平成29年度経済産業省委託業務

平成２９年度化学物質安全対策
（化管法指定化学物質候補物質の有害性情報
に関する調査）
報告書

平成 **29** 年 **8** 月

一般財団法人 化学物質評価研究機構

目次

1. はじめに 1
2. 調査内容と方法 1
2.1. 対象物質 1
2.2. 情報源 2
2.3. 調査の優先順位 2
2.4. 選定基準 5
2.5. 対象有害性等 5
2.3. データ記録 5
3. 収集データの結果 6
4. 添付資料 8

1. はじめに

特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律（以下、「化管法」）及び関係法令に関して、平成 29 年度から見直し検討を行うこととしており、政令で指定されている第一種指定化学物質及び第二種指定化学物質についても、最新の有害性情報等を踏まえて見直しを行う予定である。

このため、平成 29 年度上半期において、国内外で規制されている化学物質のうち、現行化管法指定物質でもなく、かつ、これまで GHS 分類がなされていないため有害性情報が不明である化学物質について、有害性情報の調査を行った。

2. 調査内容と方法

本事業については、経済産業省が指定する化学物質の有害性情報の調査を実施する。具体的には以下の条件と方法で、有害性情報の調査を実施した。

2.1. 対象物質

本事業の対象物質は、経済産業省が指定する 73 物質とした（表 1 に調査対象物質の CAS 番号を示す。）

表 1　調査対象物質の CAS 番号

No	CAS 番号	No	CAS 番号	No	CAS 番号	No	CAS 番号
1	335-57-9	19	100-25-4	37	53496-15-4	55	12340-04-4
2	307-34-6	20	7550-45-0	38	1300-21-6	56	13494-98-9
3	127-95-7	21	11104-93-1	39	13746-89-9	57	16469-22-0
4	127-96-8	22	64742-88-7	40	72854-21-8	58	23363-14-6
5	553-91-3	23	5436-43-1	41	1314-61-0	59	463-82-1
6	814-95-9	24	3194-55-6	42	1185-57-5	60	591-24-2
7	1126-78-9	25	134237-50-6	43	7720-78-7	61	20324-32-7
8	6047-25-2	26	134237-51-7	44	75-83-2	62	5503-41-3
9	6575-07-1	27	134237-52-8	45	79-29-8	63	12036-35-0
10	12231-98-0	28	29457-72-5	46	108-08-7	64	12081-16-2
11	13268-42-3	29	2052-07-5	47	464-06-2	65	12192-97-1
12	14402-67-6	30	2113-57-7	48	565-59-3	66	13569-65-8
13	16588-02-6	31	564-02-3	49	589-34-4	67	13845-07-3
14	25869-00-5	32	565-75-3	50	590-35-2	68	14972-02-2
15	37265-86-4	33	589-53-7	51	591-76-4	69	15336-18-2
16	812-04-4	34	589-81-1	52	556-28-5	70	15492-38-3
17	354-23-4	35	1067-08-9	53	10025-94-2	71	65980-78-1

No	CAS 番号	No	CAS 番号	No	CAS 番号	No	CAS 番号
18	2300-66-5	36	8048-07-5	54	10361-92-9	72	67859-71-6
						73	81044-09-9

2.2. 情報源

平成 20 年 6 月の「特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律に基づく第一種指定化学物質及び第二種指定化学物質の指定の見直しについて（答申）」（以下「平成 20 年度答申」）にある別表 1「有害性情報の収集・整理のための情報源」の中の「今回の対象物質選定に用いた情報源」を基本とした。

ただし、この平成 20 年度答申の中の「Priority-1」及び「Priority-2」の情報源（それぞれ、「優先順位 1」及び「優先順位 2」）は、「政府向け GHS 分類ガイダンス（平成 25 年度改訂版（Ver.1.1））」の「List1」及び「List2」に読み替えるものとした。

有害性項目ごとに調査対象となる情報源を表 2 に整理した。

2.3. 調査の優先順位

原則として、「優先順位 1」（List1 に相当）の情報源で情報が得られなかった場合には、「優先順位 2」（List2 に相当）の情報源の調査を行った。クラスを付与するためのキースタディ候補は「優先順位 1」（List1 に相当）と「優先順位 2」（List2 に相当）の情報源の両方に試験結果がある場合には、毒性値の大小によらず、「優先順位 1」の試験結果を優先的に採用したが、生態毒性で水溶解度を超える毒性値などの場合は情報源の優先順位どおりに優先しないで採用した。

表 2　有害性項目ごとに調査対象となる主な情報源*

優先順位	情報源	発がん性	変異原性	生殖発生毒性	慢性毒性（吸入/経口経路）	感作性(気道感作性)	慢性生態毒性（水生環境有害性）
1	CERI/NITE 化学物質の初期リスク評価書		○	○	○	○	○
	厚労省試験報告「化学物質毒性試験報告」化学物質点検推進連絡協議会（既存化学物質毒性データベース(JECDB)に対応）		○	○	○	○	
	環境省化学物質の環境リスク評価		○	○	○	○	○
	OECD SIDS レポート（SIDS Initial Assessment Report）		○	○	○	○	○
	WHO/IPCS 環境保健クライテリア（EHC）		○	○	○	○	○
	WHO/IPCS 国際化学物質簡潔評価文書（CICAD）		○	○	○	○	○
	ACGIH Documentation of the threshold limit values for chemical substances（化学物質許容濃	○	○	○	○	○	

優先順位	情報源	発がん性	変異原性	生殖発生毒性	慢性毒性（吸入/経口経路）	感作性(気道感作性)	慢性生態毒性（水生環境有害性）
	度文書） (7th edition, 2001) （2012 supplement, 2012)及び “TLVs and BEIs”（ACGIH、毎年発行）						
	DFG MAK Collection for Occupational Health and Safety, MAK Values Documentations 及び List of MAK and BAT values（毎年発行）		○	○	○	○	
	EU リスク評価書（EU Risk Assessment Report：EU RAR）		○	○	○	○	○
	CEPA Assessment Report Environment Canada		○	○	○	○	○
	NICNAS Priority Existing Chemical Assessment Reports		○	○	○	○	○
	ECETOC Technical Report / JACC Report		○	○	○	○	
	ECETOC Technical Report シリーズ・TR91(Aquatic Hazard AssessmentⅡ)（TR91）						○
	Patty’s Toxicology (6th edition, 2012)（Patty）		○	○	○	○	
	IARC Monographs Programme on the Evaluation of Carcinogenic Risk to Humans（IARC Monographs）	○	○	○	○	○	
	米国 EPA Integrated Risk Information System（IRIS）		○	○	○	○	
	NTP Database Search Home Page		○	○	○	○	
	日本産業衛生学会（JSOH、日産衛）許容濃度提案理由書及び許容濃度等の勧告（毎年発行）	○	○	○	○	○	
	NTP Report on Carcinogens (12th,2011）	○					
	米国国家毒性プログラム（NTP）発がん性テクニカルレポート	○					
	ATSDR Toxicological Profile		○	○	○	○	
	厚生労働省労働安全衛生法第 28 条第 3 項の規定に基づく健康障害を防止するための指針に関する公示		○	○	○	○	
	FAO/WHO Joint Expert Committee on Food Additives - Monographs（JECFA モノグラフ（食品添加物等））（JECFA Monographs）		○	○	○	○	
	FAO/WHO Joint Meeting on Pesticide Residues - Monographs of toxicological evaluations（JMPR モノグラフ（残留農薬））（JMPR Monographs）		○	○	○	○	
	EPA Pesticides “Reregistration Eligibility Decision”		○	○	○	○	○
	US HPVIS High Production Volume Information System (HPVIS)		○	○	○	○	
	日本バイオアッセイ研究センター　厚生労働	○					

優先順位	情報源	発がん性	変異原性	生殖発生毒性	慢性毒性（吸入/経口経路）	感作性(気道感作性)	慢性生態毒性（水生環境有害性）
	省委託がん原性試験結果						
	環境省化学物質の生態影響試験について						○
	WHO/FAO Pesticide Data Sheets（PDSs）						○
2	EU European Chemicals Bureau (ECB：欧州化学品局) International Uniform Chemical Information Database (IUCLID) IUCLID CD-ROM (Update 版 Edition 2 - 2000)		○	○	○	○	○
	米国国立医学図書館（NLM）Hazardous Substance Data Bank（HSDB）		○	○	○	○	○
	German Chemical Society-Advisory Committee on Existing Chemicals of Environmental Relevance BUA Report（BUA）		○	○	○	○	○
	農林水産省消費技術安全センター　農薬抄録及び評価書		○	○		○	
	農薬工業会　農薬安全性情報（公開情報一覧）		○	○	○	○	
	内閣府食品安全委員会　食品健康影響評価		○	○	○	○	
	厚労省既存添加物の安全性の見直しに関する調査研究		○	○	○	○	
	Aquatic Toxicity Information Retrieval（AQUIRE）						○

○：調査対象

*：上記以外の平成 20 年度答申のみに記載されている情報源は以下であり、こちらに対しても調査を実施した。

・厚労省：「労働安全衛生法有害性調査制度に基づく既存化学物質変異原性試験データ集」

・WHO 飲料水質ガイドライン

・EPA 水質クライテリア（飲料水基準）

・日本の水質汚濁に係る環境基準値と要監視項目指針値

・WHO 欧州地域事務局大気質ガイドライン

・日本の大気汚染に係る環境基準値

・登録農薬 ADI

・EU リスク警句（EHC、BUA、ECETOC、SIDS 等で根拠となるデータがある場合）

・日産衛（気道感作性第 1、2 群）

・ACGIH （EHC、BUA、ECETOC、SIDS 等で根拠となるデータがある場合）

・環境省において実施して評価した生態影響試験報告

・日本において登録されている農薬に関する公表データ

2.4. 選定基準

選定基準は、平成 20 年度答申の参考資料である「PRTR 及び MSDS 対象化学物質の選定基準の詳細」の基準を用いることとした。

ただし、「PRTR 及び MSDS 対象化学物質の選定基準の詳細」に記載されている生殖発生毒性、感作性及び生態毒性については、EU リスク警句を用いた分類クラス判断が使用されているが、EU リスク警句は、現在、CLP 規則に移行している。そこで、政府向け GHS 分類ガイダンス（平成 25 年度改訂版（Ver.1.1））の「従来の分類システムとの比較」の項を確認し、EU リスク警句の分類カテゴリーに相当する CLP の分類カテゴリーに読み替え、カテゴリーを確認した上で、そのカテゴリーに相当する有害性情報を指定情報源から調査することとした。

2.5. 対象有害性等

本調査では、表 3 に示す 対象有害性項目を対象とするが、感作性は気道感作性のみ、生態毒性は水生環境有害性のみの調査であり、オゾン層破壊物質は調査対象外とした。また、化管法対象物質を選定するための有害性データに関する情報源について、最新の科学的知見を踏まえた情報源に更新した。

なお、生態毒性等の有害性情報は、水溶解度を超える濃度の毒性値には信頼性等の問題があり得るため、物質の三態が判断できる情報（沸点や融点など）、水溶解度、水/オクタノール分配係数、蒸気圧等の物理化学的性状データが必要となる。これらのデータを共通情報として予め収集整理しておくことにより、効率的な信頼性の判断が可能となるため、物理化学的性状として整理した。

表 3 対象有害性等の項目

対象有害性等
発がん性
変異原性
経口慢性毒性
吸入慢性毒性
作業環境許容濃度から得られる吸入慢性毒性
生殖発生毒性
気道感作性
生態毒性（水生環境有害性）
物理化学的性状（物質の三態が判断できる情報、水溶解度、水/オクタノール分配係数、蒸気圧）

2.3. データ記録

有害性情報のデータ記録は、平成 20 年度答申の作成に当たって調査されたデータの記録方法に準じて行った。具体的には、PRTR インフォメーション広場、対象化学物質情報のページにある「発

がん性」から「生態毒性」までのリストの様式に準じて、下記の取り決めに基づいて、データを記録することとした。

① 指定された CAS 番号に該当する対象物質に対しての情報があった場合のみの入力とし、混合物や複合物は対象外とした。

② 各毒性エンドポイントについて、以下は対象外した。

・生殖毒性と気道感作性に関しては、分類（CLP）のないもの

・慢性毒性に関しては、暴露期間 1 年未満のものや NOAEL(NOEL)か LOAEL(LOEL)情報のないもの（動物実験データだけでなく、もしヒトデータで NOAEL 等のデータがあった場合は転記）。

・評価書に NOAEL の表記がないもの

・生態毒性における LC50、EC50、NOEC 以外の情報

3. 収集データの結果

3.1. 発がん性

調査した範囲で、対象物質の中で PRTR の発がん性クラスに該当したものは、優先順位 1 の情報源で、リチウム＝ペルフルオロオクタン－１－スルホナート (CAS 番号 : 29457-72-5) のみであり、クラスは 2 であった(添付資料 1)。

3.2. 変異原性

調査した範囲で、対象物質の情報が不足しており、PRTRの変異原性クラスを決定できるものはなかった。

3.3. 経口慢性毒性

調査した範囲で、対象物質の一般毒性情報、水質基準情報、農薬 ADI 情報いずれについても情報が不足しており、PRTR の経口慢性毒性クラスを決定できるものはなかった。

3.4. 吸入慢性毒性

調査した範囲で、対象物質の中で PRTR の吸入慢性毒性クラスに該当したものは、優先順位 1 の情報源で、四塩化チタン(CAS 番号：7550-45-0) のみであり、クラスは 1 であった (添付資料 2)。

3.5. 作業環境許容濃度から得られる吸入慢性毒性

調査した範囲で、対象物質の中で PRTR の作業環境許容濃度から得られる吸入慢性毒性クラスに該当したものは、1,4 - ジニトロベンゼン(CAS 番号 : 100-25-4) (ACGIH と日産衛) と硫酸鉄(II) (CAS 番号：7720-78-7) (ACGIH) のみであり、クラスはそれぞれ、2 と 3 であった。なお、クラス外に該当したものは、以下であった。(以上、添付資料 3-1～添付資料 3-2)

・2,2－ジメチルブタン (CAS 番号：75-83-2)

・2,3－ジメチルブタン (CAS 番号：79-29-8)

・2,4－ジメチルペンタン (CAS 番号：108-08-7)

・2,2,3－トリメチルブタン (CAS 番号：464-06-2)
・2,3－ジメチルペンタン (CAS 番号：565-59-3)
・3－メチルヘキサン (CAS 番号：589-34-4)
・2,2－ジメチルペンタン (CAS 番号：590-35-2)
・2－メチルヘキサン (CAS 番号：591-76-4)
・2,2－ジメチルプロパン (CAS 番号：463-82-1)

3.6. 生殖発生毒性

調査した範囲で、対象物質の中で PRTR の生殖発生毒性クラスに該当したものは、1,2,5,6,9,10-ヘキサブロモシクロドデカン (CAS 番号 : 3194-55-6) (優先順位 1 の情報源)、リチウム＝ペルフルオロオクタン－１－スルホナート (CAS 番号：29457-72-5) (優先順位 2 の情報源)のみであり、クラスはそれぞれ、2 と 1 であった(添付資料 4)。

3.7. 気道感作性

調査した範囲で、対象物質の中で PRTR の気道感作性クラスに該当したものはなかった。

3.8. 生態毒性

調査した範囲で、対象物質の中で PRTR の生態毒性クラス 1 に該当したものは、1,4-ジニトロベンゼン (CAS 番号：100-25-4) 、中沸点脂肪族ナフサ (CAS 番号：64742-88-7) 、ジブロモフェニルエーテル (CAS 番号 : 5436-43-1) 、ジクロロエタン (CAS 番号 : 1300-21-6)*、硫酸鉄(II) (CAS 番号：7720-78-7)*であった。

生態毒性クラス 2 に該当したものは、四塩化チタン (CAS 番号：7550-45-0) 、リチウム＝ペルフルオロオクタン－1－スルホナート (CAS 番号：29457-72-5) であった。

生態毒性クラスのクラス外に該当したものは、ペルフルオロオクタン (CAS 番号 : 307-34-6) 、2‐メトキシ‐3, 6‐ジクロロ安息香酸アニオン・ジメチルアミニウム (CAS 番号 : 2300-66-5)* 、1,2,5,6,9,10-ヘキサブロモシクロドデカン (CAS 番号 : 3195-55-6) *であった。(以上、(添付資料 5))

*:優先順位 2 からの情報、これ以外は全て優先順位 1 からの情報

3.9. 物理化学的性状

調査した対象物質の物理化学的性状は添付資料 6 に整理した。

4. 添付資料

添付資料 1 発がん性

添付資料 2 吸入慢性毒性

添付資料 3-1 作業環境許容濃度から得られる吸入慢性毒性 (ACGIH)

添付資料 3-2 作業環境許容濃度から得られる吸入慢性毒性 (日産衛)

添付資料 4 生殖発生毒性

添付資料 5 生態毒性

添付資料 6 物理化学的性状

以上

種別	号番号	CAS番号	物質名	IARC発がん分類	日産衛発がん分類（許容濃度等の勧告：発がん物質）	ACGIH発がん分類	EPA発がん分類	NTP発がん分類	EU発がん分類	発がん性クラス	キースタディ候補	優先順位1/優先順位2
		29457-72-5	リチウム＝ペルフルオロオクタン－１－スルホナート	－	－	－	－	－	2	2	○	1

※表中の－は、調査した結果、データが無かったものやデータから決定できなかったもの。

添付資料2 吸入慢性毒性

種別	号番号	CAS番号	物質名	動物種	投与期間	単位1	エンドポイント	毒性値	単位2	コメント	出典	毒性値（換算）	単位3	HEC	吸入クラス	備考	キースタディ候補	優先順位1/優先順位2
		7550-45-0	Titanium tetrachloride	ラット	2	年間	LOAEL	0.1	mg/m^3	鼻炎、気管炎	環境リスク、第7巻（2009); ATSDR（1997）	0.1	mg/m^3	-	1	ATSDR（1997)には、環境リスク第7巻（2009)と同一試験があるが、影響のみられた用量における判断が四塩化チタンダストの沈着の増加を伴う泡沫肺マクロファージ発現率の増加としている。	○	1

※仕様書で指定されたCAS番号に該当する対象物質に対しての情報があった場合のみの入力とする。混合物や複合物は対象外。
※慢性毒性に関しては、暴露期間1年未満のものやNOAEL(NOEL)かLOAEL(LOEL)情報のないもの（動物実験データだけでなく、もしヒトデータでNOAEL等のデータがあった場合は転記）。
ただし、評価書にNOAELの表記がないものは対象外。
※表中の-は、調査した結果、データが無かったものやデータから決定できなかったもの。
環境リスク：環境省化学物質の環境リスク評価
ATSDR：ATSDR Toxicological Profile

添付資料3-1 作業環境許容濃度から得られる吸入慢性毒性（ACGIH）

種別	号番号	CAS番号	物質名	提案年度	TWA値	単位	注	備考	分子量	蒸気圧（mmHg）	蒸気圧の温度(℃)	形態	判定 TWA(mg/m^3)	症状	症状出典	ACGIHクラス	キースタディ候補
		100-25-4	p-Dinitrobenzene	1962	0.15	ppm	-	-	168.11	0.0000261	25	粒子	1.03	血中メトヘモグロビン増加	ACGIH (2017)	3	○
		7720-78-7	硫酸鉄(II)	1969	1	mg/m^3	-	鉄塩,水溶性塩類(Feとして)	151.91	-	-	粒子	1.00	吸入性刺激/皮膚刺激	ACGIH (2017)	2	○
		75-83-2	２，２－ジメチルブタン	1982	500	ppm	-	ヘキサン(他の異性体)	86.18	319.27	25	気体	1762	麻酔性/神経毒性	ACGIH (2017)	クラス外	○
		79-29-8	２，３－ジメチルブタン	1982	500	ppm	-	ヘキサン(他の異性体)	86.18	235	25	気体	1762	麻酔性/神経毒性	ACGIH (2017)	クラス外	○
		108-08-7	２，４－ジメチルペンタン	1976	400	ppm	-	ヘプタン(全異性体)	100.2	79.4	25	気体	1639	麻酔性/神経毒性	ACGIH (2017)	クラス外	○
		464-06-2	２，２，３－トリメチルブタン	1976	400	ppm	-	ヘプタン(全異性体)	100.2	102	25	気体	1639	麻酔性/神経毒性	ACGIH (2017)	クラス外	○
		565-59-3	２，３－ジメチルペンタン	1976	400	ppm	-	ヘプタン(全異性体)	100.2	68.9	25	気体	1639	麻酔性/神経毒性	ACGIH (2017)	クラス外	○
		589-34-4	３－メチルヘキサン	1976	400	ppm	-	ヘプタン(全異性体)	100.2	61.5	25	気体	1639	麻酔性/神経毒性	ACGIH (2017)	クラス外	○
		590-35-2	２，２－ジメチルペンタン	1976	400	ppm	-	ヘプタン(全異性体)	100.2	105	25	気体	1639	麻酔性/神経毒性	ACGIH (2017)	クラス外	○
		591-76-4	２－メチルヘキサン	1976	400	ppm	-	ヘプタン(全異性体)	100.2	66	25	気体	1639	麻酔性/神経毒性	ACGIH (2017)	クラス外	○
		463-82-1	２，２－ジメチルプロパン	1998	600	ppm	-	ペンタン(全異性体)	72.15	1285	25	気体	1771	軸索障害	ACGIH (2017)	クラス外	○

※TLVsは作業環境中の化学物質濃度で、TWA（8時間荷重平均）およびSTEL（短時間暴露限界）がある。
※PRTR物質選定には、答申でTWAを使用する旨明記されている。
※気体および蒸気のTLVsは、ppmで決められているため、ppm単位の許容濃度が設定されている物質を気体と判定した。
※ppmからmg/m^{3}の換算は、1気圧、25℃では、1ppm＝（分子量 / 24.45）mg/m^3 に従った。
※表中の-は、調査した結果、データが無かったものやデータから決定できなかったもの。
ACGIH：ACGIH Documentation of the threshold limit values for chemical substances（化学物質許容濃度文書）

添付資料3-2 作業環境許容濃度から得られる吸入慢性毒性（日産衛）

種別	号番号	CAS番号	物質名	許容濃度(ppm)	許容濃度(mg/m^3)	提案年度	備考	分子量	蒸気圧(mmHg)	蒸気圧の温度(℃)	形態	判定許容濃度(mg/m^3)	症状	症状出典	日産衛クラス	キースタディ候補
		100-25-4	p-Dinitrobenzene	0.15	1	1994	-	168.11	0.0000261	25	粒子	1.03	血中メトヘモグロビン増加	日産衛（産業医学36巻）	3	○

※ppmからmg/m^{3}の換算は、1気圧、25℃では、1ppm＝（分子量　/　24.45）mg/m^3
※表中の-は、調査した結果、データが無かったものやデータから決定できなかったもの。
日産衛：日本産業衛生学会、許容濃度提案理由書及び許容濃度等の勧告

添付資料4 生殖発生毒性

種別	号番号	CAS番号	物質名	CLP分類	生殖クラス	動物種	投与経路	エンドポイント	毒性値	症状	出典	キースタディ候補	優先順位1/優先順位2
		3194-55-6	1，2，5，6，9，10－ヘキサブロモシクロドデカン	Repr. 2	2	ラット	経口	NOAEL	150 ppm （10.2 mg/kg/day相当）	1,500 ppm：F1雌で原始卵胞数の低値、F1雌雄児動物で肝臓絶対・相対重量の高値、F2雄児で肝臓相対重量の高値、F2雌で眼瞼開裂の完成度の低値	JECDB（2008）	○	1
		29457-72-5	リチウム＝ペルフルオロオクタン－1－スルホナート	Repr. 1B	1	ウサギ	経口	NOAEL	2 mg/kg/day	胎児死亡と骨格変異	HSDB(2017)	○	2

・仕様書で指定されたCAS番号に該当する対象物質に対しての情報があった場合のみの入力とする。混合物や複合物は対象外。
・生殖毒性に関しては、分類（CLP）のないものは対象外。
※表中の-は、調査した結果、データが無かったものやデータから決定できなかったもの。
HSDB：米国国立医学図書館（NLM）Hazardous Substance Data Bank
JECDB：既存化学物質毒性データベースJapan Existing Chemical Data Base

添付資料5 生態毒性

種別	号番号	CAS番号	物質名	生物種	生物名（和名）	暴露時間	単位1	エンドポイント	等号	毒性値	単位2	出典	備考	水溶解度（mg/L）	実測値/推定値	出典	ヘンリー定数（Pa・m^3/mole）	実測値/推定値	出典	比重又は密度	出典	加水分解半減期（カッコ書きは光分解）	CLP分類	生態毒性クラス	キースタディ候補	優先順位1/優先順位2
		307-34-6	ペルフルオロオクタン	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	EC50	>=	1000	mg/L	HPVIS(2001)	-	0.0002402	推定値	PhysProDB	508,000	推定値	PhysProDB	1.73	CRC	-	-	クラス外	○	1
		2300-66-5	Dimethylamine dicamba	魚類	ニジマス	96	時間	LC50	>	1000	ppm	HSDB(2012)	-	2080	推定値	PhysProDB	5.55E-17	推定値	PhysProDB	-	-	-	Chronic 3	クラス外	○	2
		100-25-4	p-Dinitrobenzene	藻類	プセウドキルクネリエラ	72	時間	NOEC		0.0038	mg/L	環境省生態影響試験（2017）	-	69	実測値	PhysProDB	8.39E-08	推定値	PhysProDB	1.625	CRC	-	Acute 1, Chronic 1	1	○	1
		7550-45-0	Titanium tetrachloride	藻類	プセウドキルクネリエ	3	日間	NOEC		984	μg/L	環境省リスク(2010)第8巻	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	○	1
		64742-88-7	Solvent naphtha medium aliphatic	甲殻類	オオミジンコ	48	時間	LC50		0.42to 2.3	mg/L	EHC(1996)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	○	1
		5436-43-1	2，4－ジブロモ－1－（2，4－ジブロモフェノキシ）ベンゼン	魚類	タイセイヨウダラ	21	日間	NOEC		0.23	ug/L	Aquire(2017)	-	0.001461	推定値	PhysProDB	0.00000297	推定値	PhysProDB	-	-	-	-	1	○	1
		3195-55-6	1，2，5，6，9，10－ヘキサブロモシクロドデカン	魚類	ブルーギル	96	時間	EC50	>	100	mg/L	HSDB(2012)	-	0.0086	実測値	PhysProDB	0.000046	推定値	PhysProDB	-	-	-	-	クラス外	○	2
		29457-72-5	リチウム＝ペルフルオロオクタン－1－スルホナート	魚類	ファットヘッドミノー	4（止水式）	日間	LC50		4590	μg/L	環境省リスク(2008)第6巻	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	Chronic 2	2	○	1
		2052-07-5	2-bromobiphenyl	魚類	ニジマス	96	時間	LC50		0.4	mg/L	PEC(2001)	-	3521	推定値	PhysProDB	0.000165	推定値	PhysProDB	1.1275	CRC	-	-	1	○	1
		2113-57-7	3-bromobiphenyl	甲殻類	オオミジンコ	24	時間	EC50	>	66	mg/L	EHC(1994)	-	2.112	推定値	PhysProDB	0.000165	推定値	PhysProDB	1.2175	CRC	-	-	クラス外	○	1
		1300-21-6	ジクロロエタン	藻類	クロレラ	4	日間	EC50		380	ug/L	Aquire(2017)	-	5100	実測値	PhysProDB	1.09E-10	推定値	PhysProDB	-	-	-	-	1	○	2
		7720-78-7	硫酸鉄(II)	魚類	カワマス	4	日間	LC50		410	ug/L	Aquire(2017)	-	Soluble in water	-	HSDB	-	-	-	-	-	-	-	1	○	2

※表中の-は、調査した結果、データが無かったものやデータから決定できなかったもの。
水溶解度の情報が得られなかったものについても優先順位1の情報源であれば候補とした。
Aquire：Aquatic Toxicity Information Retrieval（AQUIRE）
EHC：WHO/IPCS環境保健クライテリア
HPVIS：US HPVIS High Production Volume Information System (HPVIS)
HSDB：米国国立医学図書館（NLM）Hazardous Substance Data Bank
PEC：NICNAS Priority Existing Chemical Assessment Reports
環境リスク：環境省化学物質の環境リスク評価
環境省生態影響試験：環境省において実施して評価した生態影響試験報告

出典データベース	CAS番号	物質名	融点(℃)	沸点(℃)	水溶解度-値(mg/L)	水溶解度-温度(℃)	水溶解度-実測値/推定値	LogP	LogP-温度	LogP-実測値/推定値	蒸気圧(mmHg)	蒸気圧温度	蒸気圧実測値/推定値	pKa値	pKa温度(℃)	pKa実測値/推定値	ヘンリー定数(atm-m^3/mol)	ヘンリー定数温度(℃)	ヘンリー定数実測値/推定値	比重 g cm^{-3}	比重 温度(℃)
PhysProDB	335-57-9	ペルフルオロヘプタン	-78	82.5	0.0007116	25	推定値	6.99	-	推定値	76.396	25	実測値	-	-	-	96700	25	推定値	-	-
CRC	335-57-9	ペルフルオロヘプタン	-51.2	82.5	i H2O; vs ace, eth, EtOH, chl	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.7333	20
PhysProDB	307-34-6	ペルフルオロオクタン	-23.2	102.8	0.0002402	25	推定値	7.95	-	推定値	33.9	25	推定値	-	-	-	508000	25	推定値	-	-
CRC	307-34-6	ペルフルオロオクタン	-	105.9	i H2O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.73	20
PhysProDB	127-95-7	蓚酸水素カリウム	-	-	25000	-	実測値	-4.96	-	推定値	3.73E-09	25	推定値	-	-	-	-	25	-	-	-
Hawley	127-95-7	蓚酸水素カリウム	-	-	Soluble in water; insoluble in alcohol.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
HSDB	127-95-7	蓚酸水素カリウム	Decomposes	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	127-95-7	蓚酸水素カリウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	127-96-8	4蓚酸カリウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	553-91-3	蓚酸リチウム	-	-	66700	-	実測値	-7	-	推定値	4.92E-07	25	推定値	-	-	-	-	25	-	-	-
Merck	553-91-3	蓚酸リチウム	-	-	Sol in 15 parts water.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	814-95-9	蓚酸ストロンチウム	-	-	50	-	実測値	-0.17	-	推定値	0.00000356	25	推定値	-	-	-	-	25	-	-	-
PhysProDB	1126-78-9	Ｎ－ｎ－ブチルアニリン	-14.4	243.5	67.01	25	推定値	3.58	-	実測値	0.0905	25	推定値	5.12	25	実測値	9.78E-06	25	推定値	-	-
CRC	1126-78-9	Ｎ－ｎ－ブチルアニリン	-14.4	243.5	vs eth, EtOH	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.9323	20
	6047-25-2	蓚酸第１鉄（２水塩）	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	6575-07-1	６－クロロ－２－ニトロベンゾニトリル	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	12231-98-	タンタル酸バリウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	13268-42-3	蓚酸第２鉄アンモニウム（３水塩）	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	14402-67-	蓚酸チタンカリウム（２水	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	16588-02-6	２－クロロ－５－ニトロベンゾニトリル	-	-	231	25	推定値	2	-	推定値	0.000361	25	推定値	-	-	-	1.52E-07	25	推定値	-	-
Hawley	25869-00-	アンモニア紺青	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	25869-00-	アンモニア紺青	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	37265-86-4	タングステン酸イツトリウムバリウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
CRC	812-04-4	1,1-Dichloro-1,2,2-trifluoroethane (HCFC-123b)	-	30.2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
HSDB	812-04-4	1,1-Dichloro-1,2,2-trifluoroethane (HCFC-123b)	-	30.2 deg C	In water, 638 mg/L at 25 deg C	-	推定値	log Kow = 2.17	-	推定値	630 mm Hg at 25 deg C	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	354-23-4	1,2-Dichloro-1,1,2-trifluoroethane (HCFC-123a)	-78	29.5	232	25	推定値	2.17	-	推定値	620	25	EXT	-	-	-	0.0955	25	推定値	-	-
CRC	354-23-4	1,2-Dichloro-1,1,2-trifluoroethane (HCFC-123a)	-78	29.5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	25
HSDB	354-23-4	1,2-Dichloro-1,1,2-trifluoroethane (HCFC-123a)	-78 deg C	29.5 deg C	-	-	-	log Kow = 2.17	-	推定値	102.0 kPa at 303.15 K /620 mm Hg at 25 deg C/	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

出典データベース	CAS番号	物質名	融点(℃)	沸点(℃)	水溶解度-値(mg/L)	水溶解度-温度(℃)	水溶解度-実測値/推定値	LogP	LogP-温度	LogP-実測値/推定値	蒸気圧(mmHg)	蒸気圧温度	蒸気圧実測値/推定値	pKa値	pKa温度(℃)	pKa実測値/推定値	ヘンリー定数(atm-m^3/mol)	ヘンリー定数温度(℃)	ヘンリー定数実測値/推定値	比重 g cm^{-3}	比重 温度(℃)
PhysProDB	2300-66-5	Dimethylamine dicamba	-	-	2080	25	推定値	1.13	-	推定値	2.26E-09	25	推定値	-	-	-	5.55E-17	25	推定値	-	-
HSDB	2300-66-5	Dimethylamine dicamba	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	100-25-4	p-Dinitrobenzene	174	297	69	25	実測値	1.46		実測値	0.0000261	25	推定値	-	-	-	8.39E-08	25	推定値	-	-
CRC	100-25-4	p-Dinitrobenzene	173.5	297; 183[34]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.625	18
Hawley	100-25-4	p-Dinitrobenzene	173C	299C	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
HSDB	100-25-4	p-Dinitrobenzene	174 deg C	297 deg C	In water, 69 mg/l @ 25 deg C.	-	-	log Kow= 1.46	-	-	< 1 mm Hg at 20 deg C /Dinitrobenzene, all isomers/	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	100-25-4	p-Dinitrobenzene	173-174°	299°	One gram dissolves in 12,500 ml cold water	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	100-25-4	p-Dinitrobenzene	173	-	80	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	100-25-4	p-Dinitrobenzene	173	-	39.51	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	100-25-4	p-Dinitrobenzene	173	-	68.76	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	100-25-4	p-Dinitrobenzene	173	-	61.8	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	100-25-4	p-Dinitrobenzene	173	-	103.7	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	100-25-4	p-Dinitrobenzene	173	-	1900	100	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Hawley	7550-45-0	Titanium tetrachloride	-	136.4C	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
HSDB	7550-45-0	Titanium tetrachloride	-24.1 deg C	136.4 deg C	-	-	-	-	-	-	1.31X10-2 atm @ 20 deg C	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	7550-45-0	Titanium tetrachloride	-24.1°	136.4°	-	-	-	-	-	-	(20°): 10.0 mm; (22°) 9.6 mm	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	11104-93-1 04742-88-7	Nitrogen oxides (expressed as nitrogen	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Hawley		Solvent naphtha medium	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	5436-43-1	2，4ージブロモー1ー(2，4ージブロモフェノキシ)ベ	-	-	0.001461	25	推定値	6.77	-	推定値	0.00000007	25	EXT	-	-	-	2.97E-06	25	推定値	-	-
Merck	5436-43-1	2，4ージブロモー1ー(2，4ージブロモフェノキシ)ベンゼン	-	-	Soly in water: 15 μ,g/l. Log P (octanol/water): 6.81.	-	-	-	-	-	1.40 X 10-6 mm Hg	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	3194-55-6	1，2，5，6，9，10ーヘキサブロモシクロドデカン	-	-	0.0086	25	実測値	7.74	-	推定値	0.00000047	21	実測値	-	-	-	0.000046	25	推定値	-	-
CRC	3194-55-6	1，2，5，6，9，10ーヘキサブロモシクロドデカン	167	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
HSDB	3194-55-6	1，2，5，6，9，10ーヘキサブロモシクロドデカン		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

出典データベース	CAS番号	物質名	融点(℃)	沸点(℃)	水溶解度-値(mg/L)	水溶解度-温度(℃)	水溶解度-実測値/推定値	LogP	LogP-温度	LogP-実測値/推定値	蒸気圧(mmHg)	蒸気圧温度	蒸気圧実測値/推定値	pKa値	pKa温度(℃)	pKa実測値/推定値	ヘンリー定数(atm-m^3/mol)	ヘンリー定数温度(℃)	ヘンリー定数実測値/推定値	比重 g cm^{-3}	比重 温度(℃)
Merck	3194-55-6	1，2，5，6，9，10－ヘキサブロモシクロドデカン	175-185°	-	-	-	-	Log P (octanol/water): 5.62.	-	-	6.3 X 10-5 Pa.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	134237-50-6	rel－(1R，2R，5S，6R，9R，10S)－1，2，5，6，9，10－ヘキサブロモシクロドデカン	-	-	Soly in water: 48.8 μ,g/1.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	134237-51-7	rel－(1R，2S，5R，6R，9R，10S)－1，2，5，6，9，10－ヘキサブロモシクロドデカン	-	-	Soly in water: 14.7 μ,g/1.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	134237-52-8	rel－(1R，2R，5R，6S，9S，10R)－1，2，5，6，9，10－ヘキサブロモシクロドデカン	-	-	Soly in water: 2.1 μ,g/1.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
HSDB	29457-72-5	リチウム＝ペルフルオロオクタン－1－スルホナート	Decomposes at 308 deg C	-	-	-	-	log Kow = 4.13 /Estimated/	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	2052-07-5	2-bromobiphenyl	1.5	297	3.521	25	推定値	4.59	-	実測値	0.000354	25	推定値	-	-	-	0.000165	25	推定値	-	-
CRC	2052-07-5	2-bromobiphenyl	0.8	297	vs eth, EtOH	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.2175	26
PhysProDB	2113-57-7	3-bromobiphenyl	-	300	2.112	25	推定値	4.85	-	実測値	0.000354	25	推定値	-	-	-	0.000165	25	推定値	-	-
CRC	2113-57-7	3-bromobiphenyl	-	300; 171[17]	i H2O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	564-02-3	2，2，3－トリメチルペンタ	-112.2	110	2.4	25	実測値	4.09	-	推定値	32.1	25	実測値	-	-	-	2.01	25	推定値	-	-
CRC	564-02-3	2，2，3－トリメチルペンタン	-112.2	110	i H2O; msc EtOH, eth, ace, hp; s bz	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.7161	20
PhysProDB	565-75-3	2，3，4－トリメチルペンタ	-109.2	113.5	2.3	25	実測値	4.05	-	推定値	27.1	25	実測値	-	-	-	1.771	25	推定値	-	-
CRC	565-75-3	2，3，4－トリメチルペンタン	-109.2	113.5	i H2O; vs EtOH; msc eth, ace, bz; sl ctc	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.7191	20
Yalkowsky_AS_DBK	565-75-3	2，3，4－トリメチルペンタン	-110	113	2.34	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	565-75-3	2，3，4－トリメチルペンタン	-110	113	1.36	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	565-75-3	2，3，4－トリメチルペンタン	-110	113	2.3	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	565-75-3	2，3，4－トリメチルペンタン	-110	113	1.36	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	565-75-3	2，3，4－トリメチルペンタン	-110	113	1.36	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	589-53-7	4－メチルヘプタン	-121	117.7	7.965	25	推定値	4.2		推定値	20.5	25	実測値	-	-	-	3.01	25	推定値	-	-
CRC	589-53-7	4－メチルヘプタン	-121	117.72	i H2O; s eth; msc EtOH, ace, bz	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.7046	20
PhysProDB	589-81-1	3－メチルヘプタン	-100	118	0.792	25	実測値	4.2		推定値	19.6	25	実測値	-	-	-	3.72	25	推定値	-	-

出典データベース	CAS番号	物質名	融点(℃)	沸点(℃)	水溶解度-値(mg/L)	水溶解度-温度(℃)	水溶解度-実測値/推定値	LogP	LogP-温度	LogP-実測値/推定値	蒸気圧(mmHg)	蒸気圧温度	蒸気圧実測値/推定値	pKa値	pKa温度(℃)	pKa実測値/推定値	ヘンリー定数(atm-m^3/mol)	ヘンリー定数温度(℃)	ヘンリー定数実測値/推定値	比重 g cm^{-3}	比重 温度(℃)
CRC	589-81-1	3ーメチルヘプタン	-120.5	118.9	i H2O; s EtOH, eth; msc ace, bz, chl		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.7017	25
Yalkowsky_AS_DBK	589-81-1	3ーメチルヘプタン	-121	-	2.9	23	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	589-81-1	3ーメチルヘプタン	-121	-	0.792	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	589-81-1	3ーメチルヘプタン	-121	-	0.792	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	589-81-1	3ーメチルヘプタン	-121	-	0.792	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	1067-08-9	3ーエチルー3ーメチルペンタン	-90.9	118.2	8.576	25	推定値	4.16	-	推定値	23	25	実測値	-	-	-	3.01	25	推定値	-	-
CRC	1067-08-9	3ーエチルー3ーメチルペンタン	-90.9	118.27	i H2O; s eth; msc EtOH, ace, bz	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.7274	20
	8048-07-5	C. I. ピグメントイエロー3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	53496-15-4	secーペンチル＝アセート	-121	-	1896	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	1300-21-6	ジクロロエタン	-	-	5100		実測値	1.83	-	推定値	75.4	25	推定値	-	-	-	1.09E-10	25	推定値	-	-
HSDB	1300-21-6	ジクロロエタン	-	-	In water, 5,100 mg/l, temp not specified.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Hawley	13746-89-9	硝酸ジルコニウム(IV)	-	-	Soluble in water; insoluble in alcohol.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
HSDB	13746-89-	硝酸ジルコニウム(IV)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	13746-89-9	硝酸ジルコニウム(IV)	-	-	Very sol in water; sol in alcohol.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	72854-21-8	ナフテン酸ジルコニウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Hawley	1314-61-0	酸化タンタル	1800C	-	Insol in water, alcohol, mineral acids. Sol in HF.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	1314-61-0	酸化タンタル	-	-	Insol in water, alcohol, mineral acids.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
HSDB	1185-57-5	クエン酸鉄(III)アンモニウ	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	1185-57-5	クエン酸鉄(III)アンモニウ	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Hawley	7720-78-7	硫酸鉄(II)	64C	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

出典データベース	CAS番号	物質名	融点(℃)	沸点(℃)	水溶解度-値(mg/L)	水溶解度-温度(℃)	水溶解度-実測値/推定値	LogP	LogP-温度	LogP-実測値/推定値	蒸気圧(mmHg)	蒸気圧温度	蒸気圧実測値/推定値	pKa値	pKa温度(℃)	pKa実測値/推定値	ヘンリー定数(atm-m^3/mol)	ヘンリー定数温度(℃)	ヘンリー定数実測値/推定値	比重 g cm^{-3}	比重 温度(℃)
HSDB	7720-78-7	硫酸鉄(II)	-	-	Soluble in water.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	7720-78-7	硫酸鉄(II)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-99	49.7	18.4	25	実測値	3.82		実測値	319.27	25	実測値	-	-	-	1.52	25	推定値	-	-
CRC	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-98.8	49.73	i H2O; s EtOH, eth; vs ace, bz, peth, ctc	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.6444	25
Hawley	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-	49.7C	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
HSDB	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-99.9 deg C	49.7 deg C	In water, 21.2 mg/L at 25 deg C	-	-	log Kow = 3.82	-	-	Vapor pressure =319 mm Hg at 25 deg C	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-100	50	39.4	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-100	50	36.86	2.34	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-100	50	29.68	9.99	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-100	50	23.46	24.99	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-100	50	21.2	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-100	50	18.4	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-100	50	18.4	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-100	50	23.8	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-100	50	21.2	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-100	50	21.2	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	75-83-2	2，2ージメチルブタン	-100	50	56.87	ns	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-128.8	57.9	22.5	25	実測値	3.42		実測値	235	25	実測値	-	-	-	1.18	25	推定値	-	-
CRC	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-128.1	57.93	i H2O; s EtOH, eth; vs ace, bz, peth, ctc	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.6616	20
Hawley	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-	57.9C	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
HSDB	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-128.8 DEG C	57.9 DEG C @ 760 MM HG	Water solubility = 22.5 mg/l at 25 deg C	-	-	Log Kow = 3.42	-	-	Vapor pressure = 235 mm Hg at 25 deg C	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	32.9	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	11900	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	22.5	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

出典データベース	CAS番号	物質名	融点(℃)	沸点(℃)	水溶解度-値(mg/L)	水溶解度-温度(℃)	水溶解度-実測値/推定値	LogP	LogP-温度	LogP-実測値/推定値	蒸気圧(mmHg)	蒸気圧温度	蒸気圧実測値/推定値	pKa値	pKa温度(℃)	pKa実測値/推定値	ヘンリー定数(atm-m^3/mol)	ヘンリー定数温度(℃)	ヘンリー定数実測値/推定値	比重 g cm^{-3}	比重 温度(℃)
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	19.1	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	19.1	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	19.2	40.1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	19.2	40.1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	23.7	55.1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	23.7	55.1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	40.1	99.1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	40.1	99.1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	56.8	121.3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	56.8	121.3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	97.9	137.3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	97.9	138.3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	171	149.5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	79-29-8	2，3ージメチルブタン	-129	58	171	149.5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	108-08-7	2，4ージメチルペンタン	-119.9	80.4	5.5	25	実測値	3.63	-	推定値	79.4	25	実測値	-	-	-	1.904	25	推定値	-	-
CRC	108-08-7	2，4ージメチルペンタン	-119.2	80.49	i H2O; s EtOH, eth; msc ace, bz, chl, hp	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.6727	20
Yalkowsky_AS_DBK	108-08-7	2，4ージメチルペンタン	-123	80	6.5	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	108-08-7	2，4ージメチルペンタン	-123	80	4.41	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	108-08-7	2，4ージメチルペンタン	-123	80	4.06	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	108-08-7	2，4ージメチルペンタン	-123	80	3.62	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	108-08-7	2，4ージメチルペンタン	-123	80	5.5	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	108-08-7	2，4ージメチルペンタン	-123	80	4.41	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	108-08-7	2，4ージメチルペンタン	-123	80	4.41	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	108-08-7	2，4ージメチルペンタン	-123	80	4.108	ns	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	464-06-2	2，2，3ートリメチルブタン	-25	80.8	28.89	25	推定値	3.59	-	推定値	102	25	実測値	-	-	-	2.27	25	推定値	-	-
CRC	464-06-2	2，2，3ートリメチルブタン	-24.6	80.86	i H2O; s EtOH, eth; vs ace, bz, peth, ctc	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.6901	20
PhysProDB	565-59-3	2，3ージメチルペンタン		89.7	5.25	25	実測値	3.63		推定値	68.9	25	実測値	-	-	-	1.73	25	推定値		

出典データベース	CAS番号	物質名	融点(℃)	沸点(℃)	水溶解度-値(mg/L)	水溶解度-温度(℃)	水溶解度-実測値/推定値	LogP	LogP-温度	LogP-実測値/推定値	蒸気圧(mmHg)	蒸気圧温度	蒸気圧実測値/推定値	pKa値	pKa温度(℃)	pKa実測値/推定値	ヘンリー定数(atm-m^3/mol)	ヘンリー定数温度(℃)	ヘンリー定数実測値/推定値	比重 g cm^{-3}	比重 温度(℃)
CRC	565-59-3	2，3ージメチルペンタン	-	89.78	i H2O; s EtOH, eth; msc ace, bz, chl	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.6908	25
Yalkowsky-AS DBK	565-59-3	2，3ージメチルペンタン	<25	89	5.25	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	565-59-3	2，3ージメチルペンタン	<25	89	5.25	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	565-59-3	2，3ージメチルペンタン	<25	89	5.25	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	589-34-4	3ーメチルヘキサン	-119	91	4.95	25	実測値	3.71		推定値	61.5	25	実測値	-	-	-	1.64	25	推定値	-	-
Yalkowsky-AS DBK	589-34-4	3ーメチルヘキサン	-119	91	5.24	0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	589-34-4	3ーメチルヘキサン	-119	91	10.5	23	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	589-34-4	3ーメチルヘキサン	-119	91	2.64	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	589-34-4	3ーメチルヘキサン	-119	91	4.95	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	589-34-4	3ーメチルヘキサン	-119	91	2.64	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	589-34-4	3ーメチルヘキサン	-119	91	2.64	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	590-35-2	2，2ージメチルペンタン	-123.8	79.2	4.4	25	実測値	3.67	-	推定値	105	25	実測値	-	-	-	3.15	25	推定値	-	-
CRC	590-35-2	2，2ージメチルペンタン	-123.7	79.2	i H2O; s EtOH, eth; msc ace, bz, hp, chl	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.6739	20
Yalkowsky-AS DBK	590-35-2	2，2ージメチルペンタン	-123	79.2	4.4	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	590-35-2	2，2ージメチルペンタン	-123	79.2	4.4	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	590-35-2	2，2ージメチルペンタン	-123	79.2	4.4	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	590-35-2	2，2ージメチルペンタン	-123	79.2	4.108	ns	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	591-76-4	2ーメチルヘキサン	-118.2	90	2.54	25	実測値	3.71	-	推定値	66	25	実測値	-	-	-	3.426	25	推定値	-	-
CRC	591-76-4	2ーメチルヘキサン	-118.2	90.04	i H2O; s EtOH; msc eth, ace, bz, lig, chl	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.6787	20
Yalkowsky-AS DBK	591-76-4	2ーメチルヘキサン	-118	90	14	23	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	591-76-4	2ーメチルヘキサン	-118	90	2.54	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	591-76-4	2ーメチルヘキサン	-118	90	2.54	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky-AS DBK	591-76-4	2ーメチルヘキサン	-118	90	2.54	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	556-28-5	炭酸イットリウム(III)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	10025-94-2	三塩化イットリウム・六水和物	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Hawley	10361-92-9	三塩化イットリウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	12340-04-4	オキシ硫化イットリウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

出典データベース	CAS番号	物質名	融点(℃)	沸点(℃)	水溶解度-値(mg/L)	水溶解度-温度(℃)	水溶解度-実測値/推定値	LogP	LogP-温度	LogP-実測値/推定値	蒸気圧(mmHg)	蒸気圧温度	蒸気圧実測値/推定値	pKa値	pKa温度(℃)	pKa実測値/推定値	ヘンリー定数(atm-m^3/mol)	ヘンリー定数温度(℃)	ヘンリー定数実測値/推定値	比重 g cm^{-3}	比重 温度(℃)
	13494-98-9	硝酸イットリウム(III)・六水和物	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	16469-22-0	水酸化イットリウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	23363-14-6	酢酸イットリウム(III)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	463-82-1	2，2ージメチルプロパン	-16.4	9.5	33.2	25	実測値	3.11		実測値	1285	25	実測値				3.69	25	推定値		
CRC	463-82-1	2，2ージメチルプロパン	-16.4	9.48	i H2O; s EtOH, eth, ctc	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.5852 (p>1atm)	25
Hawley	463-82-1	2，2ージメチルプロパン		9.5C	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
HSDB	463-82-1	2，2ージメチルプロパン	-16.37 deg C	9.5 deg C	In water, 33.2 mg/L at 25 deg C	-	-	log Kow = 3.11	-	-	1290 mm Hg at 25 deg C	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Merck	463-82-1	2，2ージメチルプロパン	19.8°.	9.5°	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	463-82-1	2，2ージメチルプロパン	-	9.5	16.02	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	463-82-1	2，2ージメチルプロパン	-	9.5	33.2	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	463-82-1	2，2ージメチルプロパン	-	9.5	40.48	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	463-82-1	2，2ージメチルプロパン	-	9.5	27.66	40	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	463-82-1	2，2ージメチルプロパン	-	9.5	19.24	60	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	463-82-1	2，2ージメチルプロパン	-	9.5	17.24	80	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PhysProDB	591-24-2	3ーメチルシクロヘキサノン	-	169.5	1500	20	実測値	1.54	-	推定値	1.5	25	実測値	-	-	-	0.000148	25	推定値	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	591-24-2	3ーメチルシクロヘキサノン	-75	162	1498	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Yalkowsky_AS_DBK	591-24-2	3ーメチルシクロヘキサノン	-75	162	1513	ns	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	20324-32-7	1-(2-メトキシ-2-メチルエトキシ)-2-プロパノール	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	5503-41-3	酢酸ロジウム(II)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	12036-35-0	酸化ロジウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	12081-16-2	μージクロロテトラエチレンジロジウム(I)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	12192-97-1	ジカルボニル(5ーハプトー2，4ーシクロペンタジエニル)ロジウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	13569-65-8	三塩化ロジウム・三水和物	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	13845-07-3	六塩化ロジウム酸三カリウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	14972-02-2	六塩化ロジウム酸三ナトリウム・二水和物	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	15336-18-2	六塩化ロジウム酸三アンモニウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	15492-38-3	三ヨウ化ロジウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

出典データベース	CAS番号	物質名	融点(℃)	沸点(℃)	水溶解度-値(mg/L)	水溶解度-温度(℃)	水溶解度-実測値/推定値	LogP	LogP-温度	LogP-実測値/推定値	蒸気圧(mmHg)	蒸気圧温度	蒸気圧実測値/推定値	pKa値	pKa温度(℃)	pKa実測値/推定値	ヘンリー定数(atm-m^3/mol)	ヘンリー定数温度(℃)	ヘンリー定数実測値/推定値	比重 g cm^{-3}	比重 温度(℃)
	65980-78-1	五塩化ロジウム酸二アンモニウム	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	67859-71-6	リン酸ロジウム(III)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	81044-09-9	六塩化ロジウム酸三アンモニウム・三水和物	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

※表中の-は、調査した結果、データが無かったものやデータから決定できなかったもの。
CRC：CRC Handbook of Chemistry and Physics, 98thEd, CRC Press Inc.
Hawley：Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 16th edition, John Wiley & Sons, Inc.
HSDB：米国国立医学図書館(NLM)Hazardous Substance Data Bank
Merck：The Merck Index, 14th edition, Merck & Co., Inc.
PhysProDB：SRC PhysProp Database
Yalkowsky_AS_DBK：Yalkowsky S.H. (ed), Handbook of Aqueous Solubility Data, 2nd Edition, CRC Press Inc.