

令和 4 年度第 5 回薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会化学物質調査会、令和 4 年度化学物質審議会第 2 回安全対策部会、第 227 回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会

令和 4 年 9 月 16 日 資料 1-1

(案)

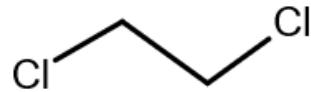
## 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

### 人健康影響に係る評価II

### 物理化学的性状等の詳細資料

## 1, 2-ジクロロエタン

優先評価化学物質通し番号 11



令和 4 年 9 月

経済産業省

24

25

## 目 次

26

27	1 評価対象物質の性状.....	1
28	1-1 評価対象物質の設定.....	1
29	1-2 物理化学的性状及び濃縮性.....	2
30	1-3 分解性 .....	4
31	2 【付属資料】 .....	7
32	2-1 物理化学的性状等一覧.....	7
33	2-2 その他 .....	8
34		

35    **1 評価対象物質の性状**

36    本章では、優先評価化学物質「1, 2-ジクロロエタン」のリスク評価に用いる物理化学  
37    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。

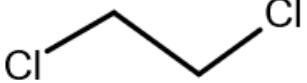
38

39    **1-1 評価対象物質の設定**

40    評価対象物質は、1, 2-ジクロロエタンとする。

41

42                   **表 1-1 評価対象物質の構造等**

評価対象物質構造	
評価対象物質名称	1, 2-ジクロロエタン
分子式	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>
優先評価化学物質通し番号	11
CAS 登録番号	107-06-2

43

44

## 45 1 - 2 物理化学的性状及び濃縮性

46 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  
47 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 1-2 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<sup>\*</sup>

項目	単位	採用値	詳細	評価 I で用いた値(参考)
分子量	—	98.96	—	98.95
融点	°C	-35.3 <sup>1-3)</sup>	測定値	-35.3 <sup>1)</sup>
沸点	°C	83.6 <sup>4)</sup>	101.3 kPa での測定値	83.7 <sup>1)</sup>
蒸気圧	Pa	8,500 <sup>1)</sup>	20°Cでの測定値の算術平均値	8,700 <sup>1)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	8,032 <sup>1,4)</sup>	20°Cでの測定値	8,032 <sup>1,4)</sup>
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	1.45 <sup>4)</sup>	20°Cでの測定値	1.465 <sup>1,4)</sup>
ヘンリー係数	Pa·m <sup>3</sup> /mol	149 <sup>1,4,7)</sup>	20°Cでの測定値	111.5 <sup>5,6)</sup>
有機炭素補正土壤吸着係数(Koc)	L/kg	33 <sup>4,7-9)</sup>	土壤(silt loam)での測定値	33 <sup>8)</sup>
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	2.0 <sup>1,4,7)</sup>	濃縮度試験における測定値	77.1 <sup>2,10)</sup>
生物蓄積係数(BMF)	—	1 <sup>11)</sup>	logPow と BCF から設定	1 <sup>11)</sup>
酸解離定数(pKa)	—	—	解離性の基を有さない物質	—

※令和元年度第3回化審法のリスク評価等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(令和2年2月6日)  
で了承された値

1) IUCLID(2000)	7) OECD(2002)
2) MOE(2003)	8) HSDB(2001)
3) MITI(1978)	9) Howard(1989)
4) ECHA	10) NITE(2005)
5) EHC(2006)	11) MHLW, METI, MOE(2014)
6) Mackay(2006)	－：評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない

59 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で採用した値は、IUCLID (2000) に記載された EU Method A.1 による測定値(-35.3 °C)である。同情報源には、ASTM 規格又は同等とされている値(-35 °C)もある。評価Iの採用値は、MOE (2003)、化審法の既存点検事業(1978)の提示資料にも記載がされており、評価IIにおいてもこの値(-35.3 °C)を用いる。

## ②沸点

評価Iで採用した値 (83.7 °C)は、IUCLID (2000) に記載された EU Method A.2 による測定値である。同情報源には、ASTM 規格又は同等とされている値(83.5 °C)もある。その他の情報源では、ECHA のキースタディに、標準圧力 (101.3 kPa) における測定値 (83.6 °C) があった。評価IIにおいては、ECHA のキースタディであり、かつ得られた測定値の算術平均値である 83.6 °Cを用いることとする。

73

74 ③蒸気圧

75 評価Iで採用した値は、IUCLID(2000)に記載されたEU Method A.4による20°Cでの測定  
76 値(8,700 Pa)である。同情報源には、ASTM規格又は同等と書かれている測定値(8330 Pa)も  
77 ある。評価IIにおいては、これらの値の算術平均値である8,500 Paを用いることとする。

78

79 ④水に対する溶解度

80 評価Iで採用した値は、IUCLID(2000)に記載されたEU Method A.6による20°Cでの測定  
81 値(8,690 mg/L)とECHAに記載されたOECD TG 105による25°Cでの測定値(7,900 mg/L)を  
82 20°Cに補正した値(7,374 mg/L)の算術平均値(8,032 mg/L)である。評価IIにおいてもこの値  
83 (8,032 mg/L)を用いる。

84

85 ⑤logPow

86 評価Iで採用した値は、IUCLID(2000)に記載されたEU Method A.8による測定値(1.48)と  
87 ECHAに記載されたOECD TG 107による測定値(1.45)の算術平均値(1.465)である。評価IIにおいては、ECHAに記載されたOECD TG 107による測定値(1.45)を用いる。

88

89 ⑥ヘンリ－係数

90 評価Iで採用した値は、EHC及びMackay(2006)に記載された25°Cでの値(111.5 Pa·m<sup>3</sup>/mol)  
91 を20°Cに補正した値(146 Pa·m<sup>3</sup>/mol)である。評価IIにおいては、測定値とされている値の中  
92 の最頻値であり、IUCLID(2000)、ECHA、OECD(2002)に記載された20°Cでの測定値(149 Pa·  
93 m<sup>3</sup>/mol)を用いる。

94

95 ⑦Koc

96 評価Iで採用した値は、HSDB(2001)に記載された値(33 L/kg)である。ECHA、OECD(2002)  
97 のキースタディ及びHoward(1989)にも同値が記載されており、silt loamに対する測定値である。  
98 評価IIにおいてもこの値(33 L/kg)を用いる。

99

100 ⑧BCF

101 評価Iで採用した値(77.1 L/kg)は、NITE(2005)に記載された化審法における濃縮度試験の  
102 結果(MITI, 1978)の最大値であるが、テトラクロロエチレンのもので1, 2-ジクロロエタ  
103 ネの測定値ではない。一方で、同情報源には、ブルーギルによる14日間の濃縮度試験の結  
104 果、BCFが2であったと書かれている。IUCLID(2000)、ECHA、OECD(2002)にも同値が記  
105 載されており、評価IIにおいてもこの値(2.0 L/kg)を用いる。

106

107

108

109 ⑨BMF

110 評価Iで採用した値は、logPow (1.45) 及び BCF (2.0 L/kg) から化審法における優先評価化  
111 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。) に従って  
112 設定したものである。BMF の測定値は得られなかつたため、評価IIにおいてもこの値 (1) を  
113 用いる。

114

115 ⑩酸解離定数

116 評価Iにおいては解離を考慮しないため、参考値は設定されていない。また、1, 2-ジ  
117 クロロエタンは解離性の基を有していない。

118

119 1-3 分解性

120 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

121

122 表 1-3 分解に係るデータのまとめ\*

項目		半減期 (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期	NA	
	OH ラジカルとの反応	73	北大西洋および南大西洋上の大気中の塩素化炭化水素の測定値から、OHラジカル濃度を $5 \times 10^5$ molecule/cm <sup>3</sup> として算出 <sup>1,2)</sup>
	オゾンとの反応	NA	
	硝酸ラジカルとの反応	NA	
水中	水中における総括分解半減期	NA	
	機序別 の半減期	生分解 加水分解 光分解	10,000 26,280 NA
			分解度試験 <sup>3)</sup> からの換算値 <sup>4)</sup> pH7、25°Cでの測定値 <sup>6,7)</sup>
土壤	土壤における総括分解半減期	NA	
	機序別 の半減期	生分解 加水分解	10,000 26,280
			水中生分解の項参照 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 加水分解	40,000 26,280
			水中生分解半減期の4倍と仮定 <sup>4)</sup> 水中加水分解の項参照

123 ※令和元年度第3回化審法のリスク評価等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(令和2年2月6日)  
124 で了承された値

125 1) IUCLID(2000)

6) ECHA

126 2) Howard(1991)

7) EHC(2006)

127 3) MHLW, METI, MOE(2014)

8) NITE(2005)

128 4) ATSDR(2001)

NA:情報が得られなかつたことを示す

129 5) MITI(1978)

130

131 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  
132 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。

133

134 ①大気

135 大気中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期につい  
136 ても、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応に関する情報は得られなかった。直接光分解につい  
137 ては、IUCLID(2000)において、1, 2-ジクロロエタンは、290 nm を超える波長の光を吸  
138 収せず、大気中での直接光分解は起こり得ないと記述があり、また Howard(1991)におい  
139 ても、直接光分解は、重要な分解プロセスではないとの記載がある。

140 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

141 大気中における OH ラジカルとの反応速度定数に関しては、IUCLID(2000)に、野外の測定  
142 値から、技術ガイダンスと同じ  $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$  を大気中 OH ラジカル濃度とし半減期を  
143 求めた報告(Class ら,1986 及び Arnts ら,1989)が得られた。記載された反応速度定数は、 $2.2 \times 10^{-13} \text{ cm}^3/\text{molecule-sec}$ (Class ら,1986) (北大西洋及び南大西洋上の大気中の塩素化炭化水素の分  
144 布測定)、 $2.5 \times 10^{-13} \text{ cm}^3/\text{molecule-sec}$ (Arnts ら,1989) (相対速度法、酸素の存在下、室温) であ  
145 り、前者の値は ATSDR(2001)にも記載されている。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダ  
146 ンスの  $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$  とした場合、半減期はそれぞれ、73 日、64 日と算出される。評価  
147 IIではこれらの値のうちより長い 73 日(Class ら,1986) を用いる。

149

150 ②水中

151 水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかつたが、生分解と加水分解の機序別  
152 の半減期に関する情報が得られた。

153 ②-1 生分解の半減期

154 水中での生分解半減期に関し得られた OECD TG 準拠の測定データは、MITI(1978)のみで  
155 あり、被験物質濃度 100 mg/L、活性汚泥濃度 30 mg/L で 14 日間試験を行った結果、BOD 分  
156 解度、TOC 分解度、GC 分解度はそれぞれ 0 %、1.6 %、1.1 % であった。

157 その他の情報源において得られた好気性条件下の測定値データは、メタンなどの他の炭  
158 素源の添加(ECHA のキースタディ)又は汚染サイト等で微生物の事前の馴化(Howard(1991),  
159 U.S.EPA(2008)) がされた条件下の結果であり、技術ガイダンスにおいて推奨する TG の条  
160 件とは異なるものであった。

161 OECD(2002)では、「1, 2-ジクロロエタンの生分解性を研究するために、さまざまな  
162 調査が行われているが、利用可能な標準化されたスクリーニング研究はない」と記載の上で、  
163 「許容される原則に従って実施された非ガイドライン研究では、未馴化条件下では土壤お  
164 よび水中で生分解性ではないが、馴化された微生物の使用やメタン濃縮後には生分解性を  
165 示す。」と記されている。また、「環境条件下では、1, 2-ジクロロエタンの生分解は遅  
166 すぎて重要な環境運命のプロセスにはならない。」とも記している。ECHA の Summary に  
167 おいても、同様の記載が見られた。

168 これらの情報を踏まえ、評価IIでは、MITI(1978)の結果から技術ガイダンスに従って求め

169 た 10,000 日を、水中での生分解半減期として用いる。

170 **②-2 加水分解の半減期**

171 いくつかの情報源において、pH7、25°Cにおける測定に基づく加水分解半減期の記載があ  
172 り、EHC(2006)で 72 年、IUCLID(2000)で 6 年（リン酸緩衝液（50 mM）、硫化物（1 mM）の  
173 添加）から 72 年（蒸留水の添加）、ECHA で 6 年（50 mM リン酸緩衝液）又は 64 年（バッ  
174 ファーなし、外挿）であった。なお、NITE(2005)においては、「pH7、25°Cでの半減期は 72  
175 年と推定されているので、一般的な水環境中では事実上加水分解されない」と記載がある。

176 評価IIでは、これらの情報のうち最も長い 72 年（26,280 日）を、加水分解の半減期として  
177 用いる。

178

179 **③土壤**

180 土壤中での総括分解半減期及び機序別の半減期に関する情報は得られなかった。

181 **③-1 生分解の半減期**

182 半減期に関するデータは得られなかつたため、評価IIでは、土壤中での生分解半減期は技  
183 術ガイダンスに従って、水中の生分解半減期と同値である 10,000 日とする。

184 **③-2 加水分解の半減期**

185 半減期に関するデータは得られなかつたため、評価IIでは、土壤中での加水分解半減期は  
186 技術ガイダンスに従って、水中の加水分解半減期と同値である 26,280 日とする。

187

188 **④底質**

189 底質中での総括分解半減期及び機序別の半減期に関する情報は得られなかつた。

190 **④-1 生分解の半減期**

191 半減期に関するデータは得られなかつたため、底質中での生分解半減期は、技術ガイダン  
192 スに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 40,000 日とする。

193 **④-2 加水分解の半減期**

194 半減期に関するデータは得られなかつたため、評価IIでは、底質中での加水分解半減期  
195 は技術ガイダンスに従って、水中の加水分解半減期と同値である 26,280 日とする。

196    2 【付属資料】

197    2-1 物理化学的性状等一覧

198    収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

199

200    出典)

201    Arnts, R. R., Seila, R. L., & Bufalini, J. J. (1989). Determination of room temperature OH rate  
202    constants for acetylene, ethylene dichloride, ethylene dibromide, p-dichlorobenzene and carbon  
203    disulfide. *Japca*, 39(4), 453-460.

204    ATSDR(2001) : Agency for Toxic Substances and Disease Registry. "Toxicological Profile for 1,2-  
205    dichloroethane", Toxicological Profiles. 2001.

206    Class, T., & Ballschmiter, K. (1986). Chemistry of organic traces in air VI: Distribution of  
207    chlorinated C1・C4 hydrocarbons in air over the northern and southern Atlantic Ocean.  
208    *Chemosphere*, 15(4), 413-427.

209    ECHA: 1,2-dichloroethane – scientific properties <https://echa.europa.eu/brief-profile/-/briefprofile/100.003.145>, (2019-10-21 閲覧).

211    EHC(2006) : INTERNATIONAL PROGRAMME ON CHEMICAL SAFETY ENVIRONMENTAL  
212    HEALTH CRITERIA 176

213    Howard(1989) : Howard, P. H. et al. *Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for*  
214    *Organic Chemicals*. CRC Press, 1989.

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

217    HSDB(2001) : US NIH. Hazardous Substances Data Bank. <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, (2019-12-12 閲覧).

219    IUCLID(2000) : EU ECB. *IUCLID Dataset, 1,2- dichloroethane*. 2000.

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

222    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ガ  
223    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.

224    MITI(1978) : ジクロロエタン (試料 No.K-22) の分解度試験成績報告書. 既存化学物質点検,  
225    1978.

226    MOE(2003) : 化学物質の環境リスク評価 第2巻, 1,2-ジクロロエタン. 2003.

227 NITE(2005) : 化学物質の初期リスク評価書, 1,2-ジクロロエタン. Ver. 1.0, No. 3, 2005.

228 OECD(2002) : SIDS Initial Assessment Report, 1,2- dichloroethane. 2002.

229 U.S.EPA(2008) : Natural Attenuation of the Lead Scavengers 1,2-Dibromoethane (EDB) and 1,2-

230       Dichloroethane (1,2-DCA) at Motor Fuel Release Sites and Implications for Risk Management.

231       2008.

232

233 **2 - 2 その他**

234 特になし。

235

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, 16th, John Wiley & Sons
CICAD	WHO/IPCS:「国際簡潔評価文書(CICAD)」
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics, 100th, CRC-Press
ECHA	Information on Chemicals – Registered substances.
EHC	WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
Howard FATE	Handbook of Environmental FATE & EXPOSURE
Howard Deg	Handbook of Environmental Degradation Rates
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUCLID	EU ECB International Uniform Chemical Information Database
Mackay	Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Second Edition
Merck	The Merck Index, 15th Ed, Merck & Co, RSC Publishing
MOE初期評価	環境省環境リスク評価室:「化学物質の環境リスク評価」
NITE初期リスク評価書	(独) 製品評価技術基盤機構:「化学物質の初期リスク評価書」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
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

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

## 分子量

### 収集データ

情報源名	値	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	98.96			p.924
2 ATSDR	98.96		Lide 1998	155
3 CRC	98.959			Laboratory Solvents and other Liquid Reagents
4	98.959			Physical Constants of Organic Compounds
5	98.959			Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
6 EHC	98.96		Archer WJ (1979) Chlorocarbons and chlorohydrocarbons. In: Kirk J & Othmer DF ed. Encyclopedia of chemical technology, 3rd ed. New York, John Wiley & Sons, vol 5, pp 723-743. Chiou CT, Peters LJ, & Freed VH (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science, 206: 831-832. Konemann H (1981) Quantitative structure-activity relationships in fish toxicity studies. Part 1: Relationship for 50 industrial pollutants. Toxicology, 19: 209-221.  Warner HP, Cohen JM, & Ireland JC (1987) Determination of Henry's Law Constants of selected priority pollutants. Washington, DC, US Environmental Protection Agency, Office of Science and Development (EPA-600/D-87/229). Worthing CR ed. (1991) The pesticide manual. Farnham, Surrey, The British Crop Protection Council.	2.2 Physical and chemical properties
7 EPI Suite	98.96			
8 Howard FATE	98.96			Volume II, p153
9 HSDB	98.959		[O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2013., p. 702]	Molecular weight
10 Mackay	98.959	-		p.975
11 Merck	98.95			<a href="https://www.rsc.org/merck-index/">https://www.rsc.org/merck-index/</a>
12 MOE初期評価	98.96			P127 1.物質に関する基本的事項 (1)分子式・分子量・構造式
13 NITE初期リスク評価書	98.96			P.1 2.一般情報
14 PhysProp	98.96	-		p.1
15 SIDS	98.96			p.13

## 基本情報

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCCl

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1	Aldrich	融点	-35 °C	-35	-	-	-	-	-		2B	x			p.924
2		融点	-35.5 °C	-35.5	-	-	-	-	-		2B	x			
3	ATSDR	融点	-35.5 °C	-35.5	-	-	-	-	-		2B	x		Lide DR. 1998. CRC handbook of chemistry and physics: A ready-reference book of chemical and physical data. 79th ed. Boca Raton, FL: CRC Press..	p.155
4	CCD	凝固点	-35.5 °C	-35.5	-	-	-	-	-		2B	x			P.583
5	CICAD	融点	-35.7 °C	-35.7	-	-	-	-	-		2B	x			international chemical safety card
6	CRC	融点	-35.6 °C	-35.6	-	-	-	-	-		2B	x			Enthalpy of Fusion
7		融点	-35.6 °C[- 35.6(0.2)]	-35.6	-	-	-	-	-		2B	x			Physical Constants of Organic Compounds
8		融点	-35.6 °C	-35.6	-	-	-	-	-		2B	x			Laboratory Solvents and other Liquid Reagents
9		融点	-35.6 °C	-35.6	-	-	-	-	-		2B	x			Properties of Refrigerants
10	EHC	融点	-35 °C	-35	-	-	-	-	-		2B	x		Archer WJ (1979) Chlorocarbons and chlorohydrocarbons. In: Kirk J & Othmer DF ed. Encyclopedia of chemical technology, 3rd ed. New York, John Wiley & Sons, vol 5, pp 723-743. Chiou CT, Peters LJ, & Freed VH (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science, 206: 831-832. Konemann H (1981) Quantitative structure-activity relationships in fish toxicity studies. Part 1: Relationship for 50 industrial pollutants. Toxicology, 19: 209-221. Warner HP, Cohen JM, & Ireland JC (1987) Determination of Henry's Law Constants of selected priority pollutants. Washington, DC, US Environmental Protection Agency, Office of Science and Development (EPA-600/D-87/229). Worthing CR ed. (1991) The pesticide manual. Farnham, Surrey, The British Crop Protection Council.	2.2 Physical and chemical properties
11	EPI Suite	融点	-76.77 °C	-76.77	MPBPWIN			(Q)SAR	Mean Value		2C	x			

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
Howard FATE	融点	-35.36 °C	-35.36	-	-	-	-	-		2B	×			Volume II, p153
HSDB	融点	-35.6 °C	-35.6	-	-	-	-	-		2B	×		[Haynes, W.M. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 95th Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2014-2015, p. 3-162]	Melting point
IUCLID	融点	-36 °C[Thermal decomposition > 200°C]	-36							4A	×		Hydro Plast AB Stenungsund	p.35
15	融点	-35.5 °C	-35.5		no data					4A	×	Decomposition: no Sublimation: no	ICI Chemicals & Polymers Limited Runcorn, Cheshire Hydro Plast AB Stenungsund	p.35
16	融点	-35.5 °C	-35.5							4A	×		Hoechst AG Frankfurt/Main Celanese GmbH Frankfurt am Main	p.35
17	融点	-36 °C[Thermal decomposition > 200°C]	-36							4A	×		BASF AG Ludwigshafen	p.35
18	融点	-35 °C	-35	その他,ASTM or equivalent						4A	×	Remark: ASTM or equivalent	Occidental Chemical Corporation Niagara Falls, NY 14302-0728	p.36
IUCLID	融点	-35.3 °C	-35.3	EU Method A.1, Directive 84/449/EEC, A.1 "Melting point/melting range"	no data					1B	○	Year: 1995	Petrasol B.V. Gorinchem	p.35
20	融点	-35.8～-35 °C	-35.4		no data					4A	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.35
21	融点	-35.8～-35 °C	-35.4		no data					4A	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl	p.35

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CClC

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
22	融点	-36 °C	-36							4A	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.35
23	融点	-36 °C[Thermal decomposition > 200°C]	-36							4A	×		ICI Chemicals & Polymers Limited Runcorn, Cheshire	p.35
24	Mackay	融点	-35.7 °C	-35.7	-	-	-	-	-	2B	×		Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, CRC Press, LLC. Boca Raton, Florida..	p.975
25	Merck	融点	-40 °C[mp ≈ - 40 °C]	-40	-	-	-	-	-	2B	×			<a href="https://www.rsc.org/merck-index/">https://www.rsc.org/merck-index/</a>
26	MOE初期評 価	融点	-35.3 °C	-35.3	-	-	-	-	-	2B	○		CRC Handbook of Chemistry and Physics. 81st Ed. (2000): Boca Raton, FL. CRC Press Inc.	P127 1.物質に関する 基本的事項 (2) 物理 化学的性状
27	NITE初期リ スク評価書	融点	-35.7 °C	-35.7		-	-	-	-	2B	×		IPCS, International Programme on Chemical Safety (1999) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva. ( <a href="http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtash/index.htm">http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtash/index.htm</a> から引用)	P.2 3.物理化学的性 状
28	PhysProp	融点	-35.5 °C	-35.5	-	-	-	-	-	2B	×			p.1
29	ECHA	融点	-36 °C	-36			4: not assignable			4A	×		Hüls AG (1994): 1,2-Dichlorethan. Safety Data Sheet as of 13.01.1994.. Nabert, K., Schoen, G. (1963). Sicherheitstechnische Kennzahlen brennbarer Gase und Dämpfe, 2. Aufl., Deutscher Eichverlag GmbH, Braunschweig, 68..	NS NS Melting point/freezing point.001
30		融点	-35.5 °C	-35.5	-	no data	2: reliable with restrictions	supporting study	-	4A	×		Environmental Hazard Assessment. 1,2- Dichloroethane. Toxic Substances Division. Directorate for Air, Climate and Toxic Substances. Dept. of Environment.	No type Supporting Melting point/freezing point. 001
31	SIDS	融点	-35.5 °C	-35.5	-	no data	4: not assignable	key study	-	4A	×		Environmental Hazard Assessment. 1,2- Dichloroethane. Toxic Substances Division. Directorate for Air, Climate and Toxic Substances. Dept. of Environment.	p.7;p.13;SIDS Dossier p.59

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
32		融点	-36 °C	-36	-	-	4: not assignable	key study	-		4A	×		Hüls AG (1994): 1,2-Dichlorethan. Safety Data Sheet as of 13.01.1994. Nabert, K., Schoen, G. (1963). Sicherheitstechnische Kennzahlen brennbarer Gase und Daempfe, 2. Aufl., Deutscher Eichverlag GmbH, Braunschweig, 68.	p.7;p.13;SIDS Dossier p.59
33	既存点検事業	融点	-35.3 °C	-35.3	-	-	-	-	-		4A	○		提示資料.	K0022

## 基本情報

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CCl2

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	83 °C	83			-	-	-	-		4A	x				p.924
2 ATSDR	83.5 °C	83.5			-	-	-	-		4A	x		Lide DR. 1998. CRC handbook of chemistry and physics: A ready-reference book of chemical and physical data. 79th ed. Boca Raton, FL: CRC Press..	p.155	
3 CCD	83.5 °C	83.5			-	-	-	-		4A	x				P.583
4 CICAD	83.5 °C	83.5			-	-	-	-		4A	x				international chemical safety card
5 CRC	83.4 °C	83.4	83.4	760 mmHg[@7 60mm Hg]	-	-	-	-		2B	x				Laboratory Solvents and other Liquid Reagents
6	83.4 °C	83.4	83.4	101.325 kPa[@101. 325 kPa]	-	-	-	-		2B	x				Flammability of Chemical Substances
7	83.4 °C	83.4	83.4	101.325 kPa[@101. 325 kPa]	-	-	-	-		2B	x				Properties of Refrigerants
8	83.4 °C	83.4	83.4	101.325 kPa[@101. 325 kPa]	-	-	-	-		2B	x		1. Majer, V., and Svoboda, V., Enthalpies of Vaporization of Organic Compounds, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1985.	Enthalpy of Vaporization	
9	356.6 K[356.6(1)]	83.45	83.45	101.325 kPa[@101. 325 kPa]	-	-	-	-		2B	x		33. Christou, G., Young, C. L., and Svejda, P., Ber. Bunsen-Ges. Phys. Chem. 95, 510, 1991. 34. Christou, G., Ph.D. Dissertation, Univ. Melbourne, 1988. 268. Garcia-Sanchez, F., and Trejo Rodriguez, A., J. Chem. Thermodyn. 17, 981, 1985. 269. Hojendahl, K., Mat.-Fys. Medd. - K. Dan. Vidensk. Selsk. 24, 1, 1946.	Critical Constants of Organic Compounds	
10	83.4 ° C[83.4(0.1)]	83.4			-	-	-	-		4A	x				Physical Constants of Organic Compounds

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CC(Cl)Cl

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
11 EHC	83 °C	83			-	-	-	-			4A	x		Archer WJ (1979) Chlorocarbons and chlorohydrocarbons. In: Kirk J & Othmer DF ed. Encyclopedia of chemical technology, 3rd ed. New York, John Wiley & Sons, vol 5, pp 723-743. Chiou CT, Peters LJ, & Freed VH (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science, 206: 831-832. Konemann H (1981) Quantitative structure-activity relationships in fish toxicity studies. Part 1: Relationship for 50 industrial pollutants. Toxicology, 19: 209-221. Warner HP, Cohen JM, & Ireland JC (1987) Determination of Henry's Law Constants of selected priority pollutants. Washington, DC, US Environmental Protection Agency, Office of Science and Development (EPA-600/D-87/229). Worthing CR ed. (1991) The pesticide manual. Farnham, Surrey, The British Crop Protection Council.	2.2 Physical and chemical properties
12 EPI Suite	104.72 °C	104.72			MPBPWIN			(Q)SAR	Adapted Stein and Brown	2C	x				
13 Howard FATE	83.47 °C	83.47	83.47	760 mmHg	-	-	-	-		2B	x			Volume II, p153	
14 HSDB	83.4 °C	83.4			-	-	-	-		4A	x		[Haynes, W.M. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 95th Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2014-2015, p. 3-162]	Boiling Point	
15 IUCLID	83.5 °C	83.5	83.508025	1013 hPa	その他,ASTM or equivalent					4A	○	Remark: ASTM or equivalent	Occidental Chemical Corporation Niagara Falls, NY 14302-0728	p.36	
16	82.9 °C	82.9	83.32459	1000 hPa						4A	x		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.36	
17	83.5 °C	83.5			no data					4A	x	Decomposition: no	ICI Chemicals & Polymers Limited Runcorn, Cheshire Hydro Plast AB Stenungsund	p.36	
18	83.5~84.1 °C	83.8	83.808031	1013 hPa						4A	x		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.36	
19 IUCLID	83.7 °C	83.7	83.708029	1013 hPa	EU Method A.2, Directive 84/449/EEC, A.2 "Boiling point/boiling range"	no data				1B	○	Year: 1991	Petrasol B.V. Gorinchem	p.36	

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CC(Cl)Cl

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等	
20	84 °C	84	84.008036	1013 hPa							4A	x		ICI Chemicals & Polymers Limited Runcorn, Cheshire Hydro Plast AB Stenungsund	p.36	
21	84 °C	84									4A	x		BASF AG Ludwigshafen	p.37	
22	83.5~84.1 °C	83.8	83.808031	1013 hPa							4A	x		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl	p.36	
23	83.5 °C	83.5	83.508025	1013 hPa							4A	x		Hoechst AG Frankfurt/Main Celanese GmbH Frankfurt am Main	p.36	
24	Mackay	85.3 °C	85.3		-	-	-	-	-		4A	x		Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, CRC Press, LLC. Boca Raton, Florida..	p.975	
25	Merck	83~84 °C[bp 83-84 °C]	83.5		-	-	-	-	-		4A	x			<a href="https://www.rsc.org/merck-index/">https://www.rsc.org/merck-index/</a>	
26	MOE初期評 価	83.5 °C	83.5		-	-	-	-	-		4A	x		Hawley's Condensed Chemical Dictionary 13th Ed. (1997); New York, NY. John Wiley & Sons, Inc.	P127 1.物質に関する基 本的事項 (2) 物理化学的 性状	
27	NITE初期リ スク評価書	単位換算不可			-	-	-	-	-		3	x		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed. Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.	P.2 3.物理化学的性状	
28		83~84 °C	83.5		-	-	-	-	-		4A	x		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed. Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.	P.2 3.物理化学的性状	
29	PhysProp	83.5 °C	83.5		-	-	-	-	-		4A	x			p.1	
30	ECHA	83.6 °C	83.6	83.6	760 mmHg	その他,no guideline followed	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result	Based on two independent experiments the boiling point was determined to be 83.6 °C at 760 mm Hg.	4A	○		Mumford, S.A.; Phillips, J.W.C.(1950) The Physical Properties of Some Aliphatic Compounds. J.Chem.Soc., CODEN: JCSOA9, 1950, 75,78 : pertinent	Exp, Key, Boiling point. 001

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CC(Cl)Cl

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
31 SIDS	83.5~84.1 °C	83.8	83.8	10.13 hPa	-	-	4: not assignable	key study	-		4A	x		Archer, W.L. (1979): Chlorocarbons and chlorohydrocarbons In: Kirk-Othmer, Encyclopedia of Chemical Technology, Vol. 5, 3rd ed., John Wiley & Sons, N.Y., 668 - 676, 724 - 733, 740 - 742. ARGE Elbe (1982): Arbeitsgemeinschaft fuer die Reinhaltung der Elbe. Chlorierte Kohlenwasserstoffe - Daten der Elbe. Bericht ueber die Ergebnisse des Schwerpunktmessprogramms-Chlorierte Kohlenwasserstoffe im Elbschnitt von Schnackenburg bis zur Nordsee, 1980 - 1982, 22 - 28. Dreher, E.-L. (1986): Chlorinated hydrocarbons. 2. Chloroethanes. 2.3 1,2-Dichloroethane. In: Gerhartz, W. (ed.), Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Vol. A6, 5th ed., Verlag Chemie, Weinheim, 233, 263 - 271, 379 - 395. Hardie, D.W.F (1964): Chlorocarbons and chlorohydrocarbons In: Kirk-Othmer, Encyclopedia of Chemical Technology, Vol. 5, 2nd ed., John Wiley & Sons, N.Y., 149 - 154, 195. Hüls AG (1994): 1,2-Dichlorethan. Safety Data Sheet as of 13.01.1994. Leichnitz, K. (1988): Gefahrstoff-Analytik 2, 1 - 4. Verschueren, K. (ed.) (1983): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd ed., Van Nostrand Reinhold, New York, 643. Weast, R.C. (ed.) (1988): CRC Handbook of Chemistry and Physics, CRC Press Inc., Boca Raton, Florida, C-264, D -197.	p.7;p.13;SIDS Dossier p.59
32 既存点検事業	83.5 °C	83.5			-	-	-	-	-		4A	x		提示資料.	K0022

## 基本情報

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCl

## 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 [°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	キースタディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	102 hPa	10200	7230.8068	25 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×			
2	87 mmHg	11599.04605	8222.5942	25 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×			
3 ATSDR	79.1 mmHg	10545.79934	7475.9449	25 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×		Daubert et al. 1989	155
4 CICAD	8.5 kPa	8500	8500	20 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×		Identity and physical/chemical properties	
5	8.7 kPa	8700	8700	20 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×		international chemical safety card	
6 CRC	1 kPa	1000	18328.296	-16.4 °C	-	-	-	-	-	-	4A	×		1. Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994.	Vapor Pressure
7	10.6 kPa	10600	7514.3679	25 °C [@25°C]	-	-	-	-	-	-	2B	×		Flammability of Chemical Substances	
8	10.6 kPa	10600	7514.3679	25 °C [@25°C]	-	-	-	-	-	-	2B	×		Laboratory Solvents and other Liquid Reagents	
9	10 kPa	10000	7743.7241	23.7 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×		1. Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994.	Vapor Pressure
10	100 kPa	100000	2641.925	83.1 °C	-	-	-	-	-	-	4A	×		1. Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994.	Vapor Pressure

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
11 EHC	8.5 kPa	8500	8500	20 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×		Archer WJ (1979) Chlorocarbons and chlorohydrocarbons. In: Kirk J & Othmer DF ed. Encyclopedia of chemical technology, 3rd ed. New York, John Wiley & Sons, vol 5, pp 723-743. Chiou CT, Peters LJ, & Freed VH (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science, 206: 831-832. Konemann H (1981) Quantitative structure-activity relationships in fish toxicity studies. Part 1: Relationship for 50 industrial pollutants. Toxicology, 19: 209-221. Warner HP, Cohen JM, & Ireland JC (1987) Determination of Henry's Law Constants of selected priority pollutants. Washington, DC, US Environmental Protection Agency, Office of Science and Development (EPA-600/D-87/229). Worthing CR ed. (1991) The pesticide manual. Farnham, Surrey, The British Crop Protection Council.	2.2 Physical and chemical properties
12 EPI Suite	10100 Pa	10100	7159.9165	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
13 Howard FATE	78.7 mmHg[[3]]	10492.47039	10492.47	20 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×		[3] Boublk t et al; The Vapor Pressure of Pure Substances Vol 17: Amsterdam, Netherlands: Elsevier Sci Publ (1984)	Volume II, p153
14 HSDB	78.9 mmHg	10519.13487	7457.0424	25 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×		[Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis, 1989.]	Vapor Pressure
15 IUCLID	87 hPa	8700	8700	20 °C							4A	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.39
16	85 hPa	8500	8500	20 °C		no data					4A	×		ICI Chemicals & Polymers Limited Runcorn, Cheshire Hydro Plast AB Stenungsund	p.39

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
17	IUCLID	87 hPa	8700	8700	20 °C	EU Method A.4, Directive 84/449/EEC, A.4 "Vapour pressure"	no data					1B	○	Year: 1982	Petrasol B.V. Gorinchem	p.39
18		33.3 hPa	3330	14955.4	0 °C							4A	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl	p.38
19		86 hPa	8600	8600	20 °C							4A	×		ICI Chemicals & Polymers Limited Runcorn, Cheshire Hydro Plast AB Stenungsund	p.39
20		86 hPa	8600	8600	20 °C							4A	×		BASF AG Ludwigshafen	p.39
21	IUCLID	83.3 hPa	8330	8330	20 °C	その他, ASTM or equivalent			experimental result			4A	○	Remark: ASTM or equivalent	Occidental Chemical Corporation Niagara Falls, NY 14302-0728	p.39
22		33.3 hPa	3330	14955.4	0 °C							4A	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.38
23		53.3 hPa	5330	10999.793	10 °C							4A	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.39
24		312 hPa	31200	4645.4623	50 °C							4A	×		Hoechst AG Frankfurt/Main Celanese GmbH Frankfurt am Main	p.39
25		86.7 hPa	8670	8670	20 °C							4A	×		Hoechst AG Frankfurt/Main Celanese GmbH Frankfurt am Main	p.39
26	Mackay	8520 Pa	8520	6039.8504	25 °C	-	-	-	-			2B	×		McConnell, G., Ferguson, D.M., Pearson, C.R. (1975) Chlorinated hydrocarbons and the environment. Endeavor XXXVI, 13–18..	p.975
27		11110 Pa	11110	7875.9082	25 °C	-	-	-	その他, selected	-		2B	×		Riddick, J.A., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents: Physical Properties and Methods of Purification. 4th Edition, John Wiley & Sons, New York..	p.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
28		8270 Pa	8270	8270	20 °C	-	-	-	その他,quoted from DIPPR	-		2B	×		Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022..	p.975
29		10500 Pa	10500	7443.4776	25 °C	-	-	-	estimated by calculation	calculated- Antoine eq.		2B	×		Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1973) The Vapour Pressure of Pure Substances. Elsevier, Amsterdam..	p.975
30		10150 Pa	10150	7195.3617	25 °C	-	-	-	estimated by calculation	calculated- Antoine eq.,		2B	×		Weast, R.C., Ed. (1972–73) Handbook of Chemistry and Physics. 53th ed. CRC Press, Cleveland..	p.975
31		10700 Pa	10700	7585.2581	25 °C	-	-	-	estimated by calculation	calculated- Antoine eq.,		2B	×		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.975
32		10740 Pa	10740	7613.6142	25 °C	-	-	-	内挿(補 間)	interpolated- Antoine eq., regression, temp range –30.8 to 99.4°C,		2B	×		該当なし.	p.975
33		10660 Pa	10660	7556.902	25 °C	-	-	-	-			2B	×		McGovern, E.W. (1943) Chlorohydrocarbon solvents. Ind. Eng. Chem. 35(12), 1230–1239..	p.975
34		10519 Pa	10519	7456.9467	25 °C	その他, isoteniscopic method, measured range –30.82 to 99.4°C	-	-	-	-		2B	×		Pearce, J.N., Peters, P.E. (1929) The vapor pressure of ethylene chloride between –300 and 1000. J. Phys. Chem. 33, 873–878..	p.975
35		12980 Pa	12980	6597.4569	30 °C	-	-	-	-			2B	×		Rex, A. (1906) über die löslichkeit der halogenderivate der kohlenwasserstoffe in wasser. Z. Phys. Chem. 55, 355–370..	
36		13320 Pa	13320	6770.2716	30 °C	-	-	-	その他,quoted from DIPPR	-		2B	×		Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022..	p.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
37	11100 Pa	11100	7868.8192	25 °C	-	-	-	estimated by calculation	calculated-Antoine eq.	2B	×		Stephenson, R.M., Malanowski, S. (1987) Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds. Elsevier Science Publishing Co., Inc., New York..	p.975	
38	8130 Pa	8130	8130	20 °C	-	-	-	-	-	2B	×		Rex, A. (1906) über die loslichkeit der halogenderivate der kohlenwasserstoffe in wasser. Z. Phys. Chem. 55, 355–370..	p.975	
39	10500 Pa	10500	7443.4776	25 °C	-	-	-	-	-	2B	×		Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1984) The Vapor Pressures of Pure Substances. 2nd Edition, Elsevier, Amsterdam.. Dean, J.A., Editor (1985) Lange's Handbook of Chemistry. 13th Edition, McGraw-Hill Book Company, New York.. Dean, J.D., Editor (1992) Lange's Handbook of Chemistry. 14th ed. McGraw-Hill, Inc., New York.	p.975	
40	65145 Pa	65145	3278.5718	70 °C	その他,vapor-liquid equilibrium VLE data, measured range 28.75–85.54°C,	-	-	-	-	4A	×		Gutsche, B., Knapp, H. (1982) Isothermal measurements of vapor-liquid equilibria for three n-alkane-chloroalkane mixtures. Fluid Phase Equil. 8, 285–300..	p.975	
41	13282 Pa	13282	6750.957	30 °C	その他,vapor-liquid equilibrium VLE data, measured range 28.75–85.54°C,	-	-	-	-	2B	×		Gutsche, B., Knapp, H. (1982) Isothermal measurements of vapor-liquid equilibria for three n-alkane-chloroalkane mixtures. Fluid Phase Equil. 8, 285–300..	p.975	
42	8400 Pa	8400	5954.7821	25 °C	-	-	-	-	-	2B	×		Pearson, C.R., McConnell, G. (1975) Chlorinated C1 and C2 hydrocarbons in the marine environment. Proc. Roy. Soc. London B189, 305–322..	p.975	
43	16720 Pa	16720	6159.4538	35 °C	-	-	-	その他,quoted from DIPPR	-	4A	×		Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022..	p.975	

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
44		10462 Pa	10462	7416.5393	25 °C	その他,resistance measurements -Antoine eq.	-	-	-	-		2B	×		Foco, G.M., Bottini, S.B., Brignole, E.A. (1992) Isothermal vapor-liquid equilibria for 1,2-dichloroethane-anisole and trichloroethylene-anisole systems. J. Chem. Eng. Data 37, 17-19..	p.975
45	MOE初期評 価	78.9 mmHg	10519.13487	7457.0424	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×		Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. (1989): Washington, DC. Taylor & Francis, Inc.	P127 1.物質に関する基 本的事項 (2) 物理化学的 性状
46	NITE初期リ スク評価書	5.3 kPa	5300		10	-	-	-	-	-		4A	×		Verschueren, 2001	P.2 3.物理化学的性状
47		8.1 kPa	8100	8100	20 °C	-	-	-	-	-		2B	×		Verschueren, 2001	P.2 3.物理化学的性状
48		14.0 kPa	14000	7115.9011	30 °C	-	-	-	-	-		2B	×		Verschueren, 2001	P.2 3.物理化学的性状
49	PhysProp	78.9 mmHg	10519.13487	7457.0424	25 °C	-	-	-	-	experimental result	-	2B	×		DAUBERT,TE & DANNER,RP (1985). p.1	
50	ECHA	76.86 Torr[corresponding to 10247 Pa or 76.85 mm Hg]	10247.15724	7264.2367	298.15 K	その他,Static equilibration method	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×		Nath, J.; Tiwari, M.; Kumar, S. (1994) Vapour Pressures and Activity Coefficients for Binary Systems of Anisole with Dichloromethane, 1,2-Dichloroethane, Trichloroethene, Tetrachloroethene and cyclohexane at 298.15 K. J.Chem.Res.Miniprint, CODEN: JRMPDM(9), 1994, 1846-1867; BABS-5947422 : pertinent p 1853	Exp, Key, Vapour pressure. 001
51	SIDS	81.3 hPa	8130	8130	20 °C	-	-	4: not assignable	key study	-		4A	×		Verschueren, K. (ed.) (1983): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd ed., Van Nostrand Reinhold, New York, 643.	p.7;p.13;SIDS Dossier p.60

## 基本情報

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1,2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCl

## 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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1	ATSDR	[Miscible] 8.69E3 mg/L	単位換算不可 8690		8690	20 °C		-	-	-	-		3	x	Budavari et al. 1996	155	
2								-	-	-	-		2B	x	Verschueren 1996	155	
3	CCD	[slightly soluble]	単位換算不可				-	-	-	-			3	x		Ethylene Dichloride	
4	CICAD	0.87 g/100 ml		8700			-	-	-	-			4A	x		international chemical safety card	
5		8690 mg/L		8690	8690	20 °C	-	-	-	-			2B	x		Identity and physical/chemical properties	
6	CRC	9.2 g/Kg		9200	12423.9182	0 °C		-	-	-	-		4A	x		Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)	
7		0.92 mass %	9285.425918	12539.2796	0 °C		-	-	-	-			4A	x		Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)	
8		0.86 mass %	8674.601574	8097.79641	25 °C		-	-	-	-			2B	x	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)	
9		8.6 g/Kg		8600	8028.15536	25 °C	-	-	-	-			2B	x	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)	
10		1.05 mass %	10611.41991	7250.173	50 °C		-	-	-	-			4A	x		Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)	
11		10.6 g/Kg		10600	7242.37043	50 °C	-	-	-	-			4A	x		Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)	
12		2.17 mass %	22181.33497	9203.72065	100 °C		-	-	-	-			4A	x		Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)	
13		22.2 g/Kg		22200	9211.46535	100 °C	-	-	-	-			4A	x		Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)	
14		[slightly soluble]	単位換算不可				-	-	-	-			3	x		Physical Constants of Organic Compounds (Section 3) etc	

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CC(Cl)Cl

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	キースタディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
15	10.6 g/kg	10600	7242.37043	50 °C		-	-	-	-			4A	x		25. Horvath, A. L., Getzen, F. W., and Maczynska, Z., J. Phys. Chem. Ref. Data, 28, 395, 2000 (IUPAC No.67).	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
	22.2 g/kg	22200	9211.46535	100 °C		-	-	-	-			4A	x		25. Horvath, A. L., Getzen, F. W., and Maczynska, Z., J. Phys. Chem. Ref. Data, 28, 395, 2000 (IUPAC No.67).	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
	[slightly soluble H2O; very soluble ethanol; miscible diethyl ether; soluble acetone, benzene, chloroform]	単位換算不可				-	-	-	-			3	x			Physical Constants of Organic Compounds
	9.2 g/kg	9200	12423.9182	0 °C		-	-	-	-			4A	x		25. Horvath, A. L., Getzen, F. W., and Maczynska, Z., J. Phys. Chem. Ref. Data, 28, 395, 2000 (IUPAC No.67).	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
	8.6 g/kg	8600	8028.15536	25 °C		-	-	-	-			2B	x		25. Horvath, A. L., Getzen, F. W., and Maczynska, Z., J. Phys. Chem. Ref. Data, 28, 395, 2000 (IUPAC No.67).	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
	EHC	8690 mg/L	8690	8690	20 °C	-	-	-	-			2B	x		Archer WJ (1979) Chlorocarbons and chlorohydrocarbons. In: Kirk J & Othmer DF ed. Encyclopedia of chemical technology, 3rd ed. New York, John Wiley & Sons, vol 5, pp 723-743. Chiou CT, Peters LJ, & Freed VH (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science, 206: 831-832. Konemann H (1981) Quantitative structure-activity relationships in fish toxicity studies. Part 1: Relationship for 50 industrial pollutants. Toxicology, 19: 209-221. Warner HP, Cohen JM, & Ireland JC (1987) Determination of Henry's Law Constants of selected priority pollutants. Washington, DC, US Environmental Protection Agency, Office of Science and Development (EPA-600/D-87/229). Worthing CR ed. (1991) The pesticide manual. Farnham, Surrey, The British Crop Protection Council.	2.2 Physical and chemical properties
21	EPI Suite	9677 mg/L [2B 以上の値を用いて推定 (2C) 1]	9677	9033.5418	25 °C		WSKOWWIN			(Q)SAR		2C	x			
22	Howard FATE	8524 mg/L [(21)]	8524	7957.20888	25 °C		-	-	-	-		2B	x		[21] Horvath AL; Halogenated Hydrocarbons: Solubility-Miscibility with Water. New York, NY: Marcel Dekker, Inc pp 889 (1982)	Volume II, p153
23	HSDB	0.86 wt%	8674.601574	8674.60157	20 °C		-	-	-	-		2B	x		[Dreher EB et al; Chloroethanes and Chloroethylenes. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 7th ed. (1999-2018). New York, NY: John Wiley & Sons. Online Posting Date: 19 Nov 2014.]	Solubility

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CC(Cl)Cl

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	キースタディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
24		0.869 g/100mL water	単位換算不可		20 °C		-	-	-	-			3	×		[IARC. Monographs on the Evaluation of the Carcinogenic Risk of Chemicals to Humans. Geneva: World Health Organization, International Agency for Research on Cancer, 1972-PRESENT. (Multivolume work). Available at: <a href="http://monographs.iarc.fr/ENG/Classification/index.php">http://monographs.iarc.fr/ENG/Classification/index.php</a> p. V20 430 (1979)]	Solubilities
25		8600 mg/L	8600	8028.15536	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×		Horvath A et al; J Phys Chem Ref Data 128: 395-623 (1999)]	Solubilities
26	IUCLID	9.2 g/L	9200	12423.9182	0 °C								4A	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.41
27		8690 mg/L [slightly soluble]	8690	8690	20 °C			no data					4A	×		ICI Chemicals & Polymers Limited Runcorn, Cheshire Hydro Plast AB Stenungsund	p.42
28	IUCLID	8.69 g/L [slightly soluble]	8690	8690	20 °C		EU Method A.6, Directive 84/449/EEC, A.6 "Water solubility"	no data					1B	○	Year: 1979	Petasol B.V. Gorinchem	p.42
29		8.6 g/L	8600	8600	20 °C	7[pH-Wert: neutral]							4A	×		Hoechst AG Frankfurt/Main Celanese GmbH Frankfurt am Main	p.42
30		8.49~9 g/L	8745	8745	20 °C								4A	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.42
31		8.49~9 g/L	8745	8745	20 °C								4A	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl	p.42
32		8 g/L	8000	8000	20 °C								4A	×		ICI Chemicals & Polymers Limited Runcorn, Cheshire Hydro Plast AB Stenungsund	p.42
33		10.3 g/L	10300	6575.7556	56 °C								4A	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.43
34		8.95 g/L	8950	7329.66661	35 °C								4A	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.42

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CCl2

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	キースタディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
35	0.84 vol% [of very low solubility]	18 % [Under non-acclimated conditions, degradation rates were 0 and 18% after five and ten days, respectively. No rates were given anymore for days 15 and 20. Under acclimated conditions no degradation rates were presented.]		25 °C								3	x	Remark: Not Applicable		p.42
36	8.73 g/L	8730	11789.2181	0 °C								4A	x	ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen		p.41
37	[not soluble]	単位換算不可										3	x	ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen		p.43
38	8 g/L	8000	8000	20 °C								4A	x	BASF AG Ludwigshafen		p.42
39	IUPAC	0.00852 wt%	85.20725966	20 °C	-	-	-	-	27の研究による測定値から求めた式(0–100°C)		Solubility [100 wt%] = 17.9147 – 0.11684 (T/K) + 2.0003 × 10 <sup>-4</sup> (T/K) <sup>2</sup>	4A	x	1 Salkowski, E., Biochem. Z. 1920, 107, 191-201. 2 Palatnik, L.S.; Vinogradov, G.R.; Kagan, M.B.; Kuropiatnik, V.B., Zh. Fiz. Khim. 33, 1939-44 (1959). 3 Ababi, V.; Popa, A.; Mihaila, Gh. Analele Stiint., Univ. Al. I. Cuza Iasi. Sect. IC. Chem. 1964, 10, 71-84. 4 Coca, J.; Diaz, R. M., J. Chem. Eng. Data 25, 80-3 (1980) 5 Coca, J.; Diaz, R.M.; Pazos, C., Fluid Phase Equilibr. 1980, 4, 125-36. 6 Warner, H.P.; Cohen, J.M.; Ireland, J.C., Determination of Henry's Law Constants of Selected Priority Pollutants, U. S. EPA Technical Report, PB87-212684, Cincinnati, OH., July 1987.	Table 1. Recommended solubility of 1,2-dichloroethane (1) in water (2)	
40	Mackay	8720 mg/L	8720	9363.457	15 °C	その他,shake flask-interferometer	-	-	-	-		2B	x	Gross, P.M., Saylor, J.H. (1931) Solubilities of certain slightly soluble organic compounds in water. J. Am. Chem. Soc. 53, 1744–1751..		p.975
41		8800 mg/L	8800	8214.85665	25 °C	その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	x	McConnell, G., Ferguson, D.M., Pearson, C.R. (1975) Chlorinated hydrocarbons and the environment. Endeavor XXXVI, 13–18..		p.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CClC(Cl)C

水溶解度

収集データ

	情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
42		8650 mg/L	8650	8074.83069	25 °C		その他,shake-flask-interferometer	-	-	-	-		2B	×		Gross, P.M. (1929a) The determination of the solubility of slightly soluble liquids in water and the solubilities of dichloroethanes and dichloropropanes. J. Am. Chem. Soc. 51, 2362–2366.. Gross, P.M. (1929b) Salting out effect on dichloroethane and dichloropropane. Z. Phys. Chem. 68, 215–220..	p.975
43		8690 mg/L	8690	8690	20 °C		その他,volumetric method, measured range 0–30°C	-	-	-	-		2B	×		Rex, A. (1906) über die loslichkeit der halogenderivate der kohlenwasserstoffe in wasser. Z. Phys. Chem. 55, 355–370..	p.975
44		9209 mg/L	9209	7086.10051	40 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ <sup>∞</sup> -UNIFAC	-	4A	×		Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022..	p.975
45		9000 mg/L	9000	7860.73007	30 °C		その他,shake-flask-interferometer	-	-	-	-		2B	×		Gross, P.M., Saylor, J.H. (1931) Solubilities of certain slightly soluble organic compounds in water. J. Am. Chem. Soc. 53, 1744–1751..	p.975
46		9400 mg/L	9400	9400	20 °C		-	-	-	-	その他,activity coeff. γ <sup>∞</sup> -differential pressure transducer	-	2B	×		Wright, D.A., Sandler, S.I., DeVoll, D. (1992) Infinite dilution activity coefficients and solubilities of halogenated hydrocarbons in water at ambient temperatures. Environ. Sci. Technol. 26, 1828–1831..	p.975
47		8727 mg/L	8727	7622.28792	30 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ <sup>∞</sup> -UNIFAC	-	2B	×		Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022..	p.975
48		8500 mg/L	8500	8500	20 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ <sup>∞</sup> -GC	-	2B	×		Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022..	p.975
49		3506 mg/L	3506	3062.19107	30 °C		その他,shake-flask-headspace-GC	-	-	-	-		2B	×		McNally, M.E., Grob, R.L. (1984) Headspace determination of solubility limits of the base neutral and volatile components from environmental protection agency's list of priority pollutants. J. Chromatogr. 284, 105–116..	p.975
50		8044 mg/L	8044	7509.12579	25 °C		-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-UNIFAC activity coeff.	4C	×		Banerjee, S. (1985) Calculation of water solubility of organic compounds with UNIFAC-derived parameters. Environ. Sci. Technol. 19, 369–370..	p.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CC(Cl)Cl

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	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
51	9102 mg/L	9102	7454.1481	35 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. $\gamma_{\infty-GC}$	-	4A	×		Barr, R.S., Newsham, D.M.T. (1987) Phase equilibria in very dilute mixtures of water and chlorinated hydrocarbons. Part I - Experimental results. Fluid Phase Equil. 35, 189–205..	p.975
52	8782 mg/L	8782	8782	20 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. $\gamma_{\infty-GC}$	-	2B	×		Barr, R.S., Newsham, D.M.T. (1987) Phase equilibria in very dilute mixtures of water and chlorinated hydrocarbons. Part I - Experimental results. Fluid Phase Equil. 35, 189–205..	p.975
53	8600 mg/L	8600	8028.15536	25 °C		-	-	-	-	その他,recommended, temp range 0–100°C, IUPAC-NIST Solubility Data Series	-	2B	×		Horvath, A.L., Getzen, F.W. (1999a) IUPAC-NIST Solubility Data Series 67. Halogenated ethanes and ethenes with water. J. Phys. Chem. Ref. Data 28, 395–620..	p.975
54	8608 mg/L	8608	8035.62342	25 °C		-	-	-	-	その他,summary of literature data, temp range 0–80°C	-	2B	×		Horvath, A.L. (1982) Halogenated Hydrocarbons. Solubility-Miscibility with Water. Marcel Dekker, Inc., New York and Basel..	p.975
55	7200 mg/L	7200	7230.32645	19.7 °C		その他,shake flask-GC/TC, measured range 0–80°C	-	-	-	-		2B	×		Stephenson, R.M. (1992) Mutual solubilities: Water-ketones, water-ethers, and water-gasoline-alcohols. J. Chem. Eng. Data 37, 80–95..	p.975
56	8100 mg/L	8100	7561.40215	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×		Dean, J.A., Editor (1985) Lange's Handbook of Chemistry. 13th Edition, McGraw-Hill Book Company, New York.. Riddick, J.A., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents: Physical Properties and Methods of Purification. 4th Edition, John Wiley & Sons, New York..	p.975
57	8696 mg/L	8696	8117.77198	25 °C		その他,volumetric method	-	-	-	-		2B	×		Wright, W.H., Schaffer, J.M. (1932) Am. J. Hyg. 16(2), 325–428..	p.975
58	8490 mg/L	8490	8490	20 °C		その他,shake flask, measured range 0–56°C	-	-	-	-		2B	×		Van Arkel, A.E., Vles, S.E. (1936) Loslichkeit von organischen verbindungen in wasser. Recd. Trav. Chim. Pays-Bas 55, 407–411.	p.975
59	8620 mg/L	8620	8046.82549	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×		Seidell, A. (1940) Solubilities. Van Nostrand, New York..	p.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CC(Cl)Cl

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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
60	8400 mg/L	8400	7841.45408	25 °C		-	-	-	その他,data presented in graph, temp range 0–70°C	-		2B	×		McGovern, E.W. (1943) Chlorohydrocarbon solvents. Ind. Eng. Chem. 35(12), 1230–1239.. Horvath, A.L. (1982) Halogenated Hydrocarbons. Solubility-Miscibility with Water. Marcel Dekker, Inc., New York and Basel..	p.975
61	8610 mg/L	8610	8037.49043	25 °C		その他,shake flask-GC, temp range 0–80°C	-	-	-	-		2B	×		Walraevens, R., Trouillet, P., Devos, A. (1974) Basic elimination of hydrogen chloride from chlorinated ethanes. Int. J. Chem. Kinet. 6, 777–786..	p.975
62	7809 mg/L	7809	7809	20 °C		-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ <sup>∞</sup> -UNIFAC	-		2B	×		Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022..	p.975
63	9960 mg/L	9960	6805.09524	50 °C		-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ <sup>∞</sup> -GC	-		4A	×		Barr, R.S., Newsham, D.M.T. (1987) Phase equilibria in very dilute mixtures of water and chlorinated hydrocarbons. Part I - Experimental results. Fluid Phase Equil. 35, 189–205..	p.975
64	8450 mg/L	8450	7888.1294	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	×		Chiou, C.T., Peters, L.J., Freed, A.H. (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science 206, 831–832..	p.975
65	10250 mg/L	10250	8501.66654	34 °C		その他,shake flask-GC/ECD	-	-	-	-		4A	×		Chiou, C.T., Freed, V.H. (1977) Chemodynamics Studies on Bench Mark Industrial Chemicals. NSF/RA-770286. National Science Foundation, Washington D.C..	p.975
66	8570 mg/L	8570	11032.5571	3 °C		その他,shake flask-GC/ECD	-	-	-	-		4A	×		Chiou, C.T., Freed, V.H. (1977) Chemodynamics Studies on Bench Mark Industrial Chemicals. NSF/RA-770286. National Science Foundation, Washington D.C..	p.975
67	9209 mg/L	9209	7541.77652	35 °C		-	-	-	その他,activity coeff. γ <sup>∞</sup> -differential pressure transducer	-		4A	×		Wright, D.A., Sandler, S.I., DeVoll, D. (1992) Infinite dilution activity coefficients and solubilities of halogenated hydrocarbons in water at ambient temperatures. Environ. Sci. Technol. 26, 1828–1831..	p.975
68	8800 mg/L	8800	8800	20 °C		-	-	-	-	-		2B	×		Pearson, C.R., McConnell, G. (1975) Chlorinated C1 and C2 hydrocarbons in the marine environment. Proc. Roy. Soc. London B189, 305–322..	p.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CClC(Cl)C

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク	キースタディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
69	8000 mg/L	8000	7468.0515	25 °C		その他,shake flask-LSC	-	-	-	-		2B	×		Veith, G.D., Macek, K.J., Petrocelli, S.R., Carroll, J. (1980) An evaluation of using partition coefficients and water solubility to estimate bioconcentration factors for organic chemicals in fish. In: Aquatic Toxicology. ASTM STP 707. Eaton, J.G., Parrish, P.R., Hendricks, A.C., Editors, American Society for Testing and Materials. pp. 117–129..	p.975
70	8630 mg/L	8630	8630	20 °C		-	-	-	-	その他,recommended	-	2B	×		Sorensen, J.M., Arit, W. (1979) Liquid-Liquid Equilibrium Data Collection: Binary Systems. Dechema Chemistry Data Series, Vol. 1, Part 1. Dechema, Frankfurt..	p.975
71	8390 mg/L	8390	8390	20 °C		その他,shake flask-GC/ECD	-	-	-	-		2B	×		Chiou, C.T., Freed, V.H. (1977) Chemodynamics Studies on Bench Mark Industrial Chemicals. NSF/RA-770286. National Science Foundation, Washington D.C..	p.975
72	9835 mg/L	9835	6719.68992	50 °C		-	-	-	-	その他,activity coeff. $\gamma^{\infty}$ -differential pressure transducer	-	4A	×		Wright, D.A., Sandler, S.I., DeVoll, D. (1992) Infinite dilution activity coefficients and solubilities of halogenated hydrocarbons in water at ambient temperatures. Environ. Sci. Technol. 26, 1828–1831..	p.975
73	9013 mg/L	9013	7872.08446	30 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. $\gamma^{\infty}$ -GC	-	2B	×		Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022..	p.975
74	9163 mg/L	9163	7050.70463	40 °C		-	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. $\gamma^{\infty}$ -GC	-	4A	×		Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022..	p.975
75	10600 mg/L	10600	9895.16824	25 °C		その他,shake flask-titration	-	-	-	-		2B	×		Coca, J., Diaz, R. (1980) Extraction of furfural from aqueous solutions with chlorinated hydrocarbons. J. Chem. Eng. Data 25, 80–83..	p.975
76	11000 mg/L	11000	10268.5708	25 °C		その他,shake flask-titration/turbidity	-	-	-	-		2B	×		Coca, J., Diaz, R.M., Pazos, C. (1980) Extraction of tetrahydrofuran from aqueous solutions. Ternary liquid equilibria with chloromethanes, and chloroethanes as solvents. Fluid Phase Equil. 4, 125–136..	p.975
77	7987 mg/L	7987	7455.91592	25 °C		その他,shake flask-LSC	-	-	-	-		2B	×		Banerjee, S., Yalkowsky, S.H., Valvani, S.C. (1980) Water solubility and octanol/water partition coefficient of organics. Limitations of solubility-partition coefficient correlation. Environ. Sci. Technol. 14, 1227–1229..	p.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CCl2

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
78		6537 mg/L	6537	6537	20 °C	-	-	-	-	その他.activity coeff. $\gamma^{\infty}$ by inert air stripping-GC	-	-	2B	×		Hovorka, Š., Dohnal, V. (1997) Determination of air-water partition of volatile halogenated hydrocarbons by the inert gas stripping method. J. Chem. Eng. Data 42, 924-922..	p.975
79	Merck	1 Sol in about 120 parts water[Sol in about 120 parts water; misc with alc, chloroform, ether.]	8333.333333		25 °C	-	-	-	-	-	-	-	4A	×		<a href="https://www.rsc.org/merck-index/">https://www.rsc.org/merck-index/</a>	
80	MOE初期評価	8.60 g/L	8600	8028.15536	25 °C	-	-	-	-	-	-	-	2B	×		Horvath, A., et al. (1999): J. Phys. Chem. Ref. Data 128: 395-623.	P127 1.物質に関する基本的事項 (2) 物理化学的性状
81	NITE初期リスク評価書	[任意に混和] 単位換算不可				-	-	-	-	-	-	-	3	×		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed. Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.	P.2 3.物理化学的性状
82		8.6 g/L	8600	8028.15536	25 °C	-	-	-	-	-	-	-	2B	×		U.S. NLM, National Library of Medicine (2001) HSDB, Hazardous Substances Data Bank, Bethesda, MD. ( <a href="http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB">http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB</a> から引用)	P.2 3.物理化学的性状
83	PhysProp	8600 mg/L	8600	8028.15536	25 °C	-	-	-	-	experiment al result	-	-	2B	×		DAUBERT,TE & DANNER,RP (1985).	p.1
84	ECHA	7.9 g/L [Water solubility equivalent to 8.07E04 μM.]	7900	7374.70086	25 °C	7.4 [No pH value was given in the study. A pH of 7.4 was estimated from pH measurements in ecotoxicological tests]	OECD TG 105	no data	2: reliable with restrictions	key study	experiment al result	-	1B	○		Banerjee, S.; Yalkowsky, S.H.; Valvani, S. C. (1980) Water solubility and octanol-water partition coefficients of organics. Limitations of the solubility-partition coefficient correlation. Environ. Sci. Technol. 14, 1227-1229.	Exp Key Water solubility-001

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CC(Cl)Cl

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	キースタディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
85	SIDS	8490~9000 mg/L [readily soluble in water]	8745	8745	20 °C	-	-	-	4: not assignable	key study	-					Archer, W.L. (1979): Chlorocarbons and chlorohydrocarbons In: Kirk-Othmer, Encyclopedia of Chemical Technology, Vol. 5, 3rd ed., John Wiley & Sons, N.Y., 668 - 676, 724 - 733, 740 - 742. Dreher, E.-L. (1986): Chlorinated hydrocarbons. 2. Chloroethanes. 2.3 1,2 -Dichloroethane. In: Gerhartz, W. (ed.), Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Vol. A6, 5th ed., Verlag Chemie, Weinheim, 233, 263 - 271, 379 - 395. Hardie, D.W.F (1964): Chlorocarbons and chlorohydrocarbons In: Kirk-Othmer, Encyclopedia of Chemical Technology, Vol. 5, 2nd ed., John Wiley & Sons, N.Y., 149 - 154, 195. Hüls AG (1994): 1,2-Dichlorethan. Safety Data Sheet as of 13.01.1994. McConnell, G. et al. (1975): Endeavour 34, 13 - 18. Rassaerts, H., Witzel, D. (1975): Chlorkohlenwasserstoffe, aliphatische. In: Bartholome, E. et al. (Hrsg.), Ullmanns Encyclopaedie der technischen Chemie, Bd. 9, 4. Aufl., Verlag Chemie, Weinheim/Bergstr., 425 - 432, 442, 451 - 452. Torkelson, T.R., Rowe, V.K. (1981): Halogenated aliphatic hydrocarbons. 2.16 Ethylene Dichloride. In: Clayton, G.D., Clayton, F.E. (eds.), Patty's Industrial Hygiene and Toxicology, Vol. 2B: Toxicology, 3rd rev. ed., John Wiley & Sons, N.Y., 3491 - 3497. Verschueren, K. (ed.) (1983): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd ed., Van Nostrand Reinhold, New York, 643.	p.7,p.13;SIDS Dossier p.63
86	既存点検事業	0.8 g/100g	8000			-	-	-	-	-			4A	x	提示資料.	K0022	

## 基本情報

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCCl

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	1.48	1.48			-	-	-	-			2B	×		Hansch C, Leo A, Hoekman D, et al. 1995. Exploring QSAR: Hydrophobic, electronic, and steric constants. Washington, DC: American Chemical Society 4..	p.155
2 CICAD	1.76	1.76			-	-	-	-			2B	×			Identity and physical/chemical properties
3	1.48	1.48			-	-	-	-			2B	×			international chemical safety card
4 CRC	1.48	1.48	25 °C		-	-	-	-			2B	×		2. 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
5 EHC	1.76	算出不可			-	-	-	-			3	×		Archer WJ (1979) Chlorocarbons and chlorohydrocarbons. In: Kirk J & Othmer DF ed. Encyclopedia of chemical technology, 3rd ed. New York, John Wiley & Sons, vol 5, pp 723-743. Chiou CT, Peters LJ, & Freed VH (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science, 206: 831-832. Konemann H (1981) Quantitative structure-activity relationships in fish toxicity studies. Part 1: Relationship for 50 industrial pollutants. Toxicology, 19: 209-221. Warner HP, Cohen JM, & Ireland JC (1987) Determination of Henry's Law Constants of selected priority pollutants. Washington, DC, US Environmental Protection Agency, Office of Science and Development (EPA-600/D-87/229). Worthing CR ed. (1991) The pesticide manual. Farnham, Surrey, The British Crop Protection Council.	2.2 Physical and chemical properties
6 EPI Suite	1.8316	1.8316			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×			
7 Howard FATE	1.48[[17]]	1.48			-	-	-	-			2B	×		[17] Hansch C, Leo AJ; Substituent constants for correlation analysis in chemistry and biology. NY NY, John Wiley and Sons 339 pp (1979)	Volume II, p153

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
8 HSDB	1.48	1.48			-	-	-	-	-		2B	×		[Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995., p. 4]	Octanol/Water Partition Coefficient
9 IUCLID	1.48	1.48	°C		EU Method A.8, Directive 84/449/EEC, A.8 "Partition coefficient"	no data			experimental result		1B	×		Petrasol B.V. Gorinchem	p.40
10	1.48	1.48			その他, according to Leo et al. and Hansch & Leo (1979)	no data			estimated by calculation		4C	×	Year: 1971	ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.40
11	1.48	1.48	25 °C		その他, ASTM or equivalent				experimental result		4A	×	Remark: ASTM or equivalent	Occidental Chemical Corporation Niagara Falls, NY 14302–0728	p.40
12	1.46	1.46				no data			estimated by calculation		4C	×	Year: 1991	ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.40
13	1.45	1.45			その他, Flask-Shaking Method	no data			experimental result		4A	×	Year: 1980	ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.40
14	1.79	1.79			その他, according to Leo & Hansch	no data			estimated by calculation		4C	×		ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.41
15	1.48	1.48				no data					4A	×		ICI Chemicals & Polymers Limited Runcorn, Cheshire	p.41
16	1.48	1.48				no data					4A	×		Hydro Plast AB Stenungsund	p.41

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
17	1.76	1.76			その他,according to Rekker	no data			estimated by calculation		4C	×	Year: 1977	ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.41
18	Mackay	1.54	1.54	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-octanol and water mutual solubility not considered,	4C	×		Arbuckle, W.B. (1983) Estimating activity coefficients for use in calculating environmental parameters. Environ. Sci. Technol. 17, 537–542..	p.975
19		1.48	1.48	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.. Hansch, C., Leo, A.J. (1979) Substituents Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, New York.. Hansch, C., Leo, A. (1987) Medchem Project. Pomona College, Claremont, California..	p.975
20		1.46	1.46	24.8 °C	その他,EPICS-GC, measured range 2.2–24.8°C	-	-	-	-		2B	×		Dewulf, J., Van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: Temperature dependence in the 2–25°C range. Water Res. 33, 2424–2436..	p.975
21		1.44	1.44	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-UNIFAC activity coeff.	4C	×		Banerjee, S., Howard, P.H. (1988) Improved estimation of solubility and partitioning through correction of UNIFAC-derived activity coefficients. Environ. Sci. Technol. 22, 839–841..	p.975
22		1.48	1.48	25 °C	-	-	-	-	その他,recommended	-	2B	×			p.975
23		1.55	1.55	25 °C	-	-	-	-	その他（推定値）,calculate d-from activity coefficients	-	4C	×		Tse, G., Sandler, S.I. (1994) Determination of infinite dilution activity coefficients and 1-octanol/water partition coefficients of volatile organic pollutants. J. Chem. Eng. Data 39, 354–357..	p.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
24	1.51	1.51	25~50 °C		その他,infinite dilution activity coefficient determined by relative GC technique, measured range 25~50° C	-	-	-	-		2B	×		Bhatia, S.R., Sandler, S.I. (1995) Temperature dependence of infinite dilution activity coefficients in octanol and octanol/water partition coefficients of some volatile halogenated organic compounds. J. Chem. Eng. Data 40, 1196–1198..	p.975
25	1.48	1.48	25 °C		-	-	-	その他,recommended	-		2B	×		Hansch, C., Leo, A.J., Hoekman, D. (1995) Exploring QSAR, Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. ACS Professional Reference Book, American Chemical Society, Washington, DC..	p.975
26	1.58	1.58	25 °C		-	-	-	estimated by calculation	calculated-octanol and water mutual solubility not considered,		4C	×		Arbuckle, W.B. (1983) Estimating activity coefficients for use in calculating environmental parameters. Environ. Sci. Technol. 17, 537–542..	p.975
27	1.45	1.45	25 °C		その他,shake flask-LSC	-	-	-	-		2B	×		Banerjee, S., Yalkowsky, S.H., Valvani, S.C. (1980) Water solubility and octanol/water partition coefficient of organics. Limitations of solubility-partition coefficient correlation. Environ. Sci. Technol. 14, 1227–1229.. Veith, G.D., Macek, K.J., Petrocelli, S.R., Carroll, J. (1980) An evaluation of using partition coefficients and water solubility to estimate bioconcentration factors for organic chemicals in fish. In: Aquatic Toxicology. ASTM STP 707. Eaton, J.G., Parrish, P.R., Hendricks, A.C., Editors, American Society for Testing and Materials. pp. 117–129..	p.975
28	MOE初期評価	1.48	1.48		-	-	-	その他,計算値			2B	×		American Chemical Society (1995): Exploring QSAR-Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC.	P127 1.物質に関する基本的事項 (2) 物理化学的性状
29	NITE初期リスク評価書	1.83	1.83		-	-	-	estimated by calculation			4C	×		SRC:KowWin, 2002	P.2 3.物理化学的性状
30		1.48	1.48		-	-	-	experimental result			2B	×		SRC:KowWin, 2002	P.2 3.物理化学的性状
31	PhysProp	1.48	1.48		-	-	-	experimental result	-		2B	×		HANSCH,C ET AL. (1995).	p.1

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
32	ECHA	1.45	1.45	20 °C	7.4[No pH value was given in the study. A pH of 7.4 was estimated from pH measurements in ecotoxicological tests]	OECD TG 107	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1B	○		Publication Unnamed (1980)	Exp Key Partition coefficient. 001
33		1.76	1.76		その他,Hermens and Koenemann calculated log Pow according to R.F. Rekker: "The Hydrophobic Fragmental constant", Elsevier, 1977	no data	2: reliable with restrictions	not key study	estimated by calculation	according to R.F. Rekker: "The Hydrophobic Fragmental constant", Elsevier, 1977		4C	×		Unnamed (1984) Unnamed (1985) Unnamed (1981)	No type Other Partition coefficient. 002
34	SIDS	1.45	1.45	20 °C	その他,other (measured): Flask shaking method	-	その他,(2) valid with restrictions	key study	experimental result			3	×		Veith, G.D. et al. (1980): ASTM Spec. Techn. Publ. 707, 116-129.	p.7;p.13;SIDS Dossier p.61

## 基本情報

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCl

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	キースタディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	logKoc	1.52	33				-	-	-	-			2B	x		Sabljic A, Gusten H, Verhaar H, et al. 1995. QSAR modeling of soil sorption. Improvements and systematics of log Koc vs. Kow correlations. Chemosphere 95:4489-4515..	p.155
	logKoc	1.62	42				-	-	-	-			2B	x		Borisover MD, Graber ER. 1997. Specific interactions of organic compounds with soil organic carbon. Chemosphere 34:1761-1776..	p.155
	logKoc	1.28	19	25 °C			-	-	-	-			2B	x		Chiou CT, Freed VH, Peters LJ. 1980. Evaporation of solutes from water. Environ Inter 3:231-236..	p.155
4 EHC	logKoc	1.28	19.05460718				-	-	-	-			2B	x		Archer WJ (1979) Chlorocarbons and chlorohydrocarbons. In: Kirk J & Othmer DF ed. Encyclopedia of chemical technology, 3rd ed. New York, John Wiley & Sons, vol 5, pp 723-743. Chiou CT, Peters LJ, & Freed VH (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science, 206: 831-832. Konemann H (1981) Quantitative structure-activity relationships in fish toxicity studies. Part 1: Relationship for 50 industrial pollutants. Toxicology, 19: 209-221. Warner HP, Cohen JM, & Ireland JC (1987) Determination of Henry's Law Constants of selected priority pollutants. Washington, DC, US Environmental Protection Agency, Office of Science and Development (EPA-600/D-87/229). Worthing CR ed. (1991) The pesticide manual. Farnham, Surrey, The British Crop Protection Council.	2.2 Physical and chemical properties
5 EPI Suite	Koc	18.12 L/kg	18.12				KOCWIN				(Q)SAR		2C	x			
6 Howard FATE	Koc	33[An experimental Koc of 33 for silt loam [8] is in agreement with values calculated from the water solubilityn[25].]	33				-	-	-	experimental result	An experimental Koc of 33 for silt loam [8] is in agreement with values calculated from the water solubilityn[25].	4C	○		[8] Chiou CT et al; Science 206: 831-2 (1979). [25] Kenaga EE; Ecotox Environ Safety 4: 26-38 (1980).	Volume II, p156	

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CC(Cl)Cl

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	キースタディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
7	Koc	152[Based on the octanol/water partition coefficient, an estimated Koc of 152 was calculated [29].]	152				-	-	-	estimated by calculation	Based on the octanol/water partition coefficient, an estimated Koc of 152 was calculated [29].	4C	x		[29] Lyman WJ et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Environmental Behavior of Organic Compounds. McGraw Hill, NY (1982).	Volume II, p156	
8	HSDB	Koc	33	33			-	-	-			2B	○		Chiou CT et al; Science 206: 831-2 (1979)	Environmental Fate/Exposure Summary:	
9	IUCLID	Koc	43	43			その他			estimated by calculation		4C	x		Year: 1980 Remark: Auf der Basis der Wasserlöslichkeit von 1,2-Dichlorethan liegt ein berechneter Adsorptionskoeffizient (Koc) von 43 vor.	ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	
10		Koc	19~71	45			その他			estimated by calculation		4C	x		Year: 1990 Remark: Ein fuer 1,2-Dichlorethan angegebenen Bodensorptionskoeffizient (Koc) von 19 ~ 71 laesst nur eine sehr geringe bis schwache Bodensorption erwarten.	ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	
11	Mackay	logKoc	1.68	47.86300923	8 °C		natural sediment from River Leie, Belgium	その他,EPICS-GC/FID	-	-	-		2B	x		Dewulf, J., Van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: Temperature dependence in the 2–25°C range. Water Res. 33, 2424–2436..	p.975
12		logKoc	1.28	19.05460718	25 °C		soil	-	-	-	その他,equilibrium sorption isotherm	-	2B	x		Chiou, C.T., Peters, L.J., Freed, A.H. (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science 206, 831–832..	p.975
13		logKoc	1.64	43.65158322	2.3 °C		natural sediment from River Leie, Belgium	その他,EPICS-GC/FID	-	-	-		2B	x		Dewulf, J., Van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: Temperature dependence in the 2–25°C range. Water Res. 33, 2424–2436..	p.975
14		logKoc	1.19	15.48816619	25 °C		-	-	-	-	その他（推定値）,estimated-S and mp	-	4C	x		Karickhoff, S.W. (1981) Semi-empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural water sediments and soils. Chemosphere 10, 833–846..	p.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCl

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	土壤条件	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	キースタディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
15	logKoc	1.15	14.12537545	25 °C		sediment-water	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-K_OW	4C	×		Mabey, W., Smith, J.H., Podoll, R.T., Johnson, H.L., Mill, T., Chiu, 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.975
16	logKoc	2.18	151.3561248	25 °C		-	-	-	-	-	その他（推定値）,estimated-K_OW	-	4C	×		Lyman, W.J., Reehl, W.F., Rosenblatt, D.H., Editors (1982) Handbook of Chemical Property Estimation Methods. McGraw-Hill Book Company, New York..	p.975
17	logKoc	1.48	30.1995172	25 °C		-	-	-	-	-	その他（推定値）,estimated-S	-	4C	×		Karickhoff, S.W. (1981) Semi-empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural water sediments and soils. Chemosphere 10, 833-846..	p.975
18	logKoc	1.645	44.15704474	3.8 °C		natural sediment from River Leie, Belgium	その他,EPICS-GC/FID	-	-	-	-	-	2B	×		Dewulf, J., Van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: Temperature dependence in the 2-25°C range. Water Res. 33, 2424-2436..	p.975
19	logKoc	1.09	12.30268771	25 °C		-	-	-	-	-	その他,BUA 1987; quoted, Bruggemann et al. 1991	-	2B	×		BUA 1987. Bruggemann, R., Trapp, S., Matthies, M. (1991) Behavior assessment of a volatile chemical in the Rhine River. Environ. Toxicol. Chem. 10, 1097-1103..	p.975
20	logKoc	1.64	43.65158322	6.2 °C		natural sediment from River Leie, Belgium	その他,EPICS-GC/FID	-	-	-	-	-	2B	×		Dewulf, J., Van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: Temperature dependence in the 2-25°C range. Water Res. 33, 2424-2436..	p.975
21	logKoc	1.06	11.48153621	25 °C		-	-	-	-	-	その他（推定値）,estimated-K_OW	-	4C	×		Karickhoff, S.W. (1981) Semi-empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural water sediments and soils. Chemosphere 10, 833-846..	p.975
22	logKoc	1.51	32.35936569	25 °C		soil	-	-	-	-	その他,quoted from Chiu et al. 1979, Karickhoff 1981	-	2B	×		Chiu, C.T., Peters, L.J., Freed, A.H. (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science 206, 831-832.. Karickhoff, S.W. (1981) Semi-empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural water sediments and soils. Chemosphere 10, 833-846..	p.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCl

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	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
23		logKoc	1.68	47.86300923	25 °C		natural sediment from River Leie, Belgium	その他,EPICS-GC/FID	-	-	-	-		2B	×		Dewulf, J., Van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: Temperature dependence in the 2–25°C range. Water Res. 33, 2424–2436..	p.975
24		logKoc	1.65	44.66835922	18.6 °C		natural sediment from River Leie, Belgium	その他,EPICS-GC/FID	-	-	-	-		2B	×		Dewulf, J., Van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: Temperature dependence in the 2–25°C range. Water Res. 33, 2424–2436..	p.975
25		logKoc	1.7	50.11872336	13.5 °C		natural sediment from River Leie, Belgium	その他,EPICS-GC/FID	-	-	-	-		2B	×		Dewulf, J., Van Langenhove, H., Grare, S. (1999) Sediment/water and octanol/water equilibrium partitioning of volatile organic compounds: Temperature dependence in the 2–25°C range. Water Res. 33, 2424–2436..	p.975
26		logKoc	1.34	21.87761624	25 °C		soil	-	-	-	-	その他,selected	-		2B	×	Jury, W.A., Russo, D., Streile, G., El Abd, H. (1990) Evaluation of volatilization by organic chemicals residing below the soil surface. Water Resources Res. 26, 13–20..	p.975
27 NITE初期リスト評価書	Koc	44	44				-	-	-	-	その他 (推定値)			4C	×		SRC:PeKocWin, 2002	P.2 3.物理化学的性状
28 ECHA	Koc	33	33				silt loam	no data		4: not assignable	not key study	experimental result		4A	○		1,2-Dichloroethane: Hazardous Substances Data Bank; Literature Search on Environmental Impact, November 2000.	No type Other Adsorption/desorption. 002
29		Koc	43	43			soil	-		2: reliable with restrictions	not key study	estimated by calculation		4C	×		Kenaga, E.E. (1980): Ecotoxicol. Environ. Safety 4, 26 - 38.	No type Other Adsorption/desorption. 001; Endpoint summary Environmental fate & pathways
30 SIDIS	Koc	33 [The substance rapidly percolates through sandy soil.]	33				silt loam	その他,no data		4: not assignable	key study			4A	○			p.5; SIDIS Dossier p.74

## 基本情報

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CC(Cl)Cl

## 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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	1.1E-3 atm·m^3/mol	111.4575		-	-	-			2B	×		Staudinger J, Roberts PV. 1996. A critical review of Henry's law constants for environmental applications. Crit Rev Environ Sci 26:205-297..	p.155
2 CRC	0.14 kPa · m^3/mol [0.14 kPa m^3/mol]	単位換算不可	25 °C[@ 25°C]	-	-	-			3	×		13. 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
3 EHC	111.5 Pa·m^3/mol	111.5	25 °C	-	-	-			2B	×		Archer WJ (1979) Chlorocarbons and chlorohydrocarbons. In: Kirk J & Othmer DF ed. Encyclopedia of chemical technology, 3rd ed. New York, John Wiley & Sons, vol 5, pp 723-743. Chiou CT, Peters LJ, & Freed VH (1979) A physical concept of soil-water equilibria for nonionic organic compounds. Science, 206: 831-832. Konemann H (1981) Quantitative structure-activity relationships in fish toxicity studies. Part 1: Relationship for 50 industrial pollutants. Toxicology, 19: 209-221 Warner HP, Cohen JM, & Ireland JC (1987) Determination of Henry's Law Constants of selected priority pollutants. Washington, DC, US Environmental Protection Agency, Office of Science and Development (EPA-600/D-87/229). Worthing CR ed. (1991) The pesticide manual. Farnham, Surrey, The British Crop Protection Council.	2.2 Physical and chemical properties
4 EPI Suite	97.4 Pa·m^3/mol	97.4	20 °C				その他, Experimental Data from PhysProp Database		2C	×			
5	1.23E+003 Pa·m^3/mol	1230	25 °C				(Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	×			

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
6 Howard FATE	9.77E-4 atm·m^3/mol[[13]]	98.994525		-	-	-	-		2B	×		[13] Dilling WL; Environ Sci Technol 11: 405-9 (1977)	Volume II, p153
7 HSDB	1.18E-3 atm-cu m/mole	単位換算不可	25 °C		-	-	-		3	×		[Leighton DT Jr, Calo JM; J Chem Eng 26: 382-5 (1981)]	Other Chemical/Physical Properties
8	1.18E-3 atm-cu m/mole	単位換算不可		-	-	-			3	×		Lyman WJ et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Washington, DC: Amer Chem Soc pp. 7-4, 7-5, 15-1 to 15-29 (1990)	Environmental Fate
9 IUCLID	132 Pa·m^3/mol	132	15 °C				experimental result		4A	×	Year: 1977 Remark: Nach Thomas (1982) ist 1,2-Dichlorethan als leichtfluechtig aus Wasser anzusehen, so dass ein Uebergang von 1,2-Dichlorethan aus waessriger Loesung in die Atmosphaere zu erwarten ist.	ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker – Chemie GmbH Burghausen	p.108
10	143 Pa·m^3/mol	143	25 °C				experimental result		4A	×			p.108
11 IUCLID	149 Pa·m^3/mol	149	20 °C				experimental result		4A	○			p.108
12	104 Pa·m^3/mol	104	25 °C				estimated by calculation		4C	×			p.108
13	119 Pa·m^3/mol	119	10 °C				experimental result		4A	×			p.108
14	96 Pa·m^3/mol	96	25 °C				estimated by calculation		4C	×			p.108
15	124 Pa·m^3/mol	124	25 °C				estimated by calculation		4C	×			p.108
16	111 Pa·m^3/mol	111	20 °C				estimated by calculation		4C	×			p.108
17	176 Pa·m^3/mol	176	30 °C				experimental result		4A	×			p.108
18	99 Pa·m^3/mol	99	25 °C				experimental result		4A	×			p.108
19 Mackay	185.2 Pa·m^3/mol	185.2	25 °C	-	-	-			2B	×		Ayuttaya, P.C.N., Rogers, T.N., Mullins, M.E., Kline, A.A. (2001) Henry's law constants derived from equilibrium static cell measurements for dilute organic-water mixtures. Fluid Phase Equil. 185, 359–377..	p.975
20	70.8 Pa·m^3/mol	70.8	25 °C	-	-	-	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.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
21	92 Pa·m^3/mol	92	20~25 °C [20~25°C and low ionic strength]	-	-	-	-	-	2B	×	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.. Pankow, J.F. (1990) Minimization of volatilization losses during sampling and analysis of volatile organic compounds in water. In: Significance and Treatment of Volatile Organic Compounds in Water Supplies. Ram, N.M., Christman, R.F., Cantor, K.P., Editors, pp. 73–86, Lewis Publishers Inc., Chelsea, Michigan	p.975	
22	143 Pa·m^3/mol	143	25 °C	-	-	-	-	-	2B	×	Ashworth, R.A., Howe, G.B., Mullins, M.E., Rogers, T.N. (1988) Air-water partitioning coefficients of organics in dilute aqueous solutions. J. Hazard. Materials 18, 25–36..	p.975	
23	111.5 Pa·m^3/mol	111.5	25 °C	-	-	-	-	-	2B	×	Warner, H.P., Cohen, J.M., Ireland, J.C. (1987) Determination of Henry's Law Constants of Selected Priority Pollutants. EPA/600/D-87/229, U.S. Environmental Protection Agency, Cincinnati, Ohio. PB87-212684, U.S. Department of Commerce, National Technical Information Service..	p.975	
24	102 Pa·m^3/mol	102	20 °C	-	-	-	その他, selected from reported experimentally determined values	-	2B	×	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.975	
25	152 Pa·m^3/mol	152	30 °C	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. γ∞ -GC	-	2B	×	Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022..	p.975	

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
26	319 Pa·m^3/mol	319	50 °C	-	-	-	-	-	2B	×		Wright, D.A., Sandler, S.I., DeVoll, D. (1992) Infinite dilution activity coefficients and solubilities of halogenated hydrocarbons in water at ambient temperatures. Environ. Sci. Technol. 26, 1828–1831..	p.975
27	182 Pa·m^3/mol	182	40 °C	-	-	-	その他,infinite dilution activity coeff. $\gamma^\infty$ -GC	-	2B	×		Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022..	p.975
28	110 Pa·m^3/mol	110	25 °C	-	-	-	その他,recommended	-	2B	×		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.975
29	8.99 Pa·m^3/mol	8.99	50 °C	-	-	-	その他,from infinite dilution activity coefficient determined by relative GC technique	-	2B	×		Bhatia, S.R., Sandler, S.I. (1995) Temperature dependence of infinite dilution activity coefficients in octanol and octanol/water partition coefficients of some volatile halogenated organic compounds. J. Chem. Eng. Data 40, 1196–1198..	p.975
30	101 Pa·m^3/mol	101	20 °C	-	-	-	-	-	2B	×		Tse, G., Orbey, H., Sandler, S.I. (1992) Infinite dilution activity coefficients and Henry's law coefficients of some priority pollutants determined by a relative gas chromatographic method. Environ. Sci. Technol. 26, 2017–2022..	p.975
31	110 Pa·m^3/mol	110	20 °C	-	-	-	その他,selected from literature experimentally measured data	-	2B	×		Staudinger, J., Roberts, P.V. (1996) A critical review of Henry's law constants for environmental applications. Crit. Rev. Environ. Sci. Technol. 26, 205–297..	p.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
32	122.5 Pa·m^3/mol	122.5	25 °C	-	-	-	-	-	2B	×		Li, J., Dallas, A.J., Eikens, D.J., Carr, P.W., Bergmann, D.L., Hait, M.J., Eckert, C.A. (1993) Measurement of large infinite dilution activity coefficients of nonelectrolytes in water by inert gas stripping and gas chromatography. <i>Anal. Chem.</i> 65, 3212–3218..	p.975
33	95.8 Pa·m^3/mol	95.8	20 °C	-	-	-	-	-	2B	×		該当なし.	p.975
34	123 Pa·m^3/mol	123	25 °C	-	-	-	-	-	2B	×		Dewulf, J., Drijvers, D., Van Langenhove, H. (1995) Measurement of Henry's law constant as function of temperature and salinity for the low temperature range. <i>Atmos. Environ.</i> 29, 323–331..	p.975
35	102.1 Pa·m^3/mol	18 %[Under non-acclimated conditions, degradation rates were 0 and 18% after five and ten days, respectively. No rates were given anymore for days 15 and 20. Under acclimated conditions no degradation rates were given.]	25 °C	-	-	-	-	-	2B	×		Dewulf, J., Drijvers, D., Van Langenhove, H. (1995) Measurement of Henry's law constant as function of temperature and salinity for the low temperature range. <i>Atmos. Environ.</i> 29, 323–331..	p.975
36	5.3 Pa·m^3/mol	5.3	35 °C	-	-	-	その他, from infinite dilution activity coefficient determined by relative GC technique	-	2B	×		Bhatia, S.R., Sandler, S.I. (1995) Temperature dependence of infinite dilution activity coefficients in octanol and octanol/water partition coefficients of some volatile halogenated organic compounds. <i>J. Chem. Eng. Data</i> 40, 1196–1198..	p.975

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
37	174 Pa·m^3/mol	174	27 °C	-	-	-	-	-	2B	×		Leighton Jr., D.T., Calo, J.M. (1981) Distribution coefficients of chlorinated hydrocarbons in dilute air-water systems for groundwater contamination applications. <i>J. Chem. Eng. Data</i> 26, 382–385..	p.975
38	133.1 Pa·m^3/mol	133.1	25 °C	-	-	その他,exptl., 1/K_AW (C_W/C_A)	-	-	2B	×		Hine, J., Mookerjee, P.K. (1975) The intrinsic hydrophilic character of organic compounds. Correlations in terms of structural contributions. <i>J. Org. Chem.</i> 40, 292–298..	p.975
39	110 Pa·m^3/mol	110	20 °C	-	-	-	-	-	2B	×		Wright, D.A., Sandler, S.I., DeVoll, D. (1992) Infinite dilution activity coefficients and solubilities of halogenated hydrocarbons in water at ambient temperatures. <i>Environ. Sci. Technol.</i> 26, 1828–1831..	p.975
40	55.9 Pa·m^3/mol	55.9	6 °C	-	-	-	-	-	2B	×		Dewulf, J., Drijvers, D., Van Langenhove, H. (1995) Measurement of Henry's law constant as function of temperature and salinity for the low temperature range. <i>Atmos. Environ.</i> 29, 323–331..	p.975
41	185 Pa·m^3/mol	185	35 °C	-	-	-	-	-	2B	×		Wright, D.A., Sandler, S.I., DeVoll, D. (1992) Infinite dilution activity coefficients and solubilities of halogenated hydrocarbons in water at ambient temperatures. <i>Environ. Sci. Technol.</i> 26, 1828–1831..	p.975
42	111.3 Pa·m^3/mol	111.3	20 °C	-	-	estimated by calculation	calculated-P/C	4C	×		Kavanaugh, M.C., Trussell, R.R. (1980) Design of aeration towers to strip volatile contaminants from drinking water. <i>J. Am. Water Works Assoc.</i> 72, 684–692..	p.975	
43	92.3 Pa·m^3/mol	92.3	25 °C	-	-	estimated by calculation	calculated-C_W/C_A	4C	×		McConnell, G., Ferguson, D.M., Pearson, C.R. (1975) Chlorinated hydrocarbons and the environment. <i>Endeavor</i> XXXVI, 13–18.. Pearson, C.R., McConnell, G. (1975) Chlorinated C1 and C2 hydrocarbons in the marine environment. <i>Proc. Roy. Soc. London B</i> 189, 305–322..	p.975	

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
44	99 Pa·m^3/mol	99	25 °C		-	-	experimental result	exptl.	2B	×		Dilling, W.L. (1977) Interphase transfer processes. II. Evaporation rates of chloromethanes, ethanes, ethylenes, propanes, and propylenes from dilute aqueous solutions. Comparisons with theoretical predictions. Environ. Sci. Technol. 11(4), 405–409..	p.975
45	123.9 Pa·m^3/mol	123.9	25 °C		-	-	estimated by calculation	calculated-P/C	4C	×		Dilling, W.L. (1977) Interphase transfer processes. II. Evaporation rates of chloromethanes, ethanes, ethylenes, propanes, and propylenes from dilute aqueous solutions. Comparisons with theoretical predictions. Environ. Sci. Technol. 11(4), 405–409..	p.975
46	NITE初期リスク評価書	0.00118 atm·m^3/mol	119.5635	23 °C		-	-	その他(推定値) 推定値	-	4C	×	SRC:HenryWin, 2002.	p.2
47		120 Pa·m^3/mol	120	23 °C		-	-	その他(推定値) 推定値	-	4C	×	SRC:HenryWin, 2002.	p.2
48		120 Pa·m^3/mol	120	23 °C		-	-	その他(測定値)		2B	×	SRC:HenryWin, 2002	P.2 3.物理化学的性状
49	PhysProp	0.00118 atm·m^3/mol	119.5635	25 °C		-	-	experimental result	-	2B	×	LEIGHTON,DTJR & CALO,JM (1981).	p.1
50	ECHA	104 Pa·m^3/mol	104	25 °C		2: reliable with restrictions	not key study	estimated by calculation				Mackay, D., Shiu, W.Y. (1981): J. Phys. Chem. Ref. Data 10,1175 - 1199.  Thomas, R.G. (1982): Volatilization from water. In: Lyman, W.J. et al. (eds.), Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Environmental Behaviour of Organic Compounds, McGraw-Hill Book Company, N.Y., 15-1 - 15-34.	No type Other Distribution modelling. 004
51		176 Pa·m^3/mol	176	30 °C		2: reliable with restrictions	not key study	experimental result		4A	×	Ashworth, R.A. et al. (1988): J. Hazard. Mater. 18, 25 - 36.	No type Other Distribution modelling. 008

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
52	96 Pa·m^3/mol	96	25 °C		2: reliable with restrictions	not key study	estimated by calculation		4C	×		Mackay, D., Shiu, W.Y. (1981): J. Phys. Chem. Ref. Data 10,11175 - 1199.  Thomas, R.G. (1982): Volatilization from water. In: Lyman, W.J. et al. (eds.), Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Environmental Behaviour of Organic Compounds, McGraw-Hill Book Company, N.Y., 15-1 - 15-34.	No type Other Distribution modelling. 004
53	124 Pa·m^3/mol	124	25 °C		2: reliable with restrictions	not key study	estimated by calculation		4C	×		Mackay, D., Shiu, W.Y. (1981): J. Phys. Chem. Ref. Data 10,11175 - 1199.  Thomas, R.G. (1982): Volatilization from water. In: Lyman, W.J. et al. (eds.), Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Environmental Behaviour of Organic Compounds, McGraw-Hill Book Company, N.Y., 15-1 - 15-34.	No type Other Distribution modelling. 004
54	111 Pa·m^3/mol	111	20 °C		2: reliable with restrictions	not key study	estimated by calculation	-	4C	×		Mackay, D., Shiu, W.Y. (1981): J. Phys. Chem. Ref. Data 10,11175 - 1199.  Thomas, R.G. (1982): Volatilization from water. In: Lyman, W.J. et al. (eds.), Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Environmental Behaviour of Organic Compounds, McGraw-Hill Book Company, N.Y., 15-1 - 15-34.	No type Other Distribution modelling. 004
55	95.7 Pa·m^3/mol	95.7			2: reliable with restrictions	not key study	estimated by calculation	according to a well established method	4C	×		Mackay Level Fugacity Based Environmental Equilibrium Partitioning Model, Version 2.11, Trent University 1999.	No type Other Distribution modelling. 005
56	119 Pa·m^3/mol	119	10 °C		2: reliable with restrictions	not key study	experimental result		4A	×		Ashworth, R.A. et al. (1988): J. Hazard. Mater. 18, 25 - 36.	No type Other Distribution modelling. 008
57	132 Pa·m^3/mol	132	15 °C		2: reliable with restrictions	not key study	experimental result		4A	×		Ashworth, R.A. et al. (1988): J. Hazard. Mater. 18, 25 - 36.	No type Other Distribution modelling. 008
58	143 Pa·m^3/mol	143	25 °C		2: reliable with restrictions	not key study	experimental result		4A	×		Ashworth, R.A. et al. (1988): J. Hazard. Mater. 18, 25 - 36.	No type Other Distribution modelling. 008

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
59 ECHA	149 Pa·m^3/mol	149	20 °C		2: reliable with restrictions	not key study	experimental result		4A	○		Ashworth, R.A. et al. (1988): J. Hazard. Mater. 18, 25 - 36.	No type Other Distribution modelling. 008
60 SIDS	95.7 Pa·m^3/mol	95.7	20 °C		その他,(2) valid with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×		Mackay Level Fugacity Based Environmental Equilibrium Partitioning Model, Version 2.11, Trent University 1999.	p.7;p.15;SIDS Dossier p.75
61 SIDS	149 Pa·m^3/mol	149	20 °C		その他,(2) valid with restrictions	key study	experimental result		3	○		Ashworth, R.A. et al. (1988): J. Hazard. Mater. 18, 25 - 36.	p.7;p.15;SIDS Dossier p.77
62	143 Pa·m^3/mol	143	25 °C		その他,(2) valid with restrictions	key study	experimental result		3	×		Ashworth, R.A. et al. (1988): J. Hazard. Mater. 18, 25 - 36.	p.7;p.15;SIDS Dossier p.77

## 基本情報

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCl

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	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号	
1 EPI Suite		1			BCF		4.204 L/kg (wet)[2B以上的値を用いて推定 (2C)]	4.204	BCFBFWIN			(Q)SAR			2C	x				
2 IUCLID			95.6 µg/l	14 day at 16 degree C	BCF		2	2	Tracer Study (14C-labeled solution)	no data						○	1,2-dichloroethane is not expected to bioconcentrate in fish due to its low octanol/water coefficient. The measured log BCF in bluegill sunfish is 0.30.	Barrows, M.E. et al. (1980): Bioconcentration and elimination of selected water pollutants by bluegill sunfish ( <i>Lepomis macrochirus</i> ) In: Haque, R. (ed.), Dynamics, exposure and hazard assessment of toxic chemicals, Ann Arbor Science Pub., Inc., Ann Arbor, MI, 379 - 392 Syracuse Res. Corp. (1978); NTIS/OTS 0511060 # 40-7848049 Veith, G.D. et al. (1980): ASTM Spec. Techn. Publ. 707, 116 - 129	3.7 Page 125/550	
3 IUCLID				1 day	BCF		2	2		no data						x		ISI5, 1996, HASKONING	3.7 Page 125/550	
4					BCF		0.3	0.3		no data						x		HSDB, on-line via STN	3.7 Page 126/550	
5					BCF		6	6		no data			calculated from water solubility			x		Kenaga, E.E. (1980): Ecotoxicol. Environ. Safety 4, 26 - 38	3.7 Page 127/550	
6 NITE初期リスク評価書	低濃縮性	1	0.01 mg/L	その他	下限	28.4~75.7	52.05	化審法TG	-	-	-	-			1B	x	テトラクロロエチレンの値であり、1,2-ジクロロエタンは化学物質審査規制法に基づく濃縮度試験が実施されていない。	通商産業省公報1978年12月28日：製品評価技術基盤機構化学物質管理情報 ( <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用) .	p.6	
7	低濃縮性	1	0.1 mg/L	その他	下限	25.8~77.1	51.45	化審法TG	-	-	-	-			1B	x	テトラクロロエチレンの値であり、1,2-ジクロロエタンは化学物質審査規制法に基づく濃縮度試験が実施されていない。	通商産業省公報1978年12月28日：製品評価技術基盤機構化学物質管理情報 ( <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用) .	p.6	
8 NITE初期リスク評価書	低濃縮性			14日間	BCF		2	2	ブルーギルによる14日間の濃縮度試験						○	排出半減期は2日以下	Barrows et al., 1980	p.6		
9 ECHA		1		BCF	-	2.75	2.75	BCFBFWIN			2: reliable with restrictions	not key study	estimated by calculation		4C	x			No type Other Bioaccumulation: aquatic/sediment. 002	
10 ECHA		1	100 µg/L	BCF	定常状態	2	2	-	no data		2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	○		review article or handbook Unnamed (1980) publication Unnamed (1980)	Exp Key Bioaccumulation: aquatic/sediment. 001	
11 SIDS	-	1		BCF	-	2[Measured and calculated BCFs of 2 and 3.4 (logBCF = 0.3 and 0.53, respectively) have been reported.]	2		no data	その他,(2) valid with restrictions	key study	experimental result		3	○			p.7;p.16;SIDS Dossier p.83		

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	ClCCl

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	キースタ ディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
-	-	1		BCF	-	2.75	2.75	-	-	-	その他,(2) valid with restrictions	key study	estimated by calculation	Bioconcentration factor estimated according to BCFWIN v2.14	4C	x		BCFWIN v2.14 - SRC-BCF for Microsoft Windows.	p.7;p.16;SIDS Dossier p.83

## 基本情報

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CC(Cl)Cl

## 解離定数

## 収集データ

	情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1	MOE初期評価	その他				-	-	-	-	-	-	-	x		財団法人化学物質評価研究機構 (2002): 既存化学物質安全性 (ハザード) 評価シート	P127 1.物質に関する基本 的事項 (2) 物理化学的性状
2	NITE初期リスク評価書	その他	[解離基なし]			-	-	-	-	-	-	-	x			p.2

## 基本情報

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCl

環境中運命

## 収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	pH	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタイの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価II)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	大気	総括				lifetime : >5 months												x	formyl chloride, chloroacetyl chloride, hydrogen chloride, and chloroethanol		p161
2 ATSDR	大気	OHラジカルとの反応		$2.2 \times 10^{-13}$ cm <sup>3</sup> /molecule-second	$5 \times 10^5$ molecule/cm <sup>3</sup>	73 days		73		25 EC								○			p168
3 EHC	大気	OHラジカルとの反応		$3.63 \times 10^{-13}$ cm <sup>3</sup> /molecule/sec					25 °C		記載なし		-	-	-	その他(推定値)	The rate of reaction of 1,2-dichloroethane with hydroxyl radicals has been predicted to be $3.63 \times 10^{-13}$ cm <sup>3</sup> /mol-sec at 25°C (Atkinson, 1987)	x		Atkinson R (1987) A structure-activity relationship for the estimation of rate constants for gas-phase reaction of OH radicals with organic compounds. Int J Chem Kinet, 19: 799-828.	4.1 Transport and fate in the environment
4	大気	OHラジカルとの反応		$5.42 \times 10^{-13}$ cm <sup>3</sup> /molecule/sec					4 °C		記載なし		-	-	-	その他(推定値)	The rate of reaction of 1,2-dichloroethane with hydroxyl radicals has been predicted to be $5.42 \times 10^{-13}$ cm <sup>3</sup> /mol-sec at 4°C (Nimitz & Skaggs, 1992).	x		Nimitz JS & Skaggs SR (1992) Estimating tropospheric lifetimes and ozone-depletion potentials of one- and two-carbon hydrofluorocarbons and hydrochlorofluorocarbons. Environ Sci Technol, 26(4): 739-744.	4.1 Transport and fate in the environment
5	大気	OHラジカルとの反応		$2.09 \times 10^{-13}$ cm <sup>3</sup> /molecule/sec					19 °C		記載なし		-	-	-	experimental result	It was experimentally determined to be $2.09 \times 10^{-13}$ cm <sup>3</sup> /mol-sec at 19°C (Qiu et al., 1992).	x		Qiu LX, Shi SH, Xing SB, & Chen SG (1992) Rate constants for the reactions of OH with five halogenated substituted ethanes from 292 K to 366 K. J Phys Chem, 96: 685-689.	4.1 Transport and fate in the environment
6	大気	OHラジカルとの反応			43~111 日						記載なし		-	-	-	その他(推定値)	Based on these values, and assuming an atmospheric hydroxyl radical concentration representative of a moderately polluted area (Finlayson-Pitts & Pitts, 1986), the estimated atmospheric lifetime of 1,2-dichloroethane is between 43 and 111 days.	x		Finlayson-Pitts BJ & Pitts JN (1986) Atmospheric chemistry: Fundamentals and experimental techniques. New York, Wiley-Interscience Publications.	4.1 Transport and fate in the environment
7 EPI Suite	大気	OHラジカルとの反応		$0.2555 \times 10^{-12}$ cm <sup>3</sup> /molecule/sec					AOPWIN						(Q)SAR		x				
8 Howard Deg	大気	OHラジカルとの反応			$3 \times 10^{-6}$ molecule/cm <sup>3</sup>	292 時間 [12.2 days]					Based upon measured rate data for the vapor phase reaction with hydroxyl radicals in air (Atkinson, R (1985)).		-	-	-	その他		x		Atkinson, R (1985)	p387

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCCl

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
9	大気	OHラジカルとの反応			3E+5 molecule/cm <sup>3</sup>	2917 時間 [122 days]					Based upon measured rate data for the vapor phase reaction with hydroxyl radicals in air (Atkinson, R (1985)).	-	-	-	その他			x	Atkinson, R (1985)	p387	
10	Howard FATE	大気	OHラジカルとの反応		1月[It is primarily degraded in the atmosphere by rection with hydroxyl radicals, having a half-life of a little over a month with a 1.9% loss for a 12 hour sunlit day [22,44].]		30			記載なし		-	-	-				x	[22] Howard C.J., Evenson K.M.; J Chem Phys 64: 4303-6 (1976). [44] Singh H.B. et al; Atmos Environ 15 601-12 (1981). [36] Pearson C.R., McConnell G.; Proc Roy Soc London B 189: 305-32b(1975)	Volume II, p155	
11	大気	直接光分解			1月[Once in the stmosphere, it may be transposed long distances and is primarily removed by photooxidation (half-life approx 1 month) with the products of photooxidation being CO <sub>2</sub> and HCl. Direct photolysis will not be a significant removal process.]		30			記載なし		-	-	-						Volume II, p154	
12	HSDB	大気	OHラジカルとの反応		2.48E-13 CU cm/mol·sec	5X10 <sup>-5</sup> hydroxyl radicals per cu cm	63日		63/25 °C				-	-	-	estimated by calculation			x	Kwok E.S.C., Atkinson R.; Estimation of hydroxyl radical rate constants for gas-phase organic Compounds using a structure-reactivity relationship: an update. Riverside, CA: Univ CA, Statewide Air Pollut Res Ctr., CMA contract no. AFC-8.0-OR (1994)	Environmental Fate & Exposure
13	大気	OHラジカルとの反応			65 日		65						-	-	-	estimated by calculation			x	SRC	Environmental Fate & Exposure
14	大気				lifetime : 0.32 yrs		116.8								estimated		The tropospheric lifetime in the Northern Hemisphere		ENVIRONMENTAL ABIOTIC DEGRADATION:		

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCCl

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該 非	値の種類	値の種類の詳細	キースタ ディー該非 (評価)	備考	文献	ページ番号等	
15	IUCLID	大気	OHラジカルとの反応	= 0.0000000000022 cm3/(molecul e * sec)	500000 molecule/c m3		ca. 50 % after 72.9 day	72.9			other (calculated)							○		Class, T., Ballschmiter, K. (1986); Chemosphere 15,413 – 427 Howard, C.J., Evenson, K.M (1976); J. Chem. Phys. 64,4303 – 4306 Pearson, C.R. (1982); C1 and C2 Halocarbons In: Hutzinger, O. (ed.), The Handbook of Environmental Chemistry, Vol. 3 part B, Springer-Verlag, Berlin 69 – 88 Singh, H.B. et al. (1981); Atmos. Environ. 15, 601 – 612	3.1.1 Photodegradation 54/550	
16		大気	OHラジカルとの反応	= 0.0000000000025 cm3/(molecul e * sec)	500000 molecule/c m3		ca. 50 % after 64.2 day	64.2			other (calculated)							○		Arnts, R.R. et al. (1989); J. Air Pollut. Control Assoc. 39,453 – 460	3.1.1 Photodegradation 54/550	
17		大気	OHラジカルとの反応	= 0.0000000000025 cm3/(molecul e * sec)	1000000 molecule/c m3		ca. 50 % after 36 day				other (calculated)							×		Hendry, D.G., Kenley, R.A. (1979); NTIS/PB-301384	3.1.1 Photodegradation 54/550	
18	IUCLID	大気	OHラジカルとの反応		300000 molecule/c m3		= 50 % after 121.5 day				other (measured); Field Observation							×	測定 : 大気 (場所 : 西)	Class, T., Ballschmiter, K. (1986); Chemosphere 15,413 – 427	3.1.1 Photodegradation 55/550	
19	IUCLID	大気	OHラジカルとの反応		3000000 molecule/c m3		= 50 % after 12.2 day				other (measured); Field Observation							×	測定 : 大気 (場所 : /)	Class, T., Ballschmiter, K. (1986); Chemosphere 15,413 – 427	3.1.1 Photodegradation 55/550	
20		大気	OHラジカルとの反応		1700000 molecule/c m3		= 50 % after 33.7 day				other (measured); Field Observation							×	測定 : 大気、南半球	Class, T., Ballschmiter, K. (1987); Fresenius Z. Anal. Chem.327, 198 – 204	3.1.1 Photodegradation 55/550	
21		大気	OHラジカルとの反応		700000 molecule/c m3		= 50 % after 81.8 day				other (measured); Field Observation							×	測定 : 大気負荷、北半球	Class, T., Ballschmiter, K. (1987); Fresenius Z. Anal. Chem.327, 198 – 204	3.1.1 Photodegradation 56/550	
22	IUCLID	大気	OHラジカルとの反応		500000 molecule/c m3		= 50 % after 72.9 day	72.9			other (measured); Field Observation							○	測定 : 大気	Class, T., Ballschmiter, K. (1986); Chemosphere 15,413 – 427	3.1.1 Photodegradation 56/550	
23		大気	OHラジカルとの反応		500000 molecule/c m3		= 50 % after 114.6 day	114.6			other (measured); Field Observation							×	測定 : 大気、合計	Class, T., Ballschmiter, K. (1987); Fresenius Z. Anal. Chem.327, 198 – 204	3.1.1 Photodegradation 56/550	
24		大気	OHラジカルとの反応			Halflife t1/2: ca. 1 month	1.9% loss for a 12 hoursunlit day											×	It is primarily degraded in the atmosphere by reaction with hydroxyl radicals, having a halflife of a little over a month with a 1.9% loss for a 12 hours unlit day	HSDB, on-line via STN ISIS5, 1996, HASKONING	3.1.1 Photodegradation 57/550	
25		大気	OHラジカルとの反応	0.22 x 10E-12 cm3 x Molekuel x s- 1	6 x 10E3 Molekuel/cm3	37日間	12時間で約 1.9%分解		ca. 27 Grad C/300 K		other (calculated)							×		HSDB, on-line via STN ISIS5, 1996, HASKONING		
26		大気	直接光分解															×	The direct photolysis in atmosphere is unlikely because 1,2-DCEa do not absorb light at wavelength > 290 nm	Callahan M.A. et al, "Water- related Environmental Fate of 129 Priority Pollutants", US EPA Office of Water Planning and Standards, Office of Water and Waste Management, Washington DC EPA-440/4-79-029b		
27		大気	other: smog conditions			about 5 days		5										×	the relative photochemical reactivity towards NOx for smog formation was 0.57	Sickles et al (1980), 73rd Proc. Ann. Meeting, Air Pollut. Control Assoc., RTP NC paper 80 –50.1, 16 p.	3.1.1 Photodegradation 57/550	

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCl

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
28 MOE初期評価	大気	直接光分解									記載なし		-	-	-	-		x		(12) Yates, W. F. and L. J. Hughes (1960); J. Phys. Chem. 64: 672-673. (13) Singh, H. B., L. J. Sales, and R. E. Stiles (1982); Distribution of selected gaseous organic mutagens and suspect carcinogens in ambient air. Environ. Sci. Technol. 16: 872-880.	P127 1.物質に関する基本的事項 (3) 環境運命に関する基礎的事項
29	大気	OHラジカルとの反応			5E+5 cm <sup>3</sup>	63 日		63			記載なし		-	-	-	-		x		Meylan, W. M. and P. H. Howard (1993); Computer estimation of the atmospheric gas-phase reaction rate of organic compounds with hydroxyl radicals and ozone. Chemosphere 26: 2293-2299.	P127 1.物質に関する基本的事項 (3) 環境運命に関する基礎的事項
30 NIST	大気	OHラジカルとの反応		2.69E-13 cm <sup>3</sup> /mol/sec				298 K[298]			その他,Estimated: thermochemical, kinetic, or other		-	-	-	estimated by calculation		x		Atmospheric chemistry: rate constants of the gas-phase reactions between halokanes of environmental interest and hydroxyl radicals. Chiorboli, C.; Piazza, R.; Tosato, M.L.; Carassiti, V. Coord. Chem. Rev. 125,241(1993).	CH <sub>2</sub> ClCH <sub>2</sub> Cl + ·OH → H <sub>2</sub> O + CH <sub>2</sub> ClCHCl·
31	大気	OHラジカルとの反応		1.53E-13 cm <sup>3</sup> /mol/sec[2.69x10 ~11 [cm <sup>3</sup> /molecule s] e ~12804 [J/mole]/RT]Pressure: 1.33E-3 - 2.67E-3 bar Bath gas: Ar]				293~418 K[293 - 418]			その他,Bond energy-bond order (BEBO)		-	-	-	estimated by calculation		x		Kinetics studies of reactions of OH radicals with four haloethanes. Part I. Experiment and BEBO calculation Xing, S-B.; Shi, S-H.; Qiu, L-X. Int. J. Chem. Kinet. 24,1(1992)	CH <sub>2</sub> ClCH <sub>2</sub> Cl + ·OH → H <sub>2</sub> O + CH <sub>2</sub> ClCHCl·
32	大気	OHラジカルとの反応		1.01E-2± 2.0E-2 記載なし [Pressure: 1.01 bar Bath gas: N <sub>2</sub> ]Reference reaction: C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> + ·OH → ·C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> + H <sub>2</sub> O]				297 K[297]			その他,Relative rate value measured		-	-	-	experimental result		x		Determination of room temperature OH rate constants for acetylene, ethylene dichloride, ethylene dibromide, p-dichlorobenzene and carbon disulfide. Arnts, R.R.; Sella, R.L.; Bufalini, J.J. J. Air Pollut. Control Assoc. 39,453(1989)	CH <sub>2</sub> ClCH <sub>2</sub> Cl + ·OH → H <sub>2</sub> O + CH <sub>2</sub> ClCHCl·
33	大気	OHラジカルとの反応		2.19E-13± 4.98E-14 cm <sup>3</sup> /molecul e/sec[Pressure: 1.00E-3 - 1.00E-2 bar Bath gas: He]				296 K[296]			その他,Absolute value measured directly		-	-	-	experimental result		x		Rate Constants for the Reactions of OH with Ethane and some Halogen Substituted Ethanes at 269K. Howard, C.J.; Evenson, K.M. J. Chem. Phys. 64(1976)	CH <sub>2</sub> ClCH <sub>2</sub> Cl + ·OH → H <sub>2</sub> O + CH <sub>2</sub> ClCHCl·
34	大気	OHラジカルとの反応		2.81E-13± 5.81E-14 cm <sup>3</sup> /molecul e/sec[Reference reaction: C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> + ·OH → ·C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> + H <sub>2</sub> O]Pressure: 1.01 bar Bath gas: N <sub>2</sub> ]				297 K[297]			その他,Derived from fitting to a complex mechanism		-	-	-	experimental result		x		Determination of room temperature OH rate constants for acetylene, ethylene dichloride, ethylene dibromide, p-dichlorobenzene and carbon disulfide. Arnts, R.R.; Sella, R.L.; Bufalini, J.J. J. Air Pollut. Control Assoc. 39,453(1989)	CH <sub>2</sub> ClCH <sub>2</sub> Cl + ·OH → H <sub>2</sub> O + CH <sub>2</sub> ClCHCl·

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCCl

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該当性	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該当性(評価)	備考	文献	ページ番号等
35	大気	OHラジカルとの反応		2.55E-13 cm <sup>3</sup> /molecule/sec <sup>0.07x10^-12</sup> [± 7.8x10 <sup>-13</sup> cm <sup>3</sup> /molecule s](T/298 K) <sup>1.00</sup> e <sup>-6659</sup> [±755 J/mole]/RT Pressure: 0.99 bar Bath gas: He]				292~775 K[292 - 775]		その他,Absolute value measured directly		-	-	experimental result			x		Investigation of 1,2-dichloroethane-hydroxyl kinetics over an extended temperature range: effect of chlorine substitution. Taylor, P.H.; McCarron, S.; Delinger, B. Chem. Phys. Lett. 177,27(1991)	CH2CICH2Cl + ·OH → H2O + CH2CICHCl·	
36	大気	OHラジカルとの反応		2.29E-13 cm <sup>3</sup> /molecule/sec <sup>0.05x10^-11</sup> [± 1.58x10 <sup>-12</sup> cm <sup>3</sup> /molecule s] e <sup>-9478</sup> [J/mole]/RT Pressure: 2.67E-3 - 4.00E-3 bar Bath gas: Ar]				292~366 K[292 - 366]		その他,Absolute value measured directly		-	-	experimental result			x		Rate constants for the reactions of OH with five halogen-substituted ethanes from 292 to 366 K Qiu, L.X.; Shi, S.H.; Xing, S.B.; Chen, X.G. J. Phys. Chem. 96,685(1992)	CH2CICH2Cl + ·OH → H2O + CH2CICHCl·	
37	大気	OHラジカルとの反応		2.30E-13 cm <sup>3</sup> /molecule/sec <sup>0.92x10^-12</sup> [± 1.61x10 <sup>-12</sup> cm <sup>3</sup> /molecule s] e <sup>-9063</sup> [± 8314472 J/mole]/RT  Pressure: 1.33E-3 - 2.67E-3 bar Bath gas: Ar]				293~418 K[293 - 418]		その他,Absolute value measured directly		-	-	experimental result			x		Kinetics studies of reactions of OH radicals with four haloethanes. Part I. Experiment and BEBO calculation Xing, S-B.; Shi, S-H.; Qiu, L-X. Int. J. Chem. Kinet. 24,1(1992)	CH2CICH2Cl + ·OH → H2O + CH2CICHCl·	
38	ECHA	大気	OHラジカルとの反応	2.2E-13 3E5 molecule/c m <sup>3</sup>	121.5 日				その他,Field Observation		no data	2: reliable with restrictions		experimental result			x		Class, T., Ballschmiter, K. (1986) Chemosphere 15, 413 - 427.	No type Other Phototransformation in air. 004	
39		大気	OHラジカルとの反応	2.55E-13 cm <sup>3</sup> /molecule/sec <sup>1.5E6</sup>	41.9 日				AOPWIN		no data	2: reliable with restrictions	not key study	estimated by calculation			x			No type Other Phototransformation in air. 002	
40		大気	OHラジカルとの反応	2.2E-13 cm <sup>3</sup> /molecule/sec <sup>1E6</sup>	35.6 日				記載なし		2: reliable with restrictions	not key study	estimated by calculation	-		x		Class, T., Ballschmiter, K. (1986) Chemosphere 15, 413 - 427. Singh, H.B. et al. (1981) Atmos. Environ. 15, 601 - 612. study report Unnamed (1979)	No type Other Phototransformation in air. 001		

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCCl

環境中運命

収集データ

	情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの該 非	値の種類	値の種類の詳細	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
41		大気	オゾンとの反応		2.2E-13 cm^3/molecul e/sec							その他		no data	2: reliable with restrictions	not key study	experimental result (corrected)	From the plotted OH concentration as a function of the length of the reaction zone (equivalent to reactant inlet position) for different reactant concentrations (16 measurements) the average rate constant 22x10exp - 14cm^3/(mol ecules x s) was calculated.	x		Howard, C.J., Evenson, K.M. (1976) J. Chem. Phys. 64, 4303 - 4306.	No type Other Phototransformatio n in air. 003
42	SIDS	大気	直接光分解		2.2E-13 cm^3/molecul e/sec	[From the plotted OH concentration as a function of the length of the reaction zone (equivalent to reactant inlet position) for different reactant concentrations (16 measurements) the average rate constant 22x10exp - 14cm^3/(mol ecules x s) was calculated.]							その他,other (measured)		no data	その他,(1) valid without restriction	-	experimental result		x	Howard, C.J., Evenson, K.M (1976) J. Chem. Phys. 64, 4303 - 4306.	p.15;SIDS Dossier p.67-68
43		大気	直接光分解		2.2E-13 cm^3/molecul e/sec	3000000 molecule/c m^3[Sensiti zer : OH Conc. of sensitizer : 3000000 mg/l]		50 %[50 % after 12.2 day(s)]	12.1553588			その他,other (measured): Field Observation		no data	その他,(1) valid without restriction	-	experimental result		x		Class, T., Ballschmiter, K. (1986): Chemosphere 15, 413 - 427.	p.15;SIDS Dossier p.67
44		大気	直接光分解		2.2E-13 cm^3/molecul e/sec	300000 molecule/c m^3[Sensiti zer : OH Conc. of sensitizer : 300000 mg/l]		50 %[50 % after 121.5 day(s)]	121.553588			その他,other (measured): Field Observation		no data	その他,(1) valid without restriction	-	experimental result		x		Class, T., Ballschmiter, K. (1986): Chemosphere 15, 413 - 427.	p.15;SIDS Dossier p.66-67

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCCl

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの該 非	値の種類	値の種類の詳細	キースタ ディー該非 (評価基)	備考	文献	ページ番号等
45	大気	直接光分解		2.2E-13 cm^3/molecul e/sec	1000000 mg/l[Sensitiz er : OH Conc. of sensitizer : 1000000 mg/l] [With a sensitizer concentrat on of 500 000 molecules/c m^3 a half life of 73 days is calculated.]	50 %[50 % after 35.6 day(s)]					その他,other (calculated)		-	その他,(1) valid without restriction	-	estimated by calculation		x		Class, T., Ballschmiter, K. (1986): Chemosphere 15, 413 - 427. Hendry, D.G., Kenley, R.A. (1979): NTIS/PB-301384. Singh, H.B. et al. (1981): Atmos. Environ. 15, 601 - 612.	p.15;SIDS Dossier p.66
46	大気	直接光分解		2.55E-13 cm^3/molecul e/sec	1500000 molecule/c m^3[Sensitiz er : OH Conc. of sensitizer : 1500000 mg/l]	50 %[50 % after 41.9 day(s)]	20.9739524				その他,other (calculated)		no data	その他,(2) valid with restrictions	-	estimated by calculation		x		AOPwin v1.90, SRC-AOP for Microsoft Windows.	p.15;SIDS Dossier p.66

## 基本情報

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	C#CCCl

環境中運命

## 収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタティの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価II)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	水域	生分解					14 % after 14 day				laboratory experiments using a domestic waste water inoculum 初期濃度 : 5mg/l				experimental result			x	初期濃度 : 10 mg / l の場合、分解損失(揮発分(10日で27%捕正率)は、7日で15%、14日で30%。	Tabak et al. 1981	p168
2	水域	生分解					0% [not biodegraded after 8–16 weeks]				bacteria isolated from groundwater				experimental result			x	but no details on the kinetic experiments used to establish these half-lives were reported	Wilson et al. 1983	p168
3 ATSDR	水域	生分解 (好気的)			半減期 : 100day		100				in aerobic water				experimental result			x	but no details on the kinetic experiments used to establish these half-lives were reported	Capel and Larson 1995	p168
4	水域	生分解 (好気的)					97% after 6day				using aerobic groundwater microcosms obtained from a Superfund site in California				experimental result			x	※Superfund siteの微生物使用	Cox et al. 1998	p168
5	水域	生分解 (好気的)					approximately 10%				24-hour incubation at 25 EC under aerobic conditions				experimental result			x	※Vandenbergh and Kunka(1988)によると、様々な塩素化脂防族炭化水素を汚染された土壤と水から分離された Pseudomonas fluorescens株(PFL12)を使用	Vandenbergh and Kunka 1988	p168
6	水域	生分解 (好気的)					15–23% after 4 weeks				under aerobic conditions with an unsaturated calcareous soil 初期濃度 : 100 ppb							x	mineralization to carbon dioxide	Watwood et al. 1991	p169
7 ATSDR	水域	生分解 (嫌気的)			半減期 : 400day		400				in anaerobic water				experimental result			x		Capel and Larson 1995	p168
8	水域	生分解 (嫌気的)					0% [not biodegraded after 35 days]				under anaerobic conditions in sediment-water test systems				experimental result			x		Jafvert and Wolfe 1987	p168
9	水域	生分解 (嫌気的)					100% (over a 2-week)				by anaerobic microcosms and enrichment cultures derived from river sediment 初期濃度 : 2 μmol							x	completely dechlorinated to ethane	Loffler et al. 1997	p169
10	水域	生分解 (嫌気的)		A first-order biodegradation rate constant : 0.013 day <sup>-1</sup>		半減期 : 約 52日		52			in an anaerobic sediment slurry							x		Peijnenburg et al. 1998	p169
11	水域	生分解 (嫌気的)					3.3–3.4% after 4 weeks				under anaerobic conditions with an unsaturated calcareous soil 初期濃度 : 100 ppb								mineralization to carbon dioxide	Watwood et al. 1991	p169
12 ATSDR	水域	加水分解		$2.1 \times 10^{-8}$ second <sup>-1</sup>		65years												x		Barbash and Reinhard 1989;Jeffers et al. 1989	p168
13	水域	加水分解		$1.8 \times 10^{-8}$ second <sup>-1</sup>		72 years				中性	25 EC							x		Barbash and Reinhard 1989;Jeffers et al. 1989	p168

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCl

環境中運命

収集データ

	情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等	
14		水域	加水分解				6 years												x	Although still a slow process, this latter reaction may occur in hypoxic groundwater where hydrogen sulfide occurs naturally.	Barbash and Reinhard 1989; Jeffers et al. 1989	p168	
15		水域	加水分解				4.9x10 <sup>-4</sup> years				9.15 EC								x		Miyamoto and Urano 1996	p168	
16	EHC	水域	総括分解				23 年		8,395	15 °C	7	In conditions similar to those of groundwater (i.e. in the presence of sodium sulfide, a pH of 7, and a temperature of 15° C)		-	-	-	その他(測定値)			x		Barbash JE & Reinhard M (1989) Abiotic dehalogenation of 1,2-dichloroethane and 1,2-dibromoethane in aqueous solution containing hydrogen disulfide. Environ Sci Technol, 23(11): 1349-1357.	4.1 Transport and fate in the environment
17		水域	揮発				5-29分		0.003-0.02								experimental result		x	at varying depths and surface areas	Dilling et al., 1975; Chiou et al., 1980	4.1 Transport and fate in the environment	
18		水域	揮発				9日		9								fate modelling (EXAMS)		x	in a eutrophic lake and one day (assuming a loading rate of 0.1 kg 1,2-dichloroethane)	US EPA, 1982a	4.1 Transport and fate in the environment	
19		水域	揮発				1日		1								fate modelling (EXAMS)		x	in a 300-km stretch of a river system (assuming a loading rate of 0.1 kg 1,2-dichloroethane)	US EPA, 1982a	4.1 Transport and fate in the environment	
20		水域	生分解				No biodegradation (after 35 days)			pH not reported	in an anoxic sediment-water system 初期濃度 : 1.0 mg/l								x		Jafvert & Wolfe, 1987	4.1 Transport and fate in the environment	
21		水域	生分解				20-63% (7日以内、うち5-27%は揮発による)			static flask study aerobic degradation 初期濃度 : 5 and 10 mg/l						experimental result		x		Tabak et al., 1981	4.1 Transport and fate in the environment		
22		水域	生分解(嫌気的)				63 % (25 day)			batch experiment under anaerobic conditions						experimental result		x		Bouwer & McCarty (1983)	4.1 Transport and fate in the environment		
23	EHC	水域	加水分解				72 年		26,280	25 °C	[at neutral pH]	記載なし		-	-	-	その他	Although hydrolysis of 1,2-dichloroethane may also occur in the aquatic environment	○		Barbash JE & Reinhard M (1989) Abiotic dehalogenation of 1,2-dichloroethane and 1,2-dibromoethane in aqueous solution containing hydrogen disulfide. Environ Sci Technol, 23(11): 1349-1357.	4.1 Transport and fate in the environment	
24	EPI Suite	水域	生分解				Weeks-Months				BIOWIN	Weeks-Months				(Q)SAR	Biowin3 Ultimate Biodegradation	x					
25	Howard Deg	水域	生分解(嫌気的)				17280 時間 [24 months]		720	10~30°Cの温度 水温を20、15又は10°Cに徐々に下げても、分解には影響なし。	中性pH	Type : aerobic Inoculum : other bacteria: Mischung von Reinkulturen GJ 10 nach DE 1		-	-	-	その他		x		Stucki, G. et al. (1992): Water Res. 26, 273 – 278	p386	

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCCl

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号
26	水域	生分解 (好気的)			2400 時間 [100 days]		100					-	-	-	その他	Scientific judgement based upon unacclimated grab sample of aerobic soil from ground water aquifers and acclimated river die-away rate data	x	※Wilsonら(1983)の要約によると、分解はは検出されなかったとの記載がある。同文献を根拠とするATSDRのデータでは、0% [not biodegraded after 8–16 weeks]となっている。	low t1/2: Wilson, et al. (1983A)	p386	
27	水域	生分解 (好気的)			4320 時間[6 months]		180					-	-	-	その他	Scientific judgement based upon unacclimated grab sample of aerobic soil from ground water aquifers and acclimated river die-away rate data	x	※Mudderら(1981)の要約によると、21日間の驯化期間あり。	high t1/2: Mudder, T (1981)	p386	
28	水域	生分解 (嫌気的)			9600 時間 [400 days]		400		記載なし			-	-	-	その他		x				p386
29	Howard Deg	水素	加水分解		1.1 年		401.5		記載なし		Scientific judgement based upon rate constant at neutral pH (0.63 /yr) (Kollig, HP et al. (1987)).	-	-	-	その他		x		Kollig, HP et al. (1987)	p387	
30	水域	光分解			[No data]			記載なし		-	-	-	-	-	その他		x				p387
31	Howard FATE	水域	総括分解		10 日		10	記載なし		-	-	-	-	-	その他	However, a modeling study using the EXAMS model for an eutrophic lake gave a half-life of 10 days	x	[52] USEPA: An Exposure and Risk Assessment for Dichloroethanes. Draft Final Report p4-14 to 4-24 (1980).	Volume II, p154		
32	Howard FATE	水域	揮発		3.8 時間 [estimated to be 3.8 hr at 20 °C.]		0.16	20 °C[estimated to be 3.8 hr at 20 °C.]	記載なし		-	-	-	-	その他 (推定値)	The half-life for volatilization from a model river 1 m deep flowing 1 m/sec with a wind velocity of 3 m/sec is estimated to be 3.8 hr at 20 °C based on the Henry's Law constant..	x	[29] Lyman WJ et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Environmental Behavior of Organic Compounds. McGraw Hill, NY (1982).	Volume II, p154, p156		
33	水域	揮発			10 日		10	記載なし		-	-	-	-	-	Releases to water will primarily be removed by evaporation (half-life several hours to 10 days.)	x			Volume II,p154		

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCl

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
34	水域	生分解					0~7% [The percent BOD produced in 5-10 days is 0-7%.]				記載なし	-	-	-	-	-	-	x	[20] Heukelekian H, Rand MC; Water Pollut Control Assoc 29: 1040-53 (1955). [38] Price KS et al; J Water Pollut Control Fed 46: 63-77 (1974). [47] Stover EL, Kincannon DF; J Water Pollut Control Fed 55: 97-109 (1983)	Volume II, p155	
35	HSDB	水域	揮発			4時間		0.17											x	SRC	AQUATIC FATE:
36	水域	揮発				4日		4										x	SRC	AQUATIC FATE:	
37	水域	生分解					< 5 ug/l (分解度にすると76% ) after a 21 day				using microbial consortia enriched from subsurface sediments contaminated with chlorinated hydrocarbons, a mixed-organic waste 初期濃度: 21 ug/l							x	※混合有機化合物である塩素化炭化水素で汚染された地下堆積物から濃縮された微生物を使用	Phelps TJ et al; Environ Sci Technol 25: 1461-5 (1991) N: AEROBIC:	ENVIRONMENTAL BIODEGRADATION:
38	水域	生分解	attenuation rate constant : 0.27/yr								vertical profile sampling of monitoring wells on the site							x	at the West KL Avenue Landfill, Kalamazoo, MI via	Ravi V et al; Bioremed J 2: 239-58 (1998)	ENVIRONMENTAL BIODEGRADATION: ANAEROBIC:
39	水域	生分解(好気的)					0-7% (5-10days)				in aerobic systems using sewage seed or activated sludge							x	※Stover and F. Kincannon (1983)の要約によると、「The selected organic compounds are combined with a "base mix" that is a readily biodegradable substrate.」	Price KS et al; J Water Pollut Control Fed 46: 63-77 (1974) Heukelekian H, Rand MC; Water Pollut Control Assoc 29: 1040-53 (1955) Stover EL, Kincannon DF; J Water Pollut Control Fed 55: 97-109 (1983)	ENVIRONMENTAL FATE:
40	水域	生分解(嫌気的)				No degradation occurred after 4 months					in an acclimated anaerobic system							x		Bouwer EJ, McCarty PL; App Environ Microbiol 45: 1286-94 (1983)	ENVIRONMENTAL BIODEGRADATION: ANAEROBIC:
41	水域	加水分解				50000 年		1,825,000										x		Drury JS, Hammons AS; Investigations of Selected Environmental Pollutants 1,2-Dichloroethane. Washington, DC: USEPA-560/2-78-006 p. 73-8 (1979)	
42	IUCLID	水域	揮発			10 day		10			using the EXAMS model							x	for a eutropic lake		
43	水域	揮発				4時間		0.167									x	深さ1メートルの川、1 メートル/秒の流量と3 メートル/秒の風速			
44	水域	生分解				< 20 % after 4 month											x		ISIS5, 1996, HASCONING	3.5	
45	水域	生分解				< 20 % after 4 month											x		ISIS5, 1996, HASCONING	3.5	
46	水域	生分解(好気的)				= 30 % after 150 day					Type : aerobic Inoculum : activated sludge (都市下水処理場の活性汚泥) 初期濃度 : 8.4ug/l				experimental result	other: Laboratory (Biodegradation)	x		Convery, J.J. et al. (1980); Occurrence and removal of toxics in municipal wastewater treatment facilities cited in: Patterson, J.W., Kodukala, P.S. (1981): CEP 77,48 - 55 Hutton, D.G. (1980); Industrial Wastes, 22 (March/April, 1980)cited in: Patterson, J.W., Kodukala, P.S. (1981): CEP 77,48 - 55	3.5	

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCCl

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
47	水域	生分解(好気的)				= 90 % after 21 day		温度 : 25°C		Type : aerobic Inoculum : other bacteria (soil as enrichment) 初期濃度 : 200-300μg/l, メタン添加					experimental result		x	※物質濃度が0.2-0.3mg/lと低すぎる、また炭素源としてのメタンの存在下であるため不採用	Henson, J.M. et al. (1989); J. Ind. Microbiol. 4, 29 - 35	3.5	
48	水域	生分解(好気的)				< 20 %				Type : aerobic Inoculum : sewage/seed or activated sludge					experimental result	other	x		ICI Group Environmental Laboratory Report. Ecotoxicology/Physical Chemistry Profile for 1,2-Dichloroethane 2240 Jan 1991	3.5	
49	水域	生分解(好気的)				< 20 %				Type : aerobic Inoculum : other bacteria; ground water (sandy aquifer solids)					experimental result	other: Column Study	x		Lanzarone, N.A., McCarty, P.L. (1990); Ground Water 28, 910 - 919	3.5	
50	水域	生分解(好気的)				= 65 %		10~30°C の温度	中性pH	Type : aerobic Inoculum : other bacteria; Mischung von Reinkulturen GJ 10 nach DE 1					experimental result	other: Laboratory (Biodegradation)	x	※Stuckiら (1992)の要約によると、DCAを無機化できる2つの純粋な培養物の混合物を使用。	Stucki, G. et al. (1992): Water Res. 26, 273 - 278	3.5	
51	水域	生分解(好気的)				= 95 % after 35 day		10~30°C の温度 水温を20、15又は10°Cに徐々に下げても、分解には影響なし。	中性pH	Type : aerobic Inoculum : other bacteria; Mischung von Reinkulturen GJ 10 nach DE 1					experimental result		x	※Stuckiら (1992)の要約によると、DCAを無機化できる2つの純粋な培養物の混合物を使用。	Stucki, G. et al. (1992): Water Res. 26, 273 - 278	3.5	
52	水域	生分解(好気的)				> 90 % after 20 day				Type : aerobic Inoculum : other 初期濃度 : 5mg/l					experimental result		x	初期濃度 : 10 mg / l の場合、分解損失(揮発分補正値)は、7日で15%、14日で30%。	US Department of Health & Human Services.Draft Toxicological Profile for 1,2-dichloroethane Feb 1993.(ATSDR) ※おぞらくTabak et al. 1981	3.5	
53	水域	生分解(嫌気的)				14 % after 14 day				Type : anaerobic Inoculum : other bacteria; methanogen					experimental result		x		Bouwer, E.J., McCarty, P.L. (1983); Appl. Environ. Microbiol. 45, 1286 - 1294	3.5	
54	水域	生分解(嫌気的)				14 % after 14 day[under test conditions no biodegradation observed]				Type : anaerobic Inoculum : Acclimated System					experimental result		x		ICI Group Environmental Laboratory Report.Ecotoxicology/Physical Chemistry Profile for 1,2-Dichloroethane 2240 Jan 1991.	3.5	
55	IUCOLID	水域	加水分解			50-72年	18,250-26,280										○				
56	水域	abiotic				= 300 year		109,500 15 degree C	7						other: Measured		x	バッファーの追加なし	ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Solvay S.A. Bruxelles ICI Wilhelmshaven GmbH & Co Wilhelmshaven Huels AG Marl Wacker - Chemie GmbH Burghausen		
57	水域	abiotic				= 310 year		113,150 15 degree C	7						other: Measured		x	蒸留水の添加	同上		
58	水域	abiotic				= 170 year		62,050 15 degree C	7						other: Measured		x	リン酸緩衝液の添加(50 mM)	同上		
59	水域	abiotic				= 23 year		8,395 15 degree C	7						other: Measured		x	リン酸緩衝液(50 mM)、硫化物(1 mM)の添加	同上		
60	水域	abiotic				= 72 year		26,280 25 degree C	7						other: Calculated		x		同上		

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCCl

環境中運命

収集データ

	情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等	
61		水域	abiotic				= 64 year		23,360	25 degree C	7					other: Measured		x	バッファーの追加なし	同上			
62	IUCCLID	水域	abiotic				= 72 year		26,280	25 degree C	7					other: Measured	○		蒸留水の添加	同上			
63		水域	abiotic				= 37 year		13,505	25 degree C	7					other: Measured		x	リン酸緩衝液の添加	同上			
64		水域	abiotic				= 6 year		2,190	25 degree C	7					other: Measured		x	リン酸緩衝液 (50 mM)、硫化物 (1 mM) の添加	同上			
65		水域	abiotic				= 28 minute(s)		0.019	25 degree C						other: Measured		x	96分後: 90%のガス放出	同上			
66		水域	abiotic				> 1.4 時間					混合物I (塩化ビニル: 10 mg/l、塩化メチレン: 4 mg/l、テトラクロロエテン: 4 mg/l、トリクロロエチレン: 4 mg/lおよび1,2-ジクロロエタン: 4 mg/l) を添加する場合				other: Measured (field)		x		同上			
67		水域	abiotic				< 5 % after 2 hour(s)					Exp. conc.: 1.0 mg/l						x					

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCl

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
既存点検事業	水域	生分解(好気的)					1.10%				化審法TG			2: reliable with restrictions	key study	experimental result	環保業第5号、業免第615号、49基局第392号	○	Test mat. analysis	昭和52年度特定化学品安全対策費補助金に係る安全性試験結果報告書	
既存点検事業	水域	生分解(好気的)					1.60%				化審法TG			2: reliable with restrictions	key study	experimental result	環保業第5号、業免第615号、49基局第392号	○	TOC removal	昭和52年度特定化学品安全対策費補助金に係る安全性試験結果報告書	
既存点検事業	水域	生分解(好気的)					0%				化審法TG			2: reliable with restrictions	key study	experimental result	環保業第5号、業免第615号、49基局第392号	○	O_2 consumption	昭和52年度特定化学品安全対策費補助金に係る安全性試験結果報告書	
MOE初期評価	水域	生分解(好気的)									記載なし			-	-	experimental result		×	※Stover and F. Kincannon (1983)の要約によると、「The selected organic compounds are combined with a "base mix" that is a readily biodegradable substrate.」	Stover, E. L. and D. F. Kincannon (1983): J. Water Pollutant Control Fed. 55: 97-109.	P127 1.物質に関する基本的事項 (3) 環境運命に関する基礎的事項
MOE初期評価	水域	生分解(好気的)									記載なし			-	-	experimental result		×	※Stover and F. Kincannon (1983)の要約によると、「The selected organic compounds are combined with a "base mix" that is a readily biodegradable substrate.」	Stover, E. L. and D. F. Kincannon (1983): J. Water Pollutant Control Fed. 55: 97-109.	P127 1.物質に関する基本的事項 (3) 環境運命に関する基礎的事項
MOE初期評価	水域	生分解(嫌気的)									記載なし			-	-	experimental result		×		Bouwer, E. J. and P. L. McCarty (1983): Transformations of 1-carbon and 2-carbon halogenated aliphatic organic compounds under methanogenic conditions. Appl. Environ. Microbiol. 45: 1286-1294	P127 1.物質に関する基本的事項 (3) 環境運命に関する基礎的事項
NITE初期リスク評価書	水域	生分解					1%				化審法TG			-	-	experimental result		○	Test mat. analysis	通商産業省公報1978年12月28日：製品評価技術基盤機構化学物質管理情報（ <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用）	p.5
NITE初期リスク評価書	水域	生分解					0%				化審法TG			-	-	experimental result		○	O_2 consumption	通商産業省公報1978年12月28日：製品評価技術基盤機構化学物質管理情報（ <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用）	p.5
NITE初期リスク評価書	水域	生分解					2%				化審法TG			-	-	experimental result		○	TOC removal	通商産業省公報1978年12月28日：製品評価技術基盤機構化学物質管理情報（ <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用）	p.5
ECHA	水域	生分解(好気的)					73%					no data	2: reliable with restrictions	not key study	experimental result	その他Laboratory (Biodegradation)	×	※混合有機炭素物である塩素化炭化水素で汚染された地下堆積物から濃縮された微生物を使用	Phelps, T.J. et al. (1991) Environ. Sci. Technol. 25, 1461 - 1465.	Exp Other Biodegradation in water: screening tests. 004	
	水域	生分解(好気的)					90 % [Sampling time: 20 d]				Initial conc.: 200 - 300 µg/L; mixed bacterial culture growing on methane;		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result	その他Laboratory subculture of soil inoculum (top layer). Co-metabolism of chlorinated alkanes in presence of methane as source of carbon, under aerobic conditions	×	※物質濃度が0.2-0.3mg/Lと低すぎる、また炭素源としてのメタンの存在下であるため不採用	publication Unnamed (1989) ※おそらくHenson, J.M. et al. (1989): J. Ind. Microbiol. 4, 29 - 35.	Exp Key Biodegradation in water: screening tests. 001

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCl

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
79	ECHA	水域	生分解 (好気的)								1,2-Dichloroethane may serve as the sole carbon source. Substrate: 494.8 mg/L 1,2-dichloroethane which can be completely consumed (growth rate: 0.08/h). Degradation product: chloride.		no data	2: reliable with restrictions	not key study	experimental result	その他, According to Stucki et al. 1981	※物質濃度が494.8mg/Lと高すぎるため不採用	Stucki, G. et al. (1981) Microbial degradation of chlorinated C1 and C2 hydrocarbons. In: Leisinger, Th. et al. (eds.), Microbial degradation of xenobiotics and recalcitrant compounds, Academic Press XIV, 131 - 137.	Stucki, G. et al. (1983) Experientia 39, 1271 - 1273.	No type Other Biodegradation in water: screening tests. 005
80		水域	生分解 (好気的)			95 %[Sampling time: 35 d]							no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result	その他, Laboratory (Biodegradation)	×	※Stuckiら(1982)の要約によると、0.08/hは、1,2-ジクロロエタンに対するDE株の増殖率のこと。	Stucki, G. et al. (1992) Water Res. 26, 273 - 278.	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests. 002
81		水域	生分解 (好気的)			53 %[1,2-dichloroethane concentrations of 10 mg/L]							no data	2: reliable with restrictions	not key study	experimental result	その他, task-screening procedure according to Bunch and Chambers (modified)	×	※Tabakら(1981)の要約によると、After stepwise adaptation(段階的な馴化の後)とされているので不採用	Tabak, H.H. et al. (1981) Water Pollut. Control Fed. 53, 1503-1518.	No type Other Biodegradation in water: screening tests. 007
82		水域	生分解 (好気的)			63 %[1,2-dichloroethane concentrations of 5 mg/L]							no data	2: reliable with restrictions	not key study	experimental result	その他, task-screening procedure according to Bunch and Chambers (modified)	×	※Tabakら(1981)の要約によると、After stepwise adaptation(段階的な馴化の後)とされているので不採用	Tabak, H.H. et al. (1981) Water Pollut. Control Fed. 53, 1503-1518.	No type Other Biodegradation in water: screening tests. 007
83		水域	生分解 (好気的)								After induction gram-negative bacteria of the strain Pseudomonas fluorescens (strain PFL 12) isolated from soil and water samples of a landfill (contaminated with 1,2-dichloroethane) are capable of metabolising 1,2-dichloroethane. Degradation of 100 µg dichloroethane/ml by PFL to 10 µg/ml within 24 h.		no data	2: reliable with restrictions	not key study	experimental result	その他, Laboratory	※PFLは1,2-ジクロロエタンに事前に適応しているため、不採用	Vandenbergh, P.A., Kunka, B.S. (1988) Appl. Environ. Microbiol. 54, 2578 - 2579.	No type Other Biodegradation in water: screening tests. 006	
84		水域	生分解 (嫌気的)			63%							no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result	その他, Batch Experiment	×	The primary transformation product was CO <sub>2</sub> , confirming a biological mechanism	Bouwer, E.J., McCarty, P.L. (1983) Appl. Environ. Microbiol. 45, 1286 - 1294.	No type Supporting Biodegradation in water: screening tests. 003
85		水域	加水分解			6 年		2,190	25 °C	7[50 mM phosphate buffer, 1 mM total sulfide]	記載なし		no data	2: reliable with restrictions		experimental result		×		Barbash, J.E., Reinhard, M. (1989) Environ. Sci. Technol. 23, 1349 - 1358.	Exp Other Hydrolysis. 001
86		水域	加水分解			300 年		109,500	15 °C	7[Zero buffer (extrapolate d)]	記載なし		no data	2: reliable with restrictions		experimental result		×		Barbash, J.E., Reinhard, M. (1989) Environ. Sci. Technol. 23, 1349 - 1358.	Exp Other Hydrolysis. 001

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCCl

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
87	水域	加水分解				23 年		8,395	15 °C	7[50 mM phosphate buffer, 1 mM total sulfide]	記載なし		no data	2: reliable with restrictions		experimental result		x		Barbash, J.E., Reinhard, M. (1989) Environ. Sci. Technol. 23, 1349 - 1358.	Exp Other Hydrolysis. 001
	水域	加水分解				64 年		23,360	25 °C	7[Zero buffer (extrapolate d)]	記載なし		no data	2: reliable with restrictions		experimental result		x		Barbash, J.E., Reinhard, M. (1989) Environ. Sci. Technol. 23, 1349 - 1358.	Exp Other Hydrolysis. 001
89 SIDS	水域	生分解 (好気的)				90 %[> 90 (±) % after 20 day(s)]							no data	その他,(2) valid with restrictions	-	その他,other: Laboratory (Microbial Degradation)		x	※物質濃度が0.2-0.3mg/lと低すぎる、また炭素源としてのメタンの存在下であるため不採用	Henson, J.M. et al. (1989); J. Ind. Microbiol. 4, 29 - 35.	p.15;SIDS Dossier p.80
	水域	生分解 (好気的)				18 %[five and ten days, respectively.]							no data	その他,(3) invalid	-	その他,other: Laboratory (BOD)		x	No rates were given anymore for days 15 and 20. Under acclimated conditions no degradation rates were presented	Price, K.S., Waggy, G.T., Conway, R.A. (1974): Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals; J. Water Pollut. Control. Fed. 46, 63-77.	p.15;SIDS Dossier p.78-9
91	水域	生分解 (好気的)				95 %[= 95 (±) % after 35 day(s)]							no data	その他,(2) valid with restrictions	-	その他,other: Laboratory (Biodegradation)		x	※Stucki (1992)の要約によると、DCAを無機化できる2つの純粋な培養物の混合物を使用	Stucki, G. et al. (1992): Water Res. 26, 273 - 278.	p.15;SIDS Dossier p.79
	水域	生分解 (嫌気的)				63 %[= 63 (±) % after 175 day(s)]							no data	その他,(2) valid with restrictions	-	experimental result,other: Laboratory (Microbial Degradation)		x		Bouwer, E.J., McCarty, P.L. (1983): Appl. Environ. Microbiol. 45, 1286 - 1294.	p.15;SIDS Dossier p.8-82

## 基本情報

優先評価化学物質 通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	C#C(Cl)Cl

環境中運命

## 収集データ

	情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタティの該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該非(評価II)	備考	文献	ページ番号等
1	EHC	土壤	揮発					初期濃度の72-74%											x	no degradation was observed	Wilson et al., 1981	4.1 Transport and fate in the environment
2	Howard Deg	土壤	総括分解			2400 時間 [100 days]		100			記載なし		-	-	-	その他 (推定値)	Scientific judgement based upon estimated aqueous aerobic biodegradation half-life.		x		low t1/2: Wilson, et al. (1983A)	p386
3	Howard Deg	土壤	総括分解			4320 時間[6 months]		180			記載なし		-	-	-	その他 (推定値)	Scientific judgement based upon estimated aqueous aerobic biodegradation half-life.		x		high t1/2: Mudder, T (1981)	p386

参考情報

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	CICCCl

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	ATSDR		14 % after 14 day			laboratory experiments using a domestic waste water inoculum 初期濃度 : 5mg/l				experimental result		初期濃度 : 10 mg / lの場合、分解損失（揮発分(10日で27%)補正済）は、7日で15%、14日で30%。	Tabak et al. 1981	p168
			approximately 10%			24-hour incubation at 25 EC under aerobic conditions				experimental result			Vandenbergh and Kunka 1988	p168
		not biodegraded after 35 days	0%			under anaerobic conditions in sediment-water test systems				experimental result			Jafvert and Wolfe 1987	p168
		not biodegraded after 8–16 weeks	0%			bacteria isolated from groundwater				experimental result		but no details on the kinetic experiments used to establish these half-lives were reported	Wilson et al. 1983	p168
			半減期 : 100day			in aerobic water				experimental result			Capel and Larson 1995	p168
			半減期 : 400day			in anaerobic water				experimental result			Capel and Larson 1995	p168
			97% after 6day			using aerobic groundwater microcosms obtained from a Superfund site in California				experimental result				p168
			15–23% after 4 weeks	mineralization to carbon dioxide		under aerobic conditions with an unsaturated calcareous soil						初期濃度 : 100 ppb	Watwood et al. 1991	p169
			3.3–3.4% after 4 weeks	mineralization to carbon dioxide		under anaerobic conditions with an unsaturated calcareous soil						初期濃度 : 100 ppb	Watwood et al. 1991	p169
			100% (over a 2-week)	completely dechlorinated to ethane		by anaerobic microcosms and enrichment cultures derived from river sediment						初期濃度 : 2µmol	Loffler et al. 1997	p169
			半減期 : 約52日			in an anaerobic sediment slurry						A first-order biodegradation rate constant : 0.013 day-1	Peijnenburg et al. 1998	p169
12	EHC		20-63% (7日以内、うち5-27%は揮発による)			static flask study				experimental result		初期濃度 : 5 and 10 mg/l aerobic degradation	Tabak et al., 1981	4.1 Transport and fate in the environment

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	C#C(Cl)Cl

### 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
13			63 % (25 day)			batch experiment under anaerobic conditions			experimental result				Bouwer & McCarty (1983)	4.1 Transport and fate in the environment
			No biodegradation (after 35 days)			in an anoxic sediment-water system						初期濃度 : 1.0 mg/l pH not reported	Jafvert & Wolfe, 1987	4.1 Transport and fate in the environment
15	HSDB		0-7% (5-10days)	BOD		in aerobic systems using sewage seed or activatedsludge							Price KS et al; J Water Pollut Control Fed 46: 63-77 (1974) Heukelekian H, Rand MC; Water Pollut Control Assoc 29: 1040-53 (1955) Stover EL, Kincannon DF; J Water Pollut Control Fed 55: 97-109 (1983)	ENVIRONMENTAL FATE:
16			< 5 ug/l after a 21 day			using microbial consortia enriched from subsurface sediments contaminated with chlorinated hydrocarbons, a mixed-organic waste				bioreactor study	初期濃度 : 21 ug/l		Phelps TJ et al; Environ Sci Technol 25: 1461-5 (1991)	ENVIRONMENTAL BIODEGRADATION: AEROBIC:
17			No degradation occurred after 4 months			in an acclimated anaerobic system							Bouwer EJ, McCarty PL; App Environ Microbiol 45: 1286-94 (1983)	ENVIRONMENTAL BIODEGRADATION: ANAEROBIC:
18			attenuation rate constant : 0.27/yr			vertical profile sampling of monitoring wells on the site					at the West KL Avenue Landfill, Kalamazoo, MI via		Ravi V et al; Bioremed J 2: 239-58 (1998)	ENVIRONMENTAL BIODEGRADATION: ANAEROBIC:
19	IUCLID		< 20 %	other		Type : aerobic Inoculum : sewage/seed or activated sludge			experimental result				ICI Group Environmental Laboratory Report. Ecotoxicology/Physical Chemistry Profile for 1,2-Dichloroethane 2240 Jan 1991.	3.5
20			< 20 %	other: Column Study		Type : aerobic Inoculum : other bacteria: ground water (sandy aquifer solids)			experimental result				Lanzarone, N.A., McCarty, P.L. (1990); Ground Water 28, 910-919	3.5

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	C#C(Cl)Cl

### 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
21		= 30 % after 150 day	other: Laboratory (Biodegradation)		Type : aerobic Inoculum : activated sludge (都市下水処理場の活性汚泥) 初期濃度 : 8.4µg/l				experimental result			Convery, J.J. et al. (1980): Occurrence and removal of toxics in municipal wastewater treatment facilities cited in: Patterson, J.W., Kodukala, P.S. (1981); CEP 77,48 – 55 Hutton, D.G. (1980): Industrial Wastes, 22 (March/April, 1980)cited in: Patterson, J.W., Kodukala, P.S. (1981): CEP 77,48 – 55	3.5
22		= 65 %	other: Laboratory (Biodegradation)		Type : aerobic Inoculum : other bacteria: Mischung von Reinkulturen GJ 10 nach DE 1				experimental result		水温を20、15又は10°Cに徐々に下げても、分解には影響なし。 中性pH、10~30°Cの温度	Stucki, G. et al. (1992): Water Res. 26, 273 – 278	3.5
23		= 95 % after 35 day			Type : aerobic Inoculum : other bacteria: Mischung von Reinkulturen GJ 10 nach DE 1				experimental result		水温を20、15又は10°Cに徐々に下げても、分解には影響なし。 中性pH、10~30°Cの温度	Stucki, G. et al. (1992): Water Res. 26, 273 – 278	3.5
24		= 90 % after 21 day			Type : aerobic Inoculum : other bacteria: (soil as enrichment) 初期濃度 : 200-300 µg/l				experimental result		温度 : 25°C、メタン添加	Henson, J.M. et al. (1989): J. Ind. Microbiol. 4, 29 – 35	3.5
25		> 90 % after 20 day			Type : aerobic Inoculum : other 初期濃度 : 5mg/l				experimental result		初期濃度 : 10 mg/lの場合、分解損失（揮発分補正済）は、7日で15%、14日で30%。	US Department of Health & Human Services.Draft Toxicological Profile for 1,2-dichloroethane Feb 1993.	3.5
26	under test conditions no biodegradation observed	14 % after 14 day			Type : anaerobic Inoculum : Acclimated System				experimental result			ICI Group Environmental Laboratory Report Ecotoxicology/Physical Chemistry Profile for 1,2-Dichloroethane 2240 Jan 1991.	3.5
27		14 % after 14 day			Type : anaerobic Inoculum : other bacteria: methanogen				experimental result			Bouwer, E.J., McCarty, P.L. (1983): Appl. Environ. Microbiol. 45, 1286 – 1294	3.5
28		< 20 % after 4 month										ISIS5, 1996, HASKONING	3.5
29		< 20 % after 4 month										ISIS5, 1996, HASKONING	3.5
30	NITE初期リスク評価書	not readily biodegradable	1% Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result			通商産業省公報1978年12月28日 ; 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報 ( <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用).	p.5

優先評価化学物質_通し番号	11
公示名称	1, 2-ジクロロエタン
CASRN	107-06-2
CA_IN	Ethane, 1,2-dichloro-
SMILES	C#C(Cl)Cl

### 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
31		not readily biodegradable	0%	O <sub>2</sub> consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result			通商産業省公報1978年12月28日：製品評価技術基盤機構化学品質管理情報（ <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用）	p.5
		not readily biodegradable	2%	TOC removal		化審法TG	-	-	-	experimental result			通商産業省公報1978年12月28日：製品評価技術基盤機構化学品質管理情報（ <a href="http://www.nite.go.jp">http://www.nite.go.jp</a> から引用）	p.5
33	SIDS	-	95 %[95 (±) % after 35 day(s)]	-		その他,other: Laboratory (Biodegradation)	no data	その他,(2) valid with restrictions	-	-			Stucki, G. et al. (1992): Water Res. 26, 273 - 278.	p.7;p.15;SIDS Dossier p.79-80
		-	>90 %[> 90 (±) % after 20 day(s)]	-		その他,other: Laboratory (Microbial Degradation)	no data	その他,(2) valid with restrictions	-	-			Henson, J.M. et al. (1989): J. Ind. Microbiol. 4, 29 - 35.	p.7;p.15;SIDS Dossier p.80
35		18 %[Under non-acclimated conditions, degradation rates were 0 and 18% after five and ten days, respectively. No rates were given anymore for days 15 and 20. Under acclimated conditions no degradation rates were presented.]		その他,Biodegradability (% Bio-Oxidation)		その他,other: Laboratory (BOD)	no data	その他,(3) invalid	-	-			Price, K.S., Waggy, G.T., Conway, R.A. (1974): Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals; J. Water Pollut. Control. Fed. 46, 63-77.	p.7;p.15;SIDS Dossier p.78
36		-	63 %[63 (±) % after 175 day(s)]	-		その他,other: Batch Experiment	no data	その他,(2) valid with restrictions	-	experimental result			Bouwer, E.J., McCarty, P.L. (1983): Appl. Environ. Microbiol. 45, 1286 - 1294.	p.7;p.15;SIDS Dossier p.81-82
37	既存点検事業	not readily biodegradable	1.10%	Test mat. analysis			2: reliable with restrictions	key study	experimental result	環保業第5号、薬発第615号、49基局第392号			昭和52年度特定化学品安全対策費補助金に係る安全性試験結果報告書	
		not readily biodegradable	1.60%	TOC removal			2: reliable with restrictions	key study	experimental result	環保業第5号、薬発第615号、49基局第392号			昭和52年度特定化学品安全対策費補助金に係る安全性試験結果報告書	
38	既存点検事業	not readily biodegradable	0%	O <sub>2</sub> consumption			2: reliable with restrictions	key study	experimental result	環保業第5号、薬発第615号、49基局第392号			昭和52年度特定化学品安全対策費補助金に係る安全性試験結果報告書	
39	既存点検事業	not readily biodegradable											昭和52年度特定化学品安全対策費補助金に係る安全性試験結果報告書	