

(案)

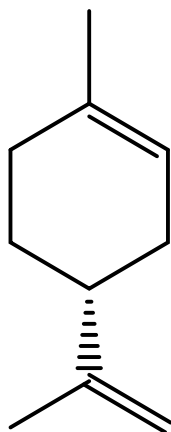
## 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

### 生態影響に係る評価Ⅱ

#### 物理化学的性状等の詳細資料

## (R)－4－イソプロペニル－1－メチルシクロ ヘキサー1－エン(別名d－リモネン)

優先評価化学物質通し番号 130



平成 30 年 1 月

経済産業省

## 目 次

21		
22		
23	1 評価対象物質の性状.....	3
24	1 - 1 物理化学的性状及び濃縮性 .....	3
25	1 - 2 分解性 .....	7
26	2 【付属資料】 .....	10
27	2 - 1 物理化学的性状等一覧.....	10
28	2 - 2 その他 .....	11
29		
30		

## 1 評価対象物質の性状

本章では、5 章の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

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

表 1-1 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	—	136.24	—	136.24
融点	°C	<u>-74<sup>2)</sup></u>	測定値	-73.8 <sup>1)</sup>
沸点	°C	<u>177<sup>2)</sup></u>	測定値	177.7 <sup>3)</sup>
蒸気圧	Pa	<u>200</u>	信頼性の定まった情報源 <sup>2)3)4)</sup> から得られた 5 つのデータの算術平均値	190.7 <sup>2)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	<u>12.9</u>	25 °C における測定値 <sup>2)5)6)</sup> を 20 °C に補正した値	11.5 <sup>1)</sup>
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	<u>4.57<sup>2)6)7)</sup></u>	25 °C, 測定値	4.83 <sup>1)</sup>
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	2,850	25 °C における測定値 <sup>6)</sup> を単位換算した値	2,850
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	<u>5,200</u>	信頼性の定まった情報源に記載の推定値 <sup>1)8)</sup> 及び本書で採用した logPow を用いた推定値 <sup>9)</sup> の平均値	2,900 <sup>7)</sup>
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	<u>1,230</u>	カテゴリーアプローチによる推計 <sup>10)</sup>	714
生物蓄積係数(BMF)	—	<u>2</u>	logPow と BCF から推定 <sup>11)</sup>	2
解離定数(pKa)	—	—	解離性の基を有さない物質	— <sup>12)</sup>

- 1) ECHA
- 2) USHPV (2009)
- 3) CRC (2013)
- 4) Mackay (2006)
- 5) IUPAC
- 6) PhysProp
- 7) CICAD (1998)
- 8) HSDB (2009)
- 9) KOCWINv2.00
- 10) NITE (2009)
- 11) MHLW, METI, MOE (2014)
- 12) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

① 融点

評価 I で用いたデータ(-73.8 °C)は、ECHA の 2 つのキースタディで、共に OECD TG 102 の試験方法を用いた reliability (2) (valid with restrictions、以下同じ) のデータ(-73.97 °C 及び -73.65 °C)の算術平均値である。しかしながら、当該情報源は信頼性の定まった情報源<sup>1</sup>からデータを得られず、推計も行えなかった場合に必要に応じて追加する情報源とされている。信頼性の定まった情報源を確認したところ、USHPV(2009)において測定値(-74 °C)が採用されているため、評価 II においてはこの値 (-74 °C) を用いる。

② 沸点

評価 I で用いたデータ(177.7 °C)は、CRC(2013)に記載された標準圧力 (101.3 kPa) でのデータであるが、測定値であるとの記載がされていない。他の信頼性が定まった情報源では、USHPV(2009)において測定値の範囲(175 °C~179 °C)の中央値 (177 °C)が採用されているため、評価 II においてはこの値 (177 °C) を用いる。

③ 蒸気圧

評価 I で用いたデータは、USHPV(2009)に記載された 20 °Cにおける測定値(190.7 Pa)である。他の信頼性が定まった情報源では、様々な温度における蒸気圧の値のテーブル (CRC (2013))、及び、測定値に基づいた、適用範囲に 20 °Cを含む回帰式 (Mackay(2006))が複数記載されている。これらから得られる 20 °Cにおける蒸気圧計算値は、200 Pa (CRC(2013))、203.6 Pa、204 Pa、145 Pa、191.5 Pa (Mackay(2006))であった。これらの値を求めるための各回帰式をプロットし比較したところ、145 Pa を求めた回帰式のみ傾向が一致せず、また同じ文献<sup>2</sup>に掲載された 204Pa の回帰式の標準偏差が 1.0 であるのに対し、145Pa の回帰式の標準偏差は 1.0~5.0 でありばらつきが大きいことが分かった。したがって、評価 II においては上記の値より 145Pa を除外した 5 つの値の算術平均値 (200 Pa) を用いる。

④ 水に対する溶解度

評価 I で用いたデータ(11.5 mg/L)は ECHA のキースタディで、OECD TG 105 の試験方法を用いた reliability (2)の 25 °Cの測定値を 20 °Cに換算した値である。信頼性が定まった情報源では IUPAC、PhysProp 及び USHPV(2009)において測定値 13.8 mg/L (25 °C)が採用されている。また、CICAD(1998)及び HSDB(2009)も 13.8 mg/L(25 °C)を採用しており文献情報が IUPAC 及び PhysProp と合致するため、同じ測定値であると判断できる。評価 II においてはこの値(13.8 mg/L(25 °C))を 20 °Cに補正した 12.9 mg/L を用いる。

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

<sup>2</sup> Richard M. Stephenson, Stanislaw Malanowski(1987) Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds, Properties of Organic Compounds, 332

⑤ logPow

評価Ⅰで用いたデータ(4.83)は、ECHA のキースタディで、OECD TG 117 の試験方法を用いた reliability (2)の 37 °C、pH7.2 における測定データであるが、ECHA のウェブサイトを確認したところ、4.38 の間違いであることがわかった。4.83 は EPI Suite において KOWWIN の推計値として、4.38 は Mackay(2009)において RP-HPLC 法で測定された値として記載されており、ECHA の採用値と Mackay(2009)に記載されている値の文献名は同一である。信頼性が定まった情報源では、PhysProp、USHPV(2009)において 25°Cの測定値として 4.57 が採用されている。また、HSDB(2009)も 4.57 を採用しており文献情報が合致するため、同じ測定値であると判断できる。そのため、評価Ⅱにおいては、この値(4.57)を用いる。

⑥ ヘンリー係数

評価Ⅰで用いたデータ(2,850 Pa・m<sup>3</sup>/mol)は、PhysProp に記載された 25 °Cにおける測定値(0.0281 atm・m<sup>3</sup>/mol)を単位換算した値である。他の信頼性が定まった情報源のうち、測定値であることが明記されているものに USHPV(2009)のデータ(0.032 atm・m<sup>3</sup>/mol)があるが、その引用元は PhysProp とされている。最新の PhysProp における値を確認したところ、評価Ⅰで採用した 0.0281 atm・m<sup>3</sup>/mol であることが確認された。したがって、評価Ⅱにおいても 2,850 Pa・m<sup>3</sup>/mol を用いる。

⑦ Koc

評価Ⅰで採用した CICAD(1998)の値(2,900 L/kg)は推定値の範囲(1,030 L/kg～4,780 L/kg)の中央値である。推定に用いたとされている水溶解度(13.8 mg/L(25 °C))は、本書の④水に対する溶解度における採用値であるが、logPow(4.23)は本書の⑤において採用していない。他の信頼性が定まった情報源においても測定値は記載されておらず全て推計値であり、それぞれ 15,540 L/kg (EPI Suite)、1,300 L/kg (HSDB(2009))、1,984 L/kg (ECHA)、6,324 L/kg (ECHA)、1,120 L/kg (ECHA)、1,259 L/kg (USHPV(2009))であった。このうち、15,540 L/kg (EPI Suite)及び 6,324 L/kg (ECHA)は本書の⑤において不採用とした logPow である 4.83 及び 4.38 を用いた推計値であり、1,984 L/kg は非疎水性物質に対する式を用い logPow 4.38 を用いた推計値である。また 1,259 L/kg (USHPV(2009))は推計に用いた KOCWIN が古いことが分かったため CICAD(1998)の推計値とともに除外する。残った値のうち、1,300 L/kg (HSDB(2009))及び 1,120 L/kg (ECHA) は MCI 法により構造から推定した値である。また、KOCWINv2.00 を用いて本書の⑤logPow の採用値(4.57:測定値)より推定した値は、9,250 L/kg となった。そのため、評価Ⅱにおいては、MCI 法を用いた推定値である 1,300 L/kg と 1,120 L/kg の算術平均値 1,210 L/kg と、logPow 法を用いた推定値である 9,250 L/kg の平均値である 5,200 L/kg を用いることとする。

⑧ BCF

評価Ⅰで採用した BCF は、logPow(4.83)より BCFBAF(EPISuite)を用いて推定した値 (714 L/kg)である。評価Ⅱでは、優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。)に従い NITE カテゴリーアプローチ(カテゴリーⅠ)を用い ⑤logPow で採用した値(4.57)より再推定を行った値 (1,230 L/kg) を用いる。

⑨ BMF

評価Ⅰで採用した BMF は、logPow(4.83)と BCF(714 L/kg)の値から化審法における技術ガイダンスに従って設定した値(2)である。評価Ⅱにおいても、BMF の測定値は得られなかった。また、評価Ⅰより変更となった logPow(4.57)と BCF(1,230 L/kg)の値から設定した技術ガイダンスにおける選定区分も同一であるため、評価Ⅰの値 (2) を用いる。

## 1-2 分解性

下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

表 1-2 分解に係るデータのまとめ

項目			半減期 (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期		NA	
	機序別の 半減期	OH ラジカルとの反応	0.095	21 °Cでの反応速度定数の測定値 <sup>1)</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	0.018	22 °Cでの反応速度定数 <sup>1)</sup> から、オゾン濃度を $7 \times 10^{11}$ molecule/cm <sup>3</sup> として算出
		硝酸ラジカルとの反応	0.0043	22 °Cでの反応速度定数の測定値 <sup>1)</sup> から硝酸ラジカル濃度を $2.4 \times 10^8$ molecule/cm <sup>3</sup> として算出
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	5	化審法の分解度試験データ (41 ~ 98 %) <sup>2)</sup> から生分解半減期へ換算
		加水分解	1,000	加水分解を受ける基を有していないとされている <sup>3,4)</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	5	水中の生分解の半減期と同等であると仮定し、同じ値を採用
		加水分解	1,000	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	20	水中の生分解の半減期に4を乗じた値
		加水分解	1,000	水中加水分解の項参照

1) NIST(2013)

2) MITI(1992)

3) CICAD(1998)

4) HSDB(2009)

NA:情報が得られなかったことを示す

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

### ①大気

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。

#### ① -1 OH ラジカルとの反応の半減期

大気中の OH ラジカルとの反応速度定数データは、NIST(2013)に収載された 21°C (294K) における相対法による測定値の最大値である  $1.69 \times 10^{-10}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s を採用した。評価Ⅱにおける OH ラジカルとの反応の半減期は、上記の 21 °Cにおける反応速度定数データを

155 用い、技術ガイダンスに従い大気中 OH ラジカル濃度を  $5 \times 10^5$  molecule/cm<sup>3</sup> として算出し  
156 た 0.095 日を適用する。

157 なお、その他の情報で 20 °C 付近の測定値としては、25 °C (298 K) における 4 つのデータ  
158 があり、それぞれ  $1.67 \times 10^{-10}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s (相 対 法) (NIST(2013))、 $1.71 \times 10^{-10}$   
159 cm<sup>3</sup>/molecule/s (Physprop)、 $1.70 \times 10^{-10}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s (Howard(1991))、 $1.63 \times 10^{-10}$   
160 cm<sup>3</sup>/molecule/s (Howard(1991))であった。

#### 161 ① -2 オゾンとの反応の半減期

162 大気中のオゾンとの反応速度定数データは、NIST(2013)に収載された 22 °C (295 K) にお  
163 ける直接法による測定値である  $6.49 \times 10^{-16}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s を採用した。評価Ⅱにおけるオ  
164 ゾンとの反応の半減期は、上記の反応速度定数データを用い、技術ガイダンスに従い大気  
165 中オゾン濃度を  $7 \times 10^{11}$  molecule/cm<sup>3</sup> として算出した 0.018 日を適用する。

166 なお、その他の情報で 20 °C 付近の測定値としては、23 °C (296 K) における 3 つのデータ  
167 があり、それぞれ  $2.01 \times 10^{-16}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s (相 対 法) (NIST(2013))、 $2.09 \times 10^{-16}$   
168 cm<sup>3</sup>/molecule/s (相対法) (NIST(2013))、 $6.40 \times 10^{-16}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s (Howard(1991))であっ  
169 た。

#### 170 ① -3 硝酸ラジカルとの反応の半減期

171 大気中の硝酸ラジカルとの反応速度定数データは、NIST(2013)に収載された 22 °C (295  
172 K) における相対法による測定値である  $7.69 \times 10^{-12}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s を採用した。評価Ⅱにお  
173 ける硝酸ラジカルとの反応の半減期は、上記の反応速度定数データを用い、技術ガイダン  
174 スに従い大気中硝酸ラジカル濃度を  $2.4 \times 10^8$  molecule/cm<sup>3</sup> として算出した 0.0043 日を適用  
175 する。

176 なお、その他の情報で 20 °C 付近の測定値としては、25 °C (298 K) における 2 つのデータ  
177 があり、 $1.1 \times 10^{-11}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s (相 対 法) (NIST(2013))、 $1.3 \times 10^{-11}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s  
178 (Howard(1991))であった。

#### 180 ② 水中

181 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  
182 の反応に関する情報が得られた。

#### 183 ② -1 生分解の半減期

184 化審法の分解度試験(標準法)により、14 日間の生物化学的酸素要求量(BOD) 分解度が  
185 41 %、81 %、98 %であるとの結果が得られており(MITI(1992))易分解性と考えられる。評  
186 価Ⅱにおいては、この結果から技術ガイダンスの変換方法に従い得られた生分解半減期で  
187 ある 5 日を用いることとする。

#### 188 ② -2 加水分解の半減期

189 HSDB(2009)及び CICAD(1998)において、リモネンは、加水分解のための官能基を有し  
190 ていないとされている。また、CICAD(1998)において、d-リモネンの加水分解半減期は



191 >1,000 日と推定されている<sup>3</sup>ことが記載されている。

192 このため、評価Ⅱにおいては、水中加水分解による半減期を 1,000 日と設定する。

193

## 194 ③ 土壤

195 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、生分解及び加水分解の機序  
196 別の反応に関する情報が得られた。

196 別の反応に関する情報が得られた。

## 197 ③ -1 生分解の半減期

198 半減期に関するデータは得られなかったため、土壌中での生分解半減期は、技術ガイダ  
199 ンスに従って、水中の生分解半減期と同じ 5 日と設定する。

199      ンスに従って、水中の生分解半減期と同じ 5 日と設定する。

## 200 ③ -2 加水分解の半減期

201 土壌の間隙水中溶存態の加水分解半減期は、水中と同様の 1,000 日を適用する。

202

## 203 ④ 底質

204 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が、生分解及び加水分解の機序  
205 別の反応に関する情報が得られた。

205 別の反応に関する情報が得られた。

## 206 ④ -1 生分解の半減期

207 信頼性の定まった情報源から半減期のデータは得られなかったため、底質中での生分解  
208 半減期は、技術ガイダンスに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 20 日と設定する。

208 半減期は、技術ガイダンスに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 20 日と設定する。

## 209 ④ -2 加水分解の半減期

210 底質の間隙水中溶存態の加水分解半減期は、水中と同様の 1,000 日を適用する。

211

<sup>3</sup> ASTER (Assessment Tool for the Evaluation of Risk) database. Duluth, MN, US Environmental Protection Agency, Environmental Research Laboratory.

## 212 2 【付属資料】

### 213 2 - 1 物理化学的性状等一覧

214 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

215

216 出典)

217 ASTER (Assessment Tool for the Evaluation of Risk) database. Duluth, MN, US

218 Environmental Protection Agency, Environmental Research Laboratory.

219 CICAD(1998): WHO. "LIMONENE", Concise International Chemical Assessment

220 Document. No. 5. 1998. <http://www.who.int/ipcs/publications/cicad/en/cicad05.pdf>

221 CRC(2013): Lide, D. R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 94th ed., CRC

222 Press, 2013-2014.

223 ECHA: ECHA. Information on Chemicals – Registered substances.

224 <http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>,

225 (2015-9-20 閲覧).

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

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

228 Lewis publishers, 1991.

229 HSDB(2009): US NIH. Hazardous Substances Data Bank.

230 <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, (2015-9-20 閲覧).

231 IUPAC: Solubility System: (+)-(R)-P-Mentha-1,8-diene (d-Limonene) with Water

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

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

234 CRC press, 2006.

235 MHLW, METI, MOE(2014): 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

236 タの信頼性評価等について, 2015.

237 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

238 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.

239 MITI(1992): MITI. リモネン (被験物質番号 K-466) の微生物による分解度試験報告書.

240 既存化学物質点検, 1992.

241 NIST(2013): NIST. Chemistry WebBook. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>, (2015-9-20  
242 閲覧).

243 NITE(2009): NITE. カテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測に関する報告書. 2009

244 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2015-9-20 閲覧).

245 Richard M. Stephenson, Stanislaw Malanowski(1987) Handbook of the

246 Thermodynamics of Organic Compounds, Properties of Organic Compounds, 332

247 USHPV(2009): U.S. Environmental Protection Agency. SCREENING-LEVEL HAZARD

248 CHARACTERIZATION Monoterpene Hydrocarbons Category, September, 2009.

249

250 **2 - 2 その他**

251 特になし。

252

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
CICAD	WHO/IPCS:「国際簡潔評価文書(CICAD)」
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, Version 2013, CRC-Press
EHC	WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
EURAR	EU ECB(European Chemicals Bureau):「リスク評価書(EU Risk Assessment Report)」
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUPAC	The IUPAC Solubility Data Series
JCP	Japanチャレンジプログラム
Lange	Lange's Handbook of Chemistry, McGraw-Hill, 2005
Mackay	Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Second Edition
Merck	The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006
MOE初期評価	環境省環境リスク評価室:「化学物質の環境リスク評価」
NITE初期リスク評価書	(独)製品評価技術基盤機構:「化学物質の初期リスク評価書」
NITE有害性評価書	(財)化学物質評価研究機構・(独)製品評価技術基盤機構:「化学物質有害性評価書」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SIDS	OECD: SIDSレポート
SPARC	SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry
USHPV	US/HPVチャレンジプログラム
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果

基本情報

優先通し番号	130000
物質名称	(R)－4－イソプロペニル－1－メチルシクロヘキサ－1－エン(別名d－リモネン)
CAS番号	5989-27-5

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	CICAD	融点	-74.35 °C	-74.35							2B	×			2. IDENTITY AND PHYSICAL/CHEMICAL PROPERTIES
2	CRC	融点	-74.0±0.6 °C	-74							2B	×			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
3		融点	-74 °C	-74							2B	×			33 Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
4	EPI Suite	融点	-40.76 °C	-40.76	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	Melting Point: -65.76 deg C (Adapted Joback Method) Melting Point: -15.77 deg C (Gold and Ogle Method) Mean Melt Pt : -40.76 deg C (Joback; Gold,Ogle Methods) Selected MP: -40.76 deg C (Mean Value)		
5	HSDB	融点	-95.5 °C	-95.5							2B	×		[Lide, D.R., G.W.A. Milne (eds.). Handbook of Data on Organic Compounds. Volume I. 3rd ed. CRC Press, Inc. Boca Raton ,FL. 1994., p. V3: 2307] **PEER REVIEWED**	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
6	IUCLID	融点	-96.9～-89 °C	-92.95		yes					4A	×	Method:other:hhjjhggggg gg GLP:yes Source:ADRIAN SA Marseille		p.6
7	Mackay	融点	-74 °C	-74							2B	×		Lide 2003	p.371
8	PhysProp	融点	-74.3 °C	-74.3							2B	×			
9	REACH登録 情報	融点	199.18 K[± 0.05 K; measured using adiabatic calorimetry ]	-73.97	OECD TG 102	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1B	×		1996	Exp Key Melting point/freezing point.001

基本情報

優先通し番号	130000
物質名称	(R)－4－イソプロペニル－1－メチルシクロヘキサ－1－エン(別名d－リモネン)
CAS番号	5989-27-5

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
10		融点	199.5 K[± 0.5 K; measured using differential scanning calorimetry ]	-73.65	OECD TG 102	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1B	×		1996	Exp Key Melting point/freezing point.001
11	USHPV	融点	-74 °C	-74					experimental result		2B	○			p.8

基本情報

優先評価化学物質通し番号	130000
物質名称	(R)－4－イソプロペニル－1－メチルシクロヘキサ－1－エン(別名d－リモネン)
CAS番号	5989-27-5

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	176～177 ° C	176.5									4A	×			p.1608
2	CICAD	175.5～ 176.0 °C	175.75									4A	×			2. IDENTITY AND PHYSICAL/CHEMICAL PROPERTIES
3	CRC	177.6±0.5 °C	177.6	177.6	760 mmHg							2B	×			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
4		450.8±0.5 K	177.65	177.65	101.325 kPa							2B	×		Smith, R. L., Negishi, E. , Arai, K., and Saito, S..J. Chem. Eng. Jpn..1990,23, 99.	18 Critical Constants of Organic Compounds (Section 6)
5		178 °C	178	178	760 mmHg							2B	×			33 Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15) etc.
6	EPI Suite	167.66 °C	167.66			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	Boiling Point: 167.66 deg C (Adapted Stein and Brown Method)		
7	HSDB	175.5～ 176 °C	175.75	175.5884	763 mmHg							2B	×		[O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition,Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 944] **PEER REVIEWED**	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
8	IUCLID	170～180 ° C	175		1013[単位 記載なし]							4A	×		WEISSMEER BALTISCHA, Inport-Export GmbH Hamburg	p.6
9		175.5～ 178 °C	176.75	176.5873	1017.2686 hPa		yes					4A	×		ADRIAN SA Marseille	p.6
10	Mackay	178 °C	178									4A	×		Weast 1982–83; Lide 2003	p.371
11	PhysProp	176 °C	176									4A	×			
12	REACH登録 情報	175.5～ 176 °C[>= 175.5 <= 176 °C]	175.75	175.5884	763 mmHg		no data	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result		4A	×		O'Neil MJ.2006,O'Neil MJ (ed.) The Merck Index: An encyclopedia of chemicals, drugs, and biologicals. Merck. 14th Edition.	Exp WoE Boiling point.001
13		175.5～ 176.5 ° C[>= 175.5 <= 176.5 ° C]	176	175.8383	763 mmHg		no data	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×		O'Neil MJ.2006,O'Neil MJ (ed.) The Merck Index: An encyclopedia of chemicals, drugs, and biologicals. Merck. 14th Edition.	Read across Subs WoE Boiling point.004

基本情報

優先評価化学物質通し番号	130000
物質名称	(R)－4－イソプロペニル－1－メチルシクロヘキサー1－エン(別名d－リモネン)
CAS番号	5989-27-5

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
14		175.5～ 176.5 ° C[>= 175.5 <= 176.5 ° C]	176	175.8383	763 mmHg		no data	2: reliable with restrictions	weight of evidence	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×		O'Neil MJ.2006,O'Neil MJ (ed.) The Merck Index: An encyclopedia of chemicals, drugs, and biologicals. Merck. 14th Edition.	Read across Subs WoE Boiling point.005
15	USHPV	175～179 ° C	177							experimental result		4A	○			p.8



基本情報

優先評価化学物質通し番号	130000
物質名称	(R)－4－イソプロペニル－1－メチルシクロヘキサー1－エン（別名d－リモネン）
CAS番号	5989-27-5

蒸気圧

収集データ

	情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20℃における蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1	Aldrich	<3 mmHg	399.9671	596.3979	14.4 °C							2B	×			p.1608
2	CICAD	190 Pa	190	190	20 °C							2B	×			2. IDENTITY AND PHYSICAL/CHEMICAL PROPERTIES
3	CRC	1 Pa	1	345.4024	-45 °C					外挿（補 外）		4C	×		TRCVP.Vapor Pressure Database, Version 2.2P, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX..	20 Vapor Pressure (Section 6)
4		10 Pa	10	280.9977	-21 °C					外挿（補 外）		4C	×		TRCVP.Vapor Pressure Database, Version 2.2P, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX..	20 Vapor Pressure (Section 6)
5		100 Pa	100	220.8361	9.1 °C							4A	○（内挿に使用）	9.1℃、48℃、100.4℃の3点を用い内挿した結果、20℃における蒸気圧は203Paとなった。	TRCVP.Vapor Pressure Database, Version 2.2P, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX..	20 Vapor Pressure (Section 6)
6		1 kPa	1000	167.1893	48 °C							4A	○（内挿に使用）	9.1℃、48℃、100.4℃の3点を用い内挿した結果、20℃における蒸気圧は203Paとなった。	TRCVP.Vapor Pressure Database, Version 2.2P, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX..	20 Vapor Pressure (Section 6)
7		10 kPa	10000	120.8882	100.4 °C							4A	○（内挿に使用）	9.1℃、48℃、100.4℃の3点を用い内挿した結果、20℃における蒸気圧は203Paとなった。	TRCVP.Vapor Pressure Database, Version 2.2P, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX..	20 Vapor Pressure (Section 6)
8		100 kPa	100000	84.14065	174.5 °C							4A	×		TRCVP.Vapor Pressure Database, Version 2.2P, Thermodynamic Research Center, Texas A&M University, College Station, TX..	20 Vapor Pressure (Section 6)
9		0.277 kPa	277	196.366	25 °C							2B	×			33 Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
10	EPI Suite	196 Pa[2B 以上の値を用いて推定 (2C)]	196	138.9449	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
11	HSDB	1.98 mmHg	263.9783	187.1349	25 °C							2B	×		[Yaws CL; Handbook of Vapor Pressure. Vol 3: C8-C28 Compounds. Houston,TX: Gulf Pub Co (1994)] **PEER REVIEWED**	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE:
12	IUCLID	2.66644 hPa	266.644	189.0246	25 °C		yes					4A	×		ADRIAN SA Marseille	p.6

基本情報

優先評価化学物質通し番号	130000
物質名称	(R)－4－イソプロペニル－1－メチルシクロヘキサー1－エン（別名d－リモネン）
CAS番号	5989-27-5

蒸気圧

収集データ

	情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20℃にお ける蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
13	Mackay	275.64 Pa	275.64	195.4019	25 °C					experiment al result (corrected)	Antoine eq. regression	2B	×		calculated-Antoine eq. regression, Stull 1947	p.371
14		275.5 Pa	275.5	203.6	25 °C					内挿（補 間）	Antoine eq	4C	○	log (P/mmHg) = [−0.2185 × 10508.4/(T/K)] + 8.016262 ; temp range 14.0–175°C	Antoine eq., Weast 1972–73	p.371
15		2670 Pa	2670	147.3841	68.2 °C							4A	×		68.2°C, Riddick et al. 1986	p.371
16		278 Pa	278	203.8	25 °C					experiment al result (corrected)	Antoine eq.-I, II	2B	○	log (PL/kPa) = 6.81591 – 2075.62/(–16.65 + T/K); temp range 287–448 K dev=1.0	Antoine eq.-I, Stephenson & Malanowski1987	p.371
17		202 Pa	202	145.29	25 °C					experiment al result (corrected)	Antoine eq.-I, II	2B	×	log (PL/kPa) = 7.67098 – 2494.342/(T/K); temp range 288–323 K dev=1.0 to 5.0	Antoine eq.-II, Stephenson & Malanow	p.371
18				191.478							vapor pressure eq		○	log (P/mmHg) = 9.3771 – 2.8246 × 103/(T/K) + 1.0584· log (T/K) – 8.9107 × 10–3· (T/K) + 4.8462 × 10–6· (T/K)2;temp range 199–660 K	vapor pressure eq., Yaws 1994	
19		213 Pa	213	150.9963	25 °C	その他,activity coefficient-GC				estimated by calculation		4C	×		activity coefficient-GC, Fichan et al. 1999	p.371
20	PhysProp	1.98 mmHg	263.9783	187.1349	25 °C					experiment al result		2B	×		YAWS,CL.1994.	
21	REACH登録 情報	200 Pa[Experi mental value]	200	143.2274	298 K		no data	2: reliable with restrictions	key study	experiment al result		4A	×		1999	Exp Key Vapour pressure.001
22	USHPV	1.43 mmHg	190.651	190.651	20 °C					experiment al result		2B	○		記載なし	p.8

基本情報

優先評価化学物質通し番号	130000
物質名称	(R)－4－イソプロペニル－1－メチルシクロヘキサー１－エン（別名 d－リモネン）
CAS番号	5989-27-5

水溶解度

収集データ

	情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1	CICAD	13.8 mg/L	13.8	12.8823888	25 °C								2B	○		Massaldi & King, 1973; Assessment Tool for the Evaluation of Risk (ASTER) database, Environmental Research Laboratory, US Environmental Protection Agency, Duluth, MN, 1991.	2. IDENTITY AND PHYSICAL/CHEMICAL PROPERTIES
2	CRC	[insoluble]	単位換算不可										3	×			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
3		0.01 g/kg	10	13.504259	0 °C								4A	×		Solubility Data Series, International Union of Pure and Applied Chemistry, Vol. 38, Pergamon Press, Oxford.1988.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
4		0.02 g/kg	20	18.6701288	25 °C								2B	×		Fichan, I., Larroche, C., and Gros, J. B..J. Chem. Eng. Data.1999,44, 56.	9 Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
5	EPI Suite	2.098 mg/L[2B以上の値を用いて推定(2C)]	2.098	1.95849651	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
6	HSDB	13.8 mg/L	13.8	12.8823888	25 °C								2B	○		[Massaldi HA, King CJ; J Chem Eng Data 18:393-7 (1973)] **PEER REVIEWED**	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
7	IUCLID	[of very low solubility]	単位換算不可										3	×			p.6
8	IUPAC	1.38E+3 g(1)/100g sln	13.8	12.8823888	25 °C Temperature: ± 0.05° C						experimental result		2B	○		Massaldi, H.A.; King, C.J..J. Chem. Eng. Data.1973,18, 393-7.	Solubility of d-limonene in water
9	Mackay	13.49 mg/L	13.49	12.5930018	25 °C		その他,shake flask-GC				experimental result		2B	×		shake flask-GC, Massaldi & King 1973	p.371
10		13.8 mg/L	13.8	12.8823888	25 °C								2B	×	selected lit.	selected lit., Riddick et al. 1986	p.371
11		20.44 mg/L	20.44	19.0808716	25 °C		その他,shake flask-GC/FID				experimental result		2B	×		shake flask-GC/FID, Fichan et al. 1999	p.371
12	PhysProp	13.8 mg/L	13.8	12.8823888	25 °C						experimental result		2B	○		MASSALDI,HA & KING,CJ.1973.	
13	REACH登録情報	12.3 mg/L[slightly soluble (0.1-100 mg/L)]	12.3	11.4821292	298.15 K	7	OECD TG 105	no data	2: reliable with restrictions	key study			1B	×		2005	Exp Key Water solubility.001
14	USHPV	13.8 mg/L	13.8	12.8823888	25 °C						experimental result		2B	○		記載なし	p.9

基本情報

優先評価化学物質通し番号	130000
物質名称	(R)-4-イソプロペニル-1-メチルシクロヘキサ-1-エン(別名d-リモネン)
CAS番号	5989-27-5

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にお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1	CICAD	4.23	4.23							estimated by calculation		4C	×		Calculated value (US EPA, 1990a, 1994).	2. IDENTITY AND PHYSICAL/CHEMICAL PROPERTIES
2	EPI Suite	4.83	4.83			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
3	HSDB	4.57	4.57									2B	○		log Kow = 4.57[Li J, Perdue EM; Physicochemical properties of selected monoterpenes. Preprints of papers presented at the 209th ACS National Meeting Anaheim, CA April 2-7, 35(1): 134-7 (1995)] **PEER REVIEWED**	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT:
4	Mackay	4.38	4.38			その他,RP- HPLC-RT correlation				estimated by calculation		4C	×		RP-HPLC-RT correlation, Griffin et al. 1999	p.371
5	PhysProp	4.57	4.57	25 °C						experimental result		2B	○		LI,J & PERDUE,EM.1995.	
6	REACH登録 情報	4.83[stand ard error: 0.05]	4.38	37 °C	7.2	OECD TG 117	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1B	×		1999 Log Kow (Exper. database match) = 4.38 GRIFFIN,S ET AL. (1999)	Exp Key Partition coefficient.001
7	USHPV	4.57	4.57							experimental result		2B	○		SRC. The Physical Properties Database (PHYSPROP). Syracuse, NY: Syracuse Research Corporation. Available from http://www.syrres.com/esc/physprop. htm as of December 15, 2008.	p.9

基本情報

優先評価化学物質通し番号	130000
物質名称	(R)-4-イソプロペニル-1-メチルシクロヘキサ-1-エン(別名d-リモネン)
CAS番号	5989-27-5

◀ 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
1	CICAD	Koc	1030~4780	2905								calculated on the basis of the solubility		2B	×		The soil adsorption coefficient (Koc), calculated on the basis of the solubility (13.8 mg/litre at 25°C) and the log octanol/water partition coefficient (4.232), ranges from 1030 to 4780.3 3 Source: Hazardous Substances Data Bank. Bethesda, MD, National Library of Medicine (1995).	5. ENVIRONMENTAL TRANSPORT, DISTRIBUTION, AND TRANSFORMATION
2	EPI Suite	Koc	15540 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定(2C)]	15540				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×		Kow=4.83で推定	
3	HSDB	Koc	1300	1300		k						estimated by calculation		4C	○		Based on a classification scheme(1), an estimated Koc value of 1,300 determined from a structure estimation method(2), indicates that d-limonene is expected to have low mobility in soil(SRC).  (1) Swann RL et al; Res Rev 85:17-28 (1983) (2) Meylan WM et al; Environ Sci Technol 26: 1560-67 (1992)	ENVIRONMENTAL FATE:
4	REACH登録情報	Koc	1984 L/kg	1984			soil	その他,Reach guidance on QSAR - R.6	no	2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR		4C	×		2010,2010.8.31. Koc has been predicted by calculations from experimental Log Kow and using equations of Sabljic and Güsten (1995) for non hydrophobic substances. The Koc of d-limonene predicted from the Log Kow of 4.38 is 1984 L/kg.	QSAR Key Adsorption / desorption.001
5		Koc	6324 L/kg	6324			soil	その他,Reach guidance on QSAR - R.6	no	2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR		4C	×		2010,2010.8.31. Koc has been predicted by KOCWIN v2.00 from EPISUITE 4.0 software. The Koc of d-limonene predicted from the Log Kow of 4.38 is 6324 L/kg.	QSAR Key Adsorption / desorption.002
6		Koc	1120 L/kg	1120			soil	その他,Reach guidance on QSAR - R.6	no	2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR		4C	○		2010,2010.8.31. Koc has been predicted by KOCWIN v2.00 from EPISUITE 4.0 software. The Molecular Connectivity Index method predicted a Koc for d-limonene of 1120 L/kg.	QSAR Key Adsorption / desorption.003

基本情報

優先評価化学物質通し番号	130000
物質名称	(R)-4-イソプロペニル-1-メチルシクロヘキサー1-エン(別名d-リモネン)
CAS番号	5989-27-5

◀ 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
7	USHPV	logKoc	3.1	1258.925412								estimated by calculation		4C	×		USEPA. 2009. Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v4.0. U.S. Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA. <a href="http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuite.htm">http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuite.htm</a> .	p.12
8	EPI Suite	Koc	9245L/kg[2B以上の値を用いて 推定(2C)]	9245				KOCWIN				(Q)SAR		2C	○		Kow=4.57(2B)で推定	

基本情報

優先評価化学物質通し番号	130000
物質名称	(R)-4-イソプロペニル-1-メチルシクロヘキサ-1-エン(別名d-リモネン)
CAS番号	5989-27-5

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Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1	CICAD	34.8 kPa・m <sup>3</sup> /mol	単位換算不可					estimated by calculation		3	×		Calculated value (ENVIROFATE database, Office of Toxic Substances, US Environmental Protection Agency, and Syracuse Research Corporation [SRC], New York, NY, 1995).	2. IDENTITY AND PHYSICAL/CHEMICAL PROPERTIES
2	EPI Suite	2530 Pa・m <sup>3</sup> /mol	2530					(Q)SAR		2C	×			
3	HSDB	0.026 atm・m <sup>3</sup> /mol	2634.45	25 deg C						2B	×		[SRC; The Physical Properties Database (PHYSPROP). Syracuse, NY: Syracuse Res Corp. Available from, as of Feb 10, 2006: http://www.syrres.com/esc/physpr op.htm] **PEER REVIEWED**	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
4	Mackay	2725 Pa・m <sup>3</sup> /mol	2725	25°C				estimated by calculation		4C	×		calculated-P/C from selected data	p.371
5	PhysProp	0.0281 atm・m <sup>3</sup> /mol	2847.2325	25 deg C				experimental result		2B	○		COPOLOVICI,LO & NIINEMETS,U.2005.	
6	USHPV	0.032 atm・m <sup>3</sup> /mol	3242.4					experimental result		2B	×		SRC. The Physical Properties Database (PHYSPROP). Syracuse, NY: Syracuse Research Corporation. Available from http://www.syrres.com/esc/physpr op.htm as of December 15, 2008.	p.9

基本情報

優先評価化学物質通し番号	130000
物質名称	(R)－4－イソプロペニル－1－メチルシクロヘキサ－1－エン(別名d－リモネン)
CAS番号	5989-27-5

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
------	----	---	------	------------	----	-------	-----	-------------	--------------------------	------	---------	----	----	--------



基本情報

優先評価化学物質通し番号	130000
物質名称	(R)－4－インプロペニル－1－メチルシクロヘキサ－1－エン(別名d－リモネン)
CAS番号	5989-27-5

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	CICAD	readily biodegradable	41～98 %	O_2 consumption		OECD TG 301C				experimental result			However, limonene was readily biodegradable (41-98% degradation by biochemical oxygen demand in 14 days) under aerobic conditions in a standard test (OECD 301 C "Modified MITI Test (I)";OECD, 1981) (MITI, 1992).  Also, in a test simulating aerobic sewage treatment (OECD 303 A "Simulation Test - Aerobic Sewage Treatment:Coupled Units Test"; OECD, 1981), limonene disappeared almost completely (>93.8%) during 14 days of incubation(Schwartz et al.,	5. ENVIRONMENTAL TRANSPORT, DISTRIBUTION, AND TRANSFORMATION
2	REACH登録情報		80%	O_2 consumption		OECD TG 301D	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			2010,2010.7.15.	Read across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.003
3			41～98 %[>= 41 <= 98]	O_2 consumption		OECD TG 301C	no data	4: not assignable	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			MITI.Biodegradation and bioconcentration of existing chemical substances under the chemical substances control law.1980,Ministry of International Trade and Industry.	Read across Subs Supporting Biodegradation in water: screening tests.004
4	USHPV	readily biodegradable	41～98 %			OECD TG 301C				experimental result			3National Institute of Technology and Evaluation. 2002. Biodegradation and Bioaccumulation of the Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law. <a href="http://www.safe.nite.go.jp/english/kizon/KIZON_start_hazkizon.html">http://www.safe.nite.go.jp/english/kizon/KIZON_start_hazkizon.html</a> .	p.10-12
5	既存点検事業		98%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result			1992	K0466
6			81%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result			1992	K0466
7			41%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result			1992	K0466

基本情報

優先評価化学物質通し番号	130000
物質名称	(R)-4-イソプロペニル-1-メチルシクロヘキサ-1-エン(別名d-リモネン)
CAS番号	5989-27-5

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にお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite		1			BCF		714.2 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C)]	714.2	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	×			
2	NITEカテゴリ アプローチ		2			BCF		1226L/kg [2B以上の 値を用いて 推定(2C)]	1226.0	技術ガイダンス 式 I -1(カテ ゴリー I)						2C	○		logBCF=1.05×logPow-1.71	