priority Pollutants. Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan	p.1123
10	logKoc	2.241	174.1806873			Aalsmeer loam							2B	○	2.236, 2.241, 2.215 (Naaldwijk loamy sand, Aalsmeer loam, Boskoop peaty clay, Howard 1989)	Howard, P.H., Editor (1989) Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. Vol. I, Large Production and Priority Pollutants. Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan	p.1123
11	logKoc	0.771	5.902010802			sediment- water					estimated by calculation	calculated-K_OW		×		Mabey, W., Smith, J.H., Podoll, R.T., Johnson, H.L., Mill, T., Chiou, T.W., Gate, J., Waight- Partridge, I., Jaber, H., Vandenberg, D. (1981-1982) Aquatic Fate Process for Organic Priority Pollutants. EPA Report, No.440/4-81-14.	p.1123

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモetan(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

◀ 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IIにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
12	logKoc	2.1	125.8925412			-	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-S	4C	×		Lyman, W.J. (1982) Atmospheric residence time. Chapter 10. In: Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Lyman, W.J., Reehl, W.F., Rosenblatt, D.H., Editors, McGraw-Hill Book Company, New York..	p.1123
13	NITE初期リス ク評価書	Koc	14	14		-	-	-	-	-	その他(推定 値),推定値	-	4C	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2005) PcKocWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY..	p.2
14	SIDS	Koc	172	172		Naaldwijk loamy sand				その他,?			2B	○			Dossier p.63
15		Koc	174	174		Aalsmeer loam				その他,?			2B	○			Dossier p.63
16		Koc	164	164		Boskoop peaty clay				その他,?			2B	○			Dossier p.63
17		logKoc	2.1	125.8925412							その他(推定 値)	based on a measured water solubility of 9.5 x 10 ⁻³	2B	×			Dossier p.63

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモタン(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
1 NITE初期リスクリスク評価書	その他	[解離基なし]				-	-	-	-	-				p.2
2 既存点検事業	pK	[解離しないと判定された]				その他,昭和63年3月11日付け63基第98号別添に定められた方法による	-	-	-	-				K0171

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモメタン(別名臭化メテル)
CAS番号	74-83-9

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	17%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		-	通商産業公報(1991年12月27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
2	not readily biodegradable	15%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result		-	通商産業公報(1991年12月27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
3 既存点検事業		15%	O_2 consumption		OECD TG 301D	-	-	-	experimental result		-		K0171
4		17%	O_2 consumption		OECD TG 301D	-	-	-	experimental result		-		K0171

基本情報

優先評価化学物質通し番号	9
物質名称	プロモetan(別名臭化メチル)
CAS番号	74-83-9

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IIおけ るキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1			BCF		8.851 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C)]	8.851	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	×			
2 SIDS					BCF		測定した logPow=1.1 0を用いて推 計	4.7					estimated by calculation		2C	×		Lyman, W.J., Reehl, W.F., Rosenblatt, D.H, 1982. Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Environmental Behavior of Organic Compounds, McGraw - Hill, New York.	
3 NITEカテゴリー アプローチ							3.16 L/kg	3.16					評価IIでカテ ゴリーアプロ ーチ		2C	○	logBCF<0.5となったことか ら、logBCF=0.5(BCF=3.16) とした。		
4 NITE初期リス ク評価書					BCF		logPow=1.0 8での推計	1.4	BCFWIN				estimated by calculation		2C	×		SRC:BcfWin,2005	