

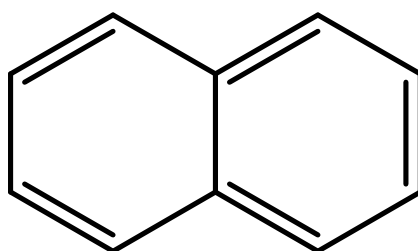
1  
2  
3  
4  
5 優先評価化学物質のリスク評価(一次)

6 生態影響に係る評価 II

7 物理化学的性状等の詳細資料

8  
9  
10 ナフタレン

11 優先評価化学物質通し番号 76



16  
17  
18  
19  
20  
21  
22  
23 平成 28 年 6 月

24  
25 経済産業省

## 目 次

|   |                        |    |
|---|------------------------|----|
| 1 |                        |    |
| 2 | 1 評価対象物質の性状 .....      | 1  |
| 3 | 1-1 物理化学的性状及び濃縮性 ..... | 1  |
| 4 | 1-2 分解性 .....          | 5  |
| 5 | 2 【付属資料】 .....         | 9  |
| 6 | 2-1 物理化学的性状等一覧 .....   | 9  |
| 7 | 2-2 その他 .....          | 10 |
| 8 |                        |    |
| 9 |                        |    |

# 1 評価対象物質の性状

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

## 1-1 物理化学的性状及び濃縮性

表 1-1 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ<sup>1)</sup>

| 項目                        | 単位                     | 採用値                         | 詳細                       | 評価Iで用いた値(参考)          |
|---------------------------|------------------------|-----------------------------|--------------------------|-----------------------|
| 分子量                       | —                      | 128.2                       | —                        | 128.2                 |
| 融点                        | ℃                      | 80.2 <sup>5,7,8,9)</sup>    | 信頼性の定まった情報源からの4つの値の算術平均値 | 79.6 <sup>2)</sup>    |
| 沸点                        | ℃                      | 218 <sup>2,3,5,7,8,9)</sup> | 信頼性の定まった情報源からの6つの値の算術平均値 | 218.1 <sup>2,3)</sup> |
| 蒸気圧                       | Pa                     | 7.9 <sup>5)</sup>           | 信頼性の定まった情報源からの3つの値の算術平均値 | 7.3 <sup>2)</sup>     |
| 水に対する溶解度                  | mg/L                   | 29.6 <sup>7,9)</sup>        | 信頼性の定まった情報源からの9つの値の算術平均値 | 29.6 <sup>2)</sup>    |
| 1-オクタールと水との間の分配係数(logPow) | —                      | 3.5 <sup>3,7)</sup>         | 信頼性の定まった情報源からの4つの値の算術平均値 | 3.34 <sup>3)</sup>    |
| ヘンリー係数                    | Pa·m <sup>3</sup> /mol | 46 <sup>4,5,10,11)</sup>    | 信頼性の定まった情報源からの5つの値の算術平均値 | 45.8 <sup>4,5)</sup>  |
| 有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)         | L/kg                   | 870 <sup>2,5,7)</sup>       | 信頼性の定まった情報源からの22の値の算術平均値 | 977.5 <sup>5)</sup>   |
| 生物濃縮係数(BCF)               | L/kg                   | 115.13 <sup>6)</sup>        | 信頼性の定まった情報源からの3つの値の算術平均値 | 115.13 <sup>6)</sup>  |
| 生物蓄積係数(BMF)               | —                      | 1                           | logPow と BCF から設定        | 1                     |
| 解離定数(pKa)                 | —                      | —                           | 解離基を有しない                 | — <sup>12)</sup>      |

1) 平成 27 年度第 3 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議（平成 27 年 11 月 4 日）で了承された値

2) ECHA

3) IUCLID(2000)

4) ATSDR(2005)

5) Mackay(2006)

6) MITI(1979)

7) EU(2003)

8) Merck(2006)

9) CCD(2007)

10) HSDB

11) CRC(2009)

12) 評価 I においては解離定数は考慮しない

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

### ①融点

評価 I で用いたデータは、ECHA のキースタディで、OECD TG 102 準拠で試験を行った reliability (1) (reliable without restriction、以下同じ) の 2 つのデータの算術平均値(79.6 °C)を用いた。しかし、このデータは EU (2003)に「工業用ナフタレン (純度 95 %以上)」を用いた

1 と記されており、純粋なナフタレンの試験ではなかったため除外する。

2  他の信頼性の定まった情報源（「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性  
3 データの信頼性評価等について」の「3.1 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報源。  
4 以下同じ。）より、80.2 °C (Merck, MOE, HSDB)、80.2 °C~80.3 °C (EU 2003)、80.26 °C  
5 (Mackay 2006)、80.2°C (CCD)等得られた。ここで、EU (2003)のデータは範囲での値であるの  
6 で、範囲の中央の値である 80.25 °Cと見なす。評価Ⅱではこの 4 つのデータの算術平均値  
7 (80.2 °C)を用いる。

#### 8 9 ②沸点

10  評価Ⅰで用いたデータは、ECHA のキースタディで、OECD TG 103 準拠で試験を行った  
11 reliability (1)のデータ及び Directive 84/449/EEC 準拠で試験を行った IUCLID のデータであり、  
12 その 2 つのデータの算術平均値 (218.1 °C)を用いた。

13  他の信頼性の定まった情報源より、217.9 °C (Merck, MOE, HSDB)、217.9 °C~218 °C(EU  
14 2003)、217.9 °C (Mackay 2006)、217.96 °C (CCD)等得られた。ここで、EU (2003)のデータは  
15 範囲での値であるので、範囲の中央の値である 217.95 °Cと見なす。評価Ⅱでは評価Ⅰのデ  
16 ータ及びこの 4 つのデータを含めた 6 つのデータの算術平均値(218 °C)を用いる。

#### 17 18 ③蒸気圧

19  評価Ⅰで用いたデータは ECHA のキースタディで、reliability (2) (reliable with restrictions、  
20 以下同じ)の測定温度が 20 °C及び 25 °Cの 2 つのデータである。このため、25 °Cのデータを  
21 20 °Cに補正し、その算術平均値 (7.3 Pa)を用いた。このデータを精査した結果、この 2 つの  
22 データは同一の参考文献の異なる温度のデータを使用しており、EU (2003),Mackay (2006)も  
23 同じ文献を引用していた。更に元文献を精査した結果、測定温度は 20.69 °C (293.83 K)と  
24 24.27 °C (297.4 K)の値であることが判明し、20 °Cの値ではなかった。

25  他の信頼性の定まった情報源より、測定温度が 20°Cのデータの蒸気圧の値は、6.53 Pa  
26 (Mackay 2006), 8.533 Pa (Mackay 2006)、8.64 Pa (Mackay 2006)、48.37 Pa (Mackay 2006)が得ら  
27 れた。横並びを見て明らかに 48.37 Pa のデータは外れているため、評価Ⅱではそれを除いた  
28 3 つのデータの算術平均値(7.9 Pa)を用いる。

#### 29 30 ④水に対する溶解度

31  評価Ⅰで用いたデータは ECHA のキースタディで、測定温度 25 °C、OECD TG 105 で試験  
32 を行った reliability (2)のデータを 20 °Cに補正した値 (29.6 mg/L)を用いた。なお、Mackay  
33 (2006), EHC も同じ文献を引用していた。

34  他の信頼性の定まった情報源より、30.1 mg/L (Mackay 2006, EHC, Physprop)、28.0 mg/L (EU  
35 2003, Mackay 2006)（測定温度が 20 °Cのデータはなかったため、データをそれぞれ 20 °Cに  
36 補正した）等得られた。ここで、30.1 mg/L のデータについて元文献を精査したところ、12  
37 個のデータから外れ値 4 個を除いた 8 個のデータの平均値であり、それらは以下の値となっ  
38 ていた;31.7 mg/L, 31.8 mg/L（値が異なるが評価Ⅰのデータと同じ引用、ただし元文献を精査

1 したところ 31.7 mg/L と記してあったのでこの値を採用する), 31.3 mg/L, 30.2 mg/L, 34.5 mg/L,  
2 31.5 mg/L, 33.5 mg/L, 31.1 mg/L (全て測定温度は 25°C である)。評価Ⅱではこれら 8 つの値を  
3 20 °C に補正した値と 28.0 mg/L (EU 2003, Mackay 2006) の算術平均値 (29.6 mg/L) を用いる。

#### 5 ⑤logPow

6 評価Ⅰで用いたデータは IUCLID で、OECD TG 107 で試験を行った 2 つのデータの算術平  
7 均値 (3.34) を用いた。

8 他の信頼性の定まった情報源より、3.7 (EU 2003, Mackay 2006), 3.4 (試験は OECD TG 107  
9 準拠・EU 2003, ECHA) 等得られた。評価Ⅱでは評価Ⅰのデータ及びこの 2 つのデータを合わ  
10 せた 4 つのデータの算術平均値 (3.5) を用いる。

#### 12 ⑥ヘンリー係数

13 評価Ⅰで用いたデータは ATSDR 及び Mackay の 2 つのデータの算術平均値 (45.8 Pa·  
14 m<sup>3</sup>/mol) を用いた。

15 他の信頼性の定まった情報源より、48.1 Pa·m<sup>3</sup>/mol (Mackay 2006)、44.6 Pa·m<sup>3</sup>/mol (Mackay  
16 2006, PhysProp, HSDB)、43 Pa·m<sup>3</sup>/mol (CRC) 等得られた。

17 評価Ⅱでは評価Ⅰのデータ及びこの 2 つのデータを含めた 5 つのデータの算術平均値 (46 Pa·  
18 m<sup>3</sup>/mol) を用いる。

#### 20 ⑦Koc

21 評価Ⅰで用いたデータは Mackay の土壌条件が底質及び 1.6 % の有機炭素を含む土壌の 2 つ  
22 のデータの算術平均値 (977.5 L/kg) を用いた。ただし、1.6 % の有機炭素を含むデータは 50 °C  
23 のデータであった。

24 他の信頼性の定まった情報源より、多くの土壌でのデータが得られたため、それらの情報  
25 源の中で、測定値であって有機炭素含有率 (以下、OC と略す) が明記されている土壌のデ  
26 ータであり、さらに試験温度が 20 °C 付近のデータの算術平均値を用いる。以上の条件で得  
27 られたデータは、3162 L/kg (OC 0.69 %)、26915 L/kg (OC 2.24 %)、1622 L/kg (OC 1.12 %)、  
28 1288 L/kg (OC 0.76 %)、1445 L/kg (OC 1.11 %) (Mackay 2006, EU 2003)、589 L/kg (OC 1.4 %)、  
29 1950 L/kg (OC 0.74 %)、302 L/kg (OC 1.4 %)、288 L/kg (OC 3.2 %)、339 L/kg (OC 1.4 %)、  
30 316 L/kg (OC 3.4 %)、331 L/kg (OC 1.5 %)、407 L/kg (OC 1.26 %)、427 L/kg (OC 2.9 %)、479  
31 L/kg (OC 1.8 %)、589 L/kg (OC 1.49 %)、575 L/kg (OC 1.08 %)、537 L/kg (OC 10.4 %)、1000  
32 L/kg (OC 0.11%)、398 L/kg (OC 1.2 %) (Mackay 2006)、664 L/kg (OC 1.1 %) (ECHA)、989 L/kg  
33 (OC 0.18 %) (EU 2003) である。ここで、データの横並びから明らかに 26915 L/kg (OC 2.24 %)  
34 のデータが外れているため除外する。また、評価Ⅰで用いた 2 つのデータは、1 つは底質の  
35 データであることから除外、もう 1 つのデータは同文献で測定温度 25 °C のデータ 1445 L/kg  
36 (OC 1.6 %) (Mackay 2006) を用いる。

37 よって、評価Ⅱではこれら 22 のデータの算術平均値 (870 L/kg) を用いる。

1 ⑧BCF

2 評価Ⅰで用いたデータは、化審法 TG で試験を行った既存点検事業に記載された測定値で  
3 ある。この試験においては定常状態での BCF が算出されていないため、各濃度区の後半 3 回  
4 の測定値の算術平均値のうち、最大値 (115.13 L/kg)を用いた。 評価Ⅱにおいてもこの値を  
5 用いる。

6

7 ⑨BMF

8 評価Ⅰでは logPow と BCF の値から化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価  
9 の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。) に従って設定した値 (1) を用いた。  
10 信頼性の定まった情報源に測定値はないため、評価Ⅱにおいてもこの値 (1) を用いる。

11

1 1-2 分解性

2 表 1-2 にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

3  
4

表 1-2 分解に係るデータのまとめ<sup>1)</sup>

| 項目 |               | 半減期<br>(日)  | 詳細  |   |
|----|---------------|-------------|---|---|
| 大気 | 大気における総括分解半減期 |             | NA  |   |
|    | 機序別の半減期       | OH ラジカルとの反応 | 0.66<br>21℃での反応速度定数の測定値 <sup>2,3,4)</sup> から OH ラジカル濃度 $5 \times 10^5$ molecule/cm <sup>3</sup> として算出 |   |
|    |               | オゾンとの反応     | -   | 反応はととも遅く、無視して良い <sup>5)</sup>   |
|    |               | 硝酸ラジカルとの反応  | 5.2   | 25℃での反応速度定数の測定値 <sup>4)</sup> から硝酸ラジカル濃度 $2.4 \times 10^8$ molecule/cm <sup>3</sup> として算出 |
| 水中 | 水中における総括分解半減期 |             | NA  |   |
|    | 機序別の半減期       | 生分解         | 24<br>密閉系の試験で、汚染されていない川の表層水を用いたデータ <sup>3)</sup>  |   |
|    |               | 加水分解        | -   | 加水分解を受ける基を有していないとされている <sup>2,3)</sup>  |
|    |               | 光分解         | 72  | 純水に直射日光を当てたデータを一次速度論に基づいて計算した値を水中での光透過率等を考慮し補正した値 <sup>2)</sup>                           |
| 土壌 | 土壌における総括分解半減期 |             | 50<br>信頼性のある文献に基づく半減期 <sup>3)</sup>   |   |
|    | 機序別の半減期       | 生分解         | 18<br><sup>14</sup> C ラベルでの実験で、実験温度 10℃でのデータ <sup>5)</sup>  |   |
|    |               | 加水分解        | -   | 水中加水分解の項参照 <sup>2,3)</sup>  |
| 底質 | 底質における総括分解半減期 |             | 88<br>汚染されていない底質でのデータ <sup>3)</sup>   |   |
|    | 機序別の半減期       | 生分解         | 72<br>微生物を含む汚染されていない底質でのデータ <sup>3)</sup>   |   |
|    |               | 加水分解        | -   | 水中加水分解の項参照 <sup>2,3)</sup>  |

5 1) 平成 27 年度第 3 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレ  
6 ビュー会議（平成 27 年 11 月 4 日）で了承された値

7 2) EU(2003)

8 3) Mackay(2006)

9 4) NIST

10 5) HSDB

11 NA:情報が得られなかったことを示す

12 -:無視できると考えられることを示す

13

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

16

17 ①大気

18 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が、機序別の半減期に関する情  
19 報が得られた。

20 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

21 OH ラジカルとの反応の半減期について、信頼性の定まった情報源で、最も測定値が 20℃

1 に近かった NIST, Mackay (2006)及び EU (2003)に記載されている測定温度 21 °C (294 K)で行  
2 った大気中 OH ラジカル反応速度定数データ ( $2.42 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ )を半減期算出に採  
3 用した。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスより  $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半  
4 減期は 0.66 日と算出される。

5 よって、評価Ⅱでは、OH ラジカルとの反応の半減期は 0.66 日を採用する。

#### 6 ①-2 オゾンとの反応の半減期

7 オゾンとの反応の半減期について、信頼性の定まった情報源より、「反応がとても遅く無視  
8 して良い」(HSDB)と記されており、オゾンとの反応は他の機序と比べて無視できると考え  
9 られる。

10 なお、参考情報までに、他の信頼性の定まった情報源から、測定値が 20 °C に近かった NIST  
11 に記載されている測定温度 21 °C (294 K)で行った大気中オゾン反応速度定数データ ( $2.01$   
12  $\times 10^{-19} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ )が得られた。大気中オゾン濃度を技術ガイダンスより  $7 \times 10^{11}$   
13  $\text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半減期は 57 日と算出される。

#### 14 ①-3 硝酸ラジカルとの反応の半減期

15 硝酸ラジカルとの反応の半減期について、信頼性の定まった情報源では、NIST では大気中  
16 硝酸ラジカル反応速度定数は  $2.0 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  (25 °C)、HSDB には  $6.4 \times 10^{-15}$   
17  $\text{ cm}^3/\text{molecule/s}$  (測定温度 25 °C)が得られた。ここで、NIST (2013)のデータは推計値であるの  
18 で、HSDB のデータを採用し、技術ガイダンスより、大気中硝酸ラジカル濃度を  $2.4 \times 10^8$   
19  $\text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半減期は 5.2 日と算出される。

20 よって、評価Ⅱでは、硝酸ラジカルとの反応の半減期は 5.2 日を採用する。

21

#### 22 ②水中

23 総括分解半減期について、有効な半減期情報は得られなかったが、機序別の半減期に関する  
24 情報が得られた。

25 なお、信頼性の定まった情報源では、2.3 日 (モニタリングデータを元にしたライン川の  
26 データ・Mackay 2006, Howard 1989) が得られた。この文献を精査したところ、「ライン川の上  
27 流側と下流側の 2 定点で、水の流れを考慮し時間差をおいてとった水から半減期を計算した」  
28 と記されていた。ここで、分解の理由の項目に、「川のデータ (本データ) が参考にした他の  
29 池や地下水のデータと比べて半減期が速いのは、好気性生分解や揮発が関与している」と記  
30 されており、揮発による消失も含まれていると考えられるので、このデータは用いない。

#### 31 ②-1 生分解の半減期

32 生分解の半減期について、信頼性の定まった情報源では、0.5-20 日 (Howard 1991, Mackay  
33 2006)、20 日 (河口水のデータ・Mackay 2006)、39 日、53 日 (順化した微生物及び栄養物が  
34 河川にある時のデータ、順化した微生物のみが河川にある時のデータ・Mackay 2006)、7 日、  
35 24 日 (密閉系で行われた試験で、【Cooper Riber (クーパー川) で付近に重油貯蔵タンクがあ  
36 る場所、汚染されていない川】の表層水を用いたデータ・Mackay 2006)、0.5 日 (油で汚染さ  
37 れた小川のデータ・Mackay 2006)、0.375 日 (Mackay 2006) 等が得られた。

38 よって、評価Ⅱではこれらのデータの中で、揮発が関与していない密閉系の試験と明記され



1 ているデータで、最も半減期の長い 24 日を用いる。

2 なお、MITI (1977)には、OECD TG 302C に準拠した試験を行った結果、BOD 分解度が 2 %  
3 であったと記されていた。

#### 4 ②-2 加水分解の半減期

5 EU (2003)及び Mackay (2006)において加水分解を受ける基を有していないとされている。

#### 6 ②-3 光分解の半減期

7 光分解の半減期について、信頼性の定まった情報源では、2.0 日、6.1 日、14 日 (US OPPTS  
8 に基づいて行った試験. 異なる三つの水域—底質システム (腐食栄養型の池 Louisiana (Cross  
9 Lake, XL), 貧栄養型の採石場の池 Indiana (Indiana Quarry, IQ), 純水) を直射日光に当て、一  
10 次速度論で補正したデータ・EU 2003)、3.0 日 (自然水に 450W の中圧水銀灯を照射したデー  
11 タを北緯 40°での夏至の正午の日射光に補正したデータ・EU 2003,Howard 1989, HSDB,  
12 Mackay 2006)、1.0 日 (蒸留水に高圧水銀灯を連続照射したデータ・EU 2003, Mackay 2006)  
13 等得られた。この中で、2.0 日、6.1 日、14 日 (EU 2003)のデータは太陽光を使用している  
14 が、このうち 2.0 日、6.1 日のデータは純水のデータ (14 日)より短く、間接光分解と直接光  
15 分解の寄与も考えられる。評価Ⅱでは 14 日の純水のデータを自然水での値に補正するため、  
16 水中での光透過率等を考慮し、NIST-2 に記載されているナフタレンのモル吸光スペクトルを  
17 用いて Zepp, R.G. and Cline D.M. (1977)に基づき補正した値である 72 日を用いる。

18

#### 19 ③土壌

20 総括分解半減期について、信頼性の定まった情報源では、16.6-48 日 (Howard 1991, Mackay  
21 2006)、108 日 (廃棄場の土・Mackay 2006)、12 日 (Mackay 2006)、50 日 (Mackay 2006)、767  
22 日 (Luddington での下水汚泥 (PH 5.8)のデータ・Mackay 2006) が得られた。ここで、767 日  
23 のデータはモニタリングデータを元にした推計値であるため除外し、また、108 日のデータ  
24 も廃棄場の土であるため除外し、得られたデータ及び後述する機序別の半減期を参考にして  
25 50 日を用いる。

#### 26 ③-1 生分解の半減期

27 生分解半減期について、信頼性の定まった情報源では、2.1 日、2.2 日 (Kidman 砂質ロー  
28 ム土壌、McLaulin 砂質ローム土壌のデータ・Mackay 2006)、2 日 (EU2003)、11-18 日 (<sup>14</sup>C ラ  
29 ベルでの実験で、実験温度を 10 °Cとしたときの 3 つのデータ・HSDB, EU 2003)が得られた。  
30 また、Mackay 2006 と EU 2003 は同じ文献を引用していた。よって、半減期が一番長い 18 日  
31 を用いる。

#### 32 ③-2 加水分解の半減期

33 EU (2003) 及び Mackay (2006)において加水分解を受ける基を有していないとされている。

34

#### 35 ④底質

36 総括分解半減期について、信頼性の定まった情報源では、0.2 日、88 日 (汚染された底質、  
37 汚染されていない底質でのデータ・Mackay 2006, Howard 1989, HSDB)、78 日 (汚染されてい  
38 ない池での底質でのデータ・HSDB, Howard 1989)、9 日 (付近で石炭を排出している底質で

1 のデータ・Howard 1989) 等得られた。得られたデータ及び後述する機序別の半減期を参考に  
2 して 88 日を用いる。

#### 3 ④-1 生分解の半減期

4 生分解半減期について、信頼性の定まった情報源では、0.2 日、72 日（石油炭化水素類に  
5 より汚染された底質、汚染されていない底質でのデータ・Mackay 2006）であった。半減期が  
6 一番長い 72 日を用いる。

7 なお好気性生分解のデータは、16.8-30.8 日（<sup>14</sup>C ラベルでの実験で、好気性分解条件下で、  
8 実験温度は 22°C。結果は 3 種類のデータの範囲のもの・EU 2003, HSDB, Howard 1989）が得  
9 られた。嫌気性生分解のデータは、「<sup>14</sup>C ラベルでの実験で、嫌気性の細菌（活性種のみ）が  
10 存在する条件下でナフタレンの分解が確認できなかった（EU 2003）」、「98 日実験したが実験  
11 中目立った還元が示されなかった（EU 2003）」とあり、嫌気性生分解については分解しない  
12 と考えられる。

#### 13 ④-2 加水分解の半減期

14 EU (2003)及び Mackay (2006)において加水分解を受ける基を有していないとされている。

15

16

## 1 2 【付属資料】

### 2 2-1 物理化学的性状等一覽

3 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

4  
5 出典)

6  
7 ATSDR(2005): Agency for Toxic Substances and Disease Registry. “Toxicological Profile for  
8 naphthalene, 1-methylnaphthalene, and 2-methylnaphthalene”, Toxicological Profiles. 2005.

9 CCD(2007): Lewis, R. J. Hawley’s Condensed Chemical Dictionary 15th ed., John Wiley & Sons, Inc.  
10 2007.

11 CRC(2003): Lide, D. R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 84th ed., CRC Press, 2003–  
12 2004. .

13 CRC(2009): Lide, D. R., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 90th ed., CRC Press, 2009–  
14 2010. .

15 CRC(2013): Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 94th ed., CRC Press,  
16 2013-2014. .

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

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

20 EHC(1983): International Program of Chemical Safety (IPCS). “Selected non-heterocyclic polycyclic  
21 aromatic hydrocarbons”, Environmental Health Criteria. No. 202. 1983.

22 <http://www.inchem.org/documents/ehc/ehc/ehc202.htm> .

23 EU(2003): European Union, Institute for Health and Consumer Protection. Risk Assessment Report  
24 (EU-RAR), naphthalene. 1st Priority List, vol.33, 2003.

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

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

29 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank.

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

31 IUCLID(2000): EU ECB. IUCLID Dataset, naphthalene. 2000.

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

34 Merck(2006): The Merck Index. 14th ed.

- 1 MHLW, METI, MOE(2014): 化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイ  
2 ダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.
- 3 MITI(1975): MITI. ナフタリン(被験物質番号 K-58) の分解度試験成績報告書. 既存化学物質  
4 点検, 1975.
- 5 MITI(1977): MITI. ナフタリン(被験物質番号 K-58) の分解度試験成績報告書. 既存化学物質  
6 点検, 1977.
- 7 MITI(1977): MITI. ナフタリン(被験物質番号 K-58) の分解度試験成績報告書. 既存化学物質  
8 点検, 1977.
- 9 MITI(1979): MITI. ナフタリン(被験物質番号 K-58) の濃縮度試験成績報告書. 既存化学物質  
10 点検, 1979.
- 11 MOE(2010): MOE. 化学物質の環境リスク評価 第8巻, ナフタレン. 2010.
- 12 NIST: NIST. Chemistry WebBook. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>, (2015-10-02 閲覧).
- 13 NIST-2: NIST Chemistry WebBook, Naphthalene, UV/Visible spectrum.  
14 <http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C91203&Units=SI&Mask=400#UV-Vis-Spec>  
15 (2015-10-02 閲覧).
- 16 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2015-10-02 閲覧).
- 17 Zepp, R. G., & Cline, D. M. (1977). Rates of direct photolysis in aquatic environment. Environmental  
18 Science & Technology, 11(4), 359-366.
- 19
- 20 **2-2 その他**
- 21 特になし。

| 情報源略称        | 詳細等   |
|--------------|---|
| Aldrich      | Sigma-Aldrich試薬カタログ   |
| ATSDR        | ATSDR(米国毒性物質疾病登録局):「Toxicological Profile」  |
| CCD          | Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007                                 |
| CICAD        | WHO/IPCS:「国際簡潔評価文書(CICAD)」  |
| CRC          | CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, Version 2013, CRC-Press                                 |
| EHC          | WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」  |
| EPI Suite    | U.S.EPA EPI Suite   |
| EURAR        | EU ECB(European Chemicals Bureau):「リスク評価書(EU Risk Assessment Report)」                                 |
| HSDB         | Hazardous Substances Data Bank (HSDB)   |
| IUPAC        | The IUPAC Solubility Data Series  |
| JCP          | Japanチャレンジプログラム   |
| Lange        | Lange's Handbook of Chemistry, McGraw-Hill, 2005  |
| Mackay       | Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Second Edition |
| Merck        | The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006  |
| MOE初期評価      | 環境省環境リスク評価室:「化学物質の環境リスク評価」  |
| NITE初期リスク評価書 | (独)製品評価技術基盤機構:「化学物質の初期リスク評価書」   |
| NITE有害性評価書   | (財)化学物質評価研究機構・(独)製品評価技術基盤機構:「化学物質有害性評価書」  |
| PhysProp     | SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009  |
| SIDS         | OECD: SIDSレポート  |
| SPARC        | SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry   |
| USHPV        | US/HPVチャレンジプログラム  |
| 既存点検事業       | 化審法既存点検事業の試験結果  |

基本情報

|        |         |
|--------|---------|
| 優先通し番号 | 76      |
| 物質名称   | ナフタレン   |
| CAS番号  | 91-20-3 |

融点

収集データ

| 情報源名        | 項目  | 値                     | 統一表記<br>[°C] | 試験方法等   | GLP     | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキースタ<br>ディー | 備考                                     | 文献   | ページ番号等  |
|-------------|-----|-----------------------|--------------|---------|---------|-------------|--------------------------|--------|---------|------------|-------------------------|--|--|---|
| 1 Aldrich   | 融点  | 80~82 °C              | 81           |         |         |             |                          |        |         | 2B         | ×                       |  |  | p.1879  |
| 2 ATSDR     | 融点  | 80.5 °C               | 80.5         | -       | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                       | CRC1985から引用                            | Weast RC, Astle MJ, Beyer WH, eds. 1985. CRC handbook of chemistry and physics: A readyreference book of chemical and physical data. Boca Raton, FL: CRC Press, Inc., C-357, C-361..   | p.161   |
| 3 CCD       | 融点  | 80.2 °C               | 80.2         | -       | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ○                       |  |  | Naphthalene   |
| 4 CRC       | 融点  | 80.22 °C[80.22(0.09)] | 80.22        | -       | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                       |  | Frenkel, M., Chirico, R. D., Diky, V. V., Kazakov, A., and Muzny, C.D., ThermoData Engine, NIST Standard Reference Database 103b, Version 5.0 (Pure Compounds, Binary Mixtures, and Chemical Reactions, TDE-SOURCE Version 5.1), National Institute of Standard. | Physical Constants of Organic Compounds (Section 3) |
| 5 EHC       | 融点  | 81 °C                 | 81           | -       | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                       |  | Karcher W, Fordham R, Dubois JJ, Glaude PGJM, & Lighthart JAM (1985) Spectral atlas of polycyclic aromatic compounds including data on occurrence and biological activity. Dordrecht, D Reichel Publishing Co., 818 pp..   | 2.2 Physical and chemical properties Table 4        |
| 6 EPI Suite | 融点  | 5.01 °C               | 5.01         | MPBPWIN |         |             |                          | (Q)SAR |         | 2C         | ×                       |  |  |   |
| 7 HSDB      | 融点  | 80.2 °C               | 80.2         |         |         |             |                          |        |         | 2B         | ×                       | Merckからの引用                             | O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 1142  | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:      |
| 8 IUCLID    | 融点  | 77~82 °C              | 79.5         |         |         |             |                          |        |         | 4A         | ×                       |  |  | p.11  |
| 9           | 凝固点 | 78 °C以上               | 78           |         | no data |             |                          |        |         | 4A         | ×                       | Naphthalene 78                         |  | p.11  |
| 10          | 凝固点 | 80 °C以上               | 80           |         | no      |             |                          |        |         | 4A         | ×                       | Naphthalene pure                       |  | p.11  |
| 11 Mackay   | 融点  | 80.26 °C              | 80.26        | -       | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ○                       | CRC2003からの引用                           | Lide(2003)   | p.623   |
| 12 Merck    | 融点  | 80.2 °C               | 80.2         | -       | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ○                       | Sublimes appreciably at temps above mp |  | Monograph Number: 0006370                           |
| 13 MOE初期評価  | 融点  | 80.2 °C               | 80.2         | -       | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                       | Merckからの引用                             | O'Neil, M.J. (2001): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition. Merck Co Inc..  | p.1   |
| 14          | 融点  | 80.26 °C              | 80.26        | -       | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                       | CRC2006からの引用                           | Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM)..   | p.1   |
| 15          | 融点  | 80.2 °C               | 80.2         | -       | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                       | Merckからの引用                             | O'Neil, M.J. ed. (2006): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 14th Edition, Whitehouse Station, Merck and Co., Inc. (CD-ROM)..  | p.1   |

基本情報

|        |         |
|--------|---------|
| 優先通し番号 | 76      |
| 物質名称   | ナフタレン   |
| CAS番号  | 91-20-3 |

融点

収集データ

| 情報源名 | 項目            | 値        | 統一表記<br>[°C]                          | 試験方法等 | GLP         | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>該非              | 値の種類      | 値の種類の詳細                | 信頼性ラ<br>ンク | 評価Ⅱにお<br>けるキースタ<br>ディー | 備考               | 文献  | ページ番号等   |
|------|---------------|----------|---------------------------------------|-------|-------------|-------------|---------------------------------------|-----------|------------------------|------------|------------------------|------------------|---|--|
| 16   | 融点            | 80.29 °C | 80.29                                 | -     | -           | -           | -                                     | -         | -                      | 2B         | ×                      | -                | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 108.. | p.1  |
| 17   | PhysProp      | 融点       | 80.2 °C                               | 80.2  | -           | -           | -                                     | -         | -                      | 2B         | ×                      | -                | -   | p.1  |
| 18   | REACH登録<br>情報 | 融点       | 80.3 °<br>C[pure<br>naphthalen<br>el] | 80.3  | OECD TG 102 | no          | 1: reliable<br>without<br>restriction | key study | experimental<br>result | 1B         | ×                      | Naphthalene pure | その他(2008)   | Exp Key Melting<br>point/freezing<br>point.001 |
| 19   |               | 融点       | 78.9 °C                               | 78.9  | OECD TG 102 | no          | 1: reliable<br>without<br>restriction | key study | experimental<br>result | 1B         | ×                      |                  |   | Exp Key Melting<br>point/freezing<br>point.001 |
| 20   | SIDS          | 融点       | 80.2~80.3<br>°C                       | 80.25 |             |             |                                       | key study |                        | 2A         | ○                      | Naphthalene pure | McCullough et al.(1957), Zwolinski(1986)  | p.8, 13  |
| 21   | 既存点検事<br>業    | 融点       | 80.3 °C                               | 80.3  | -           | -           | -                                     | -         | -                      | 4A         | ×                      | -                | 提示資料.   | K0058  |
| 22   |               | 融点       | 80.3 °C                               | 80.3  | -           | -           | -                                     | -         | -                      | 4A         | ×                      | -                | 提示資料.   | K0058  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

沸点

収集データ

| 情報源名        | 沸点                 | 統一表記<br>[°C] | 101.325 kPa<br>における沸<br>点[°C] | 測定条件<br>圧力  | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキース<br>タディー | 備考           | 文献   | ページ番号等  |
|-------------|--------------------|--------------|-------------------------------|-------------|--|-----|-------------|--------------------------|--------|---------|------------|-------------------------|--------------|--|---|
| 1 Aldrich   | 218 °C             | 218          |                               |             |  |     |             |                          |        |         | 4A         | ×                       |              |  | p.1879  |
| 2 ATSDR     | 218 °C             | 218          |                               |             | -  | -   | -           | -                        | -      |         | 4A         | ×                       |              | Sax NI, Lewis RJ. 1989. Dangerous properties of industrial materials. 7th ed. New York, NY: Van Nostrand Reinhold Company, 2341-2342, 2451-2452..  | p.161   |
| 3 CCD       | 217.96 °C          | 217.96       | 217.96                        | 760 mmHg    | -  | -   | -           | -                        | -      |         | 2B         | ○                       |              |  | Naphthalene   |
| 4 CRC       | 218 °C[218.0(0.1)] | 218          | 218                           | 760 mmHg    | -  | -   | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                       |              | Frenkel, M., Chirico, R. D., Diky, V. V., Kazakov, A., and Muzny, C. D., ThermoData Engine, NIST Standard Reference Database 103b, Version 5.0 (Pure Compounds, Binary Mixtures, and Chemical Reactions, TDE-SOURCE Version 5.1), National Institute of Standar. | Physical Constants of Organic Compounds (Section 3) |
| 5           | 217.9 °C           | 217.9        |                               |             | -  | -   | -           | -                        | -      |         | 4A         | ×                       |              |  | Flammability of Chemical Substances (Section 16)    |
| 6 EHC       | 217.9 °C           | 217.9        |                               |             | -  | -   | -           | -                        | -      |         | 4A         | ×                       |              |  | 2.2 Physical and chemical properties Table 4        |
| 7 EPI Suite | 231.64 °C          | 231.64       |                               |             | MPBPWIN  |     |             |                          | (Q)SAR |         | 2C         | ×                       |              |  |   |
| 8 HSDB      | 217.9 °C           | 217.9        | 217.9                         | 760 mmHg    |  |     |             |                          |        |         | 2B         | ×                       | Merckからの引用   |  | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:      |
| 9 IUCLID    | 217.9 °C           | 217.9        | 217.911                       | 1013 hPa    | EU Method A.2, Directive 84/449/EEC, A.2 "Boiling point/boiling range" | no  |             |                          |        |         | 1B         | ×                       |              | Naphthalene pure   | p.11  |
| 10          | 218 °C             | 218          | 218.0111                      | 1013 hPa    | EU Method A.2, Directive 84/449/EEC, A.2 "Boiling point/boiling range" | no  |             |                          |        |         | 1B         | ○                       |              | Naphthalene pure   | p.11  |
| 11          | 218 °C             | 218          |                               | 760[単位記載なし] |  |     |             |                          |        |         | 4A         | ×                       |              |  | p.11  |
| 12 Mackay   | 217.9 °C           | 217.9        |                               |             | -  | -   | -           | -                        | -      |         | 4A         | ○                       | CRC2003からの引用 | Lide(2003)   | p.623   |
| 13 Merck    | 217.9 °C           | 217.9        | 217.9                         | 760 mmHg    | -  | -   | -           | -                        | -      |         | 2B         | ○                       |              |  | Monograph Number: 0006370                           |
| 14          | 193.2 °C           | 193.2        | 213.3447                      | 400 mmHg    | -  | -   | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                       |              |  | Monograph Number: 0006370                           |
| 15          | 167.7 °C           | 167.7        | 197.3227                      | 200 mmHg    | -  | -   | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                       |              |  | Monograph Number: 0006370                           |
| 16          | 145.5 °C           | 145.5        | 178.6544                      | 100 mmHg    | -  | -   | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                       |              |  | Monograph Number: 0006370                           |



基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

沸点

収集データ

| 情報源名 | 沸点            | 統一表記<br>[°C]     | 101.325 kPa<br>における沸<br>点[°C] | 測定条件<br>圧力 | 試験方法等     | GLP         | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>該非        | 値の種類      | 値の種類の詳細             | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキース<br>タディ | 備考           | 文献   | ページ番号等                       |
|------|---------------|------------------|-------------------------------|------------|-----------|-------------|-------------|---------------------------------|-----------|---------------------|------------|------------------------|--------------|--|------------------------------|
| 17   | 130.2 °C      | 130.2            | 164.0786                      | 60 mmHg    | -         | -           | -           | -                               | -         | -                   | 2B         | ×                      | -            | -  | Monograph Number:<br>0006370 |
| 18   | 119.3 °C      | 119.3            | 153.2049                      | 40 mmHg    | -         | -           | -           | -                               | -         | -                   | 2B         | ×                      | -            | -  | Monograph Number:<br>0006370 |
| 19   | 101.7 °C      | 101.7            | 134.9839                      | 20 mmHg    | -         | -           | -           | -                               | -         | -                   | 2B         | ×                      | -            | -  | Monograph Number:<br>0006370 |
| 20   | 85.8 °C       | 85.8             | 118.1028                      | 10 mmHg    | -         | -           | -           | -                               | -         | -                   | 2B         | ×                      | -            | -  | Monograph Number:<br>0006370 |
| 21   | MOE初期評<br>価   | 217.9 °C         | 217.9                         |            | -         | -           | -           | -                               | -         | -                   | 4A         | ×                      | Merckからの引用   | O'Neil, M.J. (2001): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition. Merck Co Inc..  | p.1                          |
| 22   |               | 217.9 °C         | 217.9                         | 760 mmHg   | -         | -           | -           | -                               | -         | -                   | 2B         | ×                      | CRC2006からの引用 | Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM)..   | p.1                          |
| 23   |               | 217.942 °C       | 217.942                       | 760 mmHg   | -         | -           | -           | -                               | -         | -                   | 2B         | ×                      | -            | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 108..                              | p.1                          |
| 24   |               | 217.9 °C         | 217.9                         |            | -         | -           | -           | -                               | -         | -                   | 4A         | ×                      | -            | Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).. | p.1                          |
| 25   | PhysProp      | 217.9 °C         | 217.9                         |            | -         | -           | -           | -                               | -         | -                   | 4A         | ×                      | -            | -  | p.1                          |
| 26   | REACH登録<br>情報 | 218.1 °C         | 218.1                         | 218.1111   | 101.3 kPa | OECD TG 103 | no          | 1: reliable without restriction | key study | experimental result | 1B         | ○                      | -            | その他(2009)  | Exp Key Boiling point.001    |
| 27   |               | 218.2 °C         | 218.2                         | 218.2111   | 101.3 kPa | OECD TG 103 | no          | 1: reliable without restriction | key study | experimental result | 1B         | ×                      | -            | -  | Exp Key Boiling point.001    |
| 28   | SIDS          | 217.9~<br>218 °C | 217.95                        | 217.961    | 1013 hPa  |             |             |                                 | key study |                     | 2A         | ○                      | -            | McCullough et al.(1957)、Zwolinski(1986)  | p.8, 13                      |
| 29   | 既存点検事<br>業    | 218 °C           | 218                           |            | -         | -           | -           | -                               | -         | -                   | 4A         | ×                      | -            | 提示資料.  | K0058                        |
| 30   |               | 218 °C           | 218                           |            | -         | -           | -           | -                               | -         | -                   | 4A         | ×                      | -            | 提示資料.  | K0058                        |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

蒸気圧

収集データ

| 情報源名        | 蒸気圧                         | 統一表記 [Pa] | 20℃における蒸気圧 [Pa] | 測定条件温度 | 試験方法等   | GLP     | reliability | 情報源におけるキースタディの該非 | 値の種類                     | 値の種類の詳細 | 信頼性ランク | 評価IIにおけるキースタディ | 備考          | 文献  | ページ番号等  |
|-------------|-----------------------------|-----------|-----------------|--------|---------|---------|-------------|------------------|--------------------------|---------|--------|----------------|-------------|---|---|
| 1 Aldrich   | 0.03 mmHg                   | 3.999671  | 2.835377        | 25 °C  |         |         |             |                  |                          |         | 2B     | ×              |             |   | p.1879  |
| 2 ATSDR     | 0.087 mmHg                  | 11.59905  |                 |        |         | -       | -           | -                | -                        |         | 4A     | ×              |             | EPA. 1982e. Aquatic fate process data for organic priority pollutants. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency, Office of Water Regulations and Standards. EPA440481014. | p.161   |
| 3 EHC       | 10.4 Pa                     | 10.4      | 7.372587        | 25 °C  | -       | -       | -           | -                | -                        |         | 2B     | ×              | -           | Sonnefeld WJ, Zoller WH, & May WE (1983) Dynamic coupled-column   | 2.2 Physical and chemical properties            |
| 4 EPI Suite | 5.39 Pa[2B以上の値を用いて推定(2C) 1] | 5.39      | 3.820985        | 25 °C  | MPBPWIN |         |             |                  | (Q)SAR                   |         | 2C     | ×              |             |   |   |
| 5 HSDB      | 0.085 mmHg                  | 11.3324   | 8.033569        | 25 °C  |         |         |             |                  |                          |         | 2B     | ×              | Mackayと同じ引用 |   | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE: |
| 6 IUCLID    | 0.04 hPa                    | 4         | 4               | 20 °C  | その他     | no      |             |                  | estimated by calculation |         | 4C     | ×              |             |   | p.15  |
| 7           | 0.111 hPa                   | 11.1      | 7.868819        | 25 °C  | その他     | no data |             |                  | experimental result      |         | 4A     | ×              |             |   | p.15  |
| 8           | 0.116 hPa                   | 11.6      | 8.22327         | 25 °C  | その他     | no data |             |                  | estimated by calculation |         | 4C     | ×              |             |   | p.15  |
| 9           | 0.14 hPa                    | 14        | 9.924637        | 25 °C  | その他     | no      |             |                  | experimental result      |         | 4A     | ×              |             |   | p.15  |
| 10          | 0.13 hPa                    | 13        | 6.607622        | 30 °C  | その他     | no data |             |                  | estimated by calculation |         | 4C     | ×              |             |   | p.15  |
| 11          | 0.13 hPa                    | 13        | 6.607622        | 30 °C  | その他     | no data |             |                  | estimated by calculation |         | 4C     | ×              |             |   | p.15  |
| 12          | 0.13 hPa                    | 13        | 6.607622        | 30 °C  | その他     | no data |             |                  | estimated by calculation |         | 4C     | ×              |             |   | p.15  |
| 13          | 1.1 hPa                     | 110       | 16.37823        | 50 °C  | その他     | no data |             |                  | estimated by calculation |         | 4C     | ×              |             | Auer 1988 (SIDSの記載による)  | p.15  |
| 14          | 1.1 hPa                     | 110       | 16.37823        | 50 °C  | その他     | no data |             |                  | estimated by calculation |         | 4C     | ×              |             | Auer 1988 (SIDSの記載による)  | p.15  |
| 15          | 1.1 hPa                     | 110       | 16.37823        | 50 °C  | その他     | no data |             |                  | estimated by calculation |         | 4C     | ×              |             | Auer 1988 (SIDSの記載による)  | p.15  |
| 16          | 0.0013329 hPa               | 0.13329   | 0.016724        | 53 °C  |         |         |             |                  |                          |         | 4A     | ×              |             |   | p.15  |
| 17          | 0.04 hPa                    | 4         | 4               | 20 °C  | その他     | no      |             |                  | estimated by calculation |         | 4C     | ×              |             |   | p.15  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

蒸気圧

収集データ

| 情報源名 | 蒸気圧                | 統一表記 [Pa] | 20°Cにおける蒸気圧 [Pa] | 測定条件温度   | 試験方法等   | GLP     | reliability | 情報源におけるキースタディの該非 | 値の種類                     | 値の種類の詳細        | 信頼性ランク | 評価IIにおけるキースタディ | 備考   | 文献   | ページ番号等 |
|------|--------------------|-----------|------------------|----------|---|---------|-------------|------------------|--------------------------|----------------|--------|----------------|--|--|--------|
| 18   | 0.04 hPa           | 4         | 4                | 20 °C    | その他   | no      |             |                  | estimated by calculation |                | 4C     | ×              |  |  | p.15   |
| 19   | 0.08 hPa           | 8         | 8                | 20 °C    | その他   | no      |             |                  | experimental result      |                | 4A     | ×              | Naphthalene pure   | Rutgets(date unknown) (SIDSの記載による)   | p.15   |
| 20   | 0.104 hPa          | 10.4      | 7.372587         | 25 °C    | その他   | no data |             |                  | experimental result      |                | 4A     | ×              |  |  | p.15   |
| 21   | 0.108 hPa          | 10.8      | 7.656148         | 25 °C    | その他   | no data |             |                  | experimental result      |                | 4A     | ×              |  |  | p.15   |
| 22   | 0.109 hPa          | 10.9      | 7.727039         | 25 °C    | その他   | no data |             |                  | experimental result      |                | 4A     | ×              |  |  | p.15   |
| 23   | 0.111 hPa          | 11.1      | 7.868819         | 25 °C    | その他   | no data |             |                  | experimental result      |                | 4A     | ×              |  |  | p.15   |
| 24   | 0.111 hPa          | 11.1      | 7.868819         | 25 °C    | その他   | no data |             |                  | experimental result      |                | 4A     | ×              |  |  | p.15   |
| 25   | Mackay<br>41.88 Pa | 41.88     | 29.68884         | 25 °C    | -   | -       | -           | -                | -                        | PI(過冷却液体蒸気圧)の値 | 2B     | ×              | 41.88, 38.02 (supercooled liquid PL values converted from literature PS with different ΔSfus values, Hinckley et al. 1990)   | Hinckley, D.A., Bidleman, T.F., Foreman, W.T. (1990) Determination of vapor pressures for nonpolar and semipolar organic compounds from gas chromatographic retention data. J. Chem. Eng. Data 35, 232-237.. | p.623  |
| 26   | 22.64 Pa           | 22.64     | 16.04956         | 25 °C    | その他,PGC by GC-RT correlation with BP-1 column       | -       | -           | -                | -                        | PI(過冷却液体蒸気圧)の値 | 2B     | ×              | 22.64, 28.24 (PGC by GC-RT correlation with BP-1 column, Apolane-87 column, Bidleman 1984)   | Bidleman T.F. (1984) Estimation of vapor pressures for nonpolar organic compounds by capillary gas chromatography. Anal. Chem.56, 2490-2496..  | p.623  |
| 27   | 28.24 Pa           | 28.24     | 20.01941         | 25 °C    | その他,PGC by GC-RT correlation with Apolane-87 column | -       | -           | -                | -                        | PI(過冷却液体蒸気圧)の値 | 2B     | ×              | 22.64, 28.24 (PGC by GC-RT correlation with BP-1 column, Apolane-87 column, Bidleman 1984)   | Bidleman T.F. (1984) Estimation of vapor pressures for nonpolar organic compounds by capillary gas chromatography. Anal. Chem.56, 2490-2496..  | p.623  |
| 28   | 10.7 Pa            | 10.7      | 7.407964         | 25.35 °C | -   | -       | -           | -                | -                        |                | 2B     | ×              | 10.7* (25.35°C, gas saturation, temp range 24.85-57.75°C, Sato et al. 1986)<br>ln (PS/Pa) = 22.8929 - 4025.35/(T/K - 102.243);<br>temp range 298.5-330.9 K (Antoine eq., gas saturation, Sato et al. 1986) | Sato, N., Inomata, H., Arai, K., Saito, S. (1986) Measurements of vapor pressures for coal-related aromatic compounds by gas saturation method. J. Chem. Eng. Jpn. 19, 145-147..                             | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

蒸気圧

収集データ

| 情報源名 | 蒸気圧      | 統一表記<br>[Pa] | 20°Cにおけ<br>る蒸気圧<br>[Pa] | 測定条件<br>温度 | 試験方法等 | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>該非 | 値の種類       | 値の種類の詳細                       | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考   | 文献   | ページ番号等 |
|------|----------|--------------|-------------------------|------------|-------|-----|-------------|--------------------------|------------|-------------------------------|------------|-------------------------|--|--|--------|
| 29   | 11.27 Pa | 11.27        | 7.989333                | 25 °C      | -     | -   | -           | -                        | 内挿(補<br>間) | interpolated-<br>Antoine eq., | 4C         | ×                       | 11.27 (interpolated-Antoine eq., Stephenson & Malanowski 1987)<br>log (P_S/kPa) = 8.70592 - 2619.91/(-52.499 + T/K);<br>temp range 310-353 K (Antoine eq-I., Stephenson & Malanowski 1987)<br>log (P_S/kPa) = 9.45562 - 3069.145/(-29.892 + T/K);<br>temp range 263-353 K (Antoine eq- II ., Stephenson & Malanowski 1987)<br>log (P_S/kPa) = 11.9681 - 4577.47/(30.694 + T/K);<br>temp range not specified (Antoine eq-III ., Stephenson & Malanowski 1987)<br>log (P_L/kPa) = 6.19487 - 1782.509/(-65.637 + T/K);<br>temp range 352-500 K (Antoine eq-IV ., Stephenson & Malanowski 1987)<br>log (P_L/kPa) = 6.14835 - 1751.644/(-68.319 + T/K);<br>temp range 491-565 K (Antoine eq-V ., Stephenson & Malanowski 1987)<br>log (P_L/kPa) = 6.53231 - 2162.182/(-12.108 + T/K);<br>temp range 563-665 K (Antoine eq-VI ., Stephenson & Malanowski 1987)<br>log (P_L/kPa) = 7.74783 - 4042.567/(227.985 + T/K);<br>temp range 661-750 K (Antoine eq-VII ., Stephenson & Malanowski 1987) | Stephenson, R.M., Malanowski, A. (1987) Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds. Elsevier, N.Y.. | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

蒸気圧

収集データ

| 情報源名 | 蒸気圧          | 統一表記 [Pa] | 20°Cにおける蒸気圧 [Pa] | 測定条件 温度 | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源におけるキースタディの該非 | 値の種類                                    | 値の種類の詳細                 | 信頼性ランク | 評価IIにおけるキースタディ | 備考   | 文献  | ページ番号等 |
|------|--------------|-----------|------------------|---------|--|-----|-------------|------------------|---|-------------------------|--------|----------------|--|---|--------|
| 30   | 11.37 Pa     | 11.37     | 8.060223         | 25 °C   | その他,pressure gauge, measured range -12.15 to 70.16°C           | -   | -           | -                | 内挿(補間)                                  | interpolated-Antoine eq | 4C     | ×              | 11.37* (pressure gauge, interpolated-Antoine eq., measured range -12.15 to 70.16°C, Sasse et al. 1988) log (P_S/mmHg) = 10.05263 - 2907.918/(236.459 + T°C); temp range -12.15 to 70.16°C (Antoine eq., pressure gauge, Sasse et al. 1988) log (P_L/mmHg) = 2. | Sasse, K., Jose, J., Merlin, J.-C. (1988) A static apparatus for measurement of low vapor pressures. Experimental results on high molecular-weight hydrocarbons. Fluid Phase Equil. 42, 287-304..                 | p.623  |
| 31   | 22.65 Pa     | 22.65     | 16.05664         | 25 °C   | その他,PGC, GC-RT correlation with eicosane as reference standard | -   | -           | -                | -                                       | -                       | 2B     | ×              | -  | Hinckley, D.A., Bidleman, T.F., Foreman, W.T. (1990) Determination of vapor pressures for nonpolar and semipolar organic compounds from gas chromatographic retention data. J. Chem. Eng. Data 35, 232-237..      | p.623  |
| 32   | 38.02 Pa     | 38.02     | 26.95248         | 25 °C   | -  | -   | -           | -                | -                                       | -                       | 2B     | ×              | 41.88, 38.02 (supercooled liquid PL values converted from literature PS with different ΔSfus values, Hinckley et al. 1990)   | Hinckley, D.A., Bidleman, T.F., Foreman, W.T. (1990) Determination of vapor pressures for nonpolar and semipolar organic compounds from gas chromatographic retention data. J. Chem. Eng. Data 35, 232-237..      | p.623  |
| 33   | 0.7634 Pa    | 0.7634    | 3.428514         | 0 °C    | その他,gas saturation-GC, measured range -30.6 to 0°C,            | -   | -           | -                | 外挿?                                     | -                       | 4A     | ×              | 0.7634* (0°C, gas saturation-GC, measured range -30.6 to 0°C, Wania et al. 1994) log (P/Pa) = 13.93 - 3851/(T/K); temp range -30 to 0°C, (Antoine eq., gas saturation, Wania et al. 1994)  | Wania, F., Shiu, W.-Y., Mackay, D. (1994) Measurement of the vapor pressure of several low-volatility organochlorine chemicals at low temperatures with a gas saturation method. J. Chem. Eng. Data 39, 572-577.. | p.623  |
| 34   | 24 Pa        | 24        | 17.01366         | 25 °C   | その他,supercooled liquid P_L, GC-RT correlation                  | -   | -           | -                | -                                       | PI(過冷却液体蒸気圧)の値          | 2B     | ×              | -  | Donovan, S.F. (1996) New method for estimating vapor pressure by the use of gas chromatography. J. Chromatogr. A, 749, 123-129..  | p.623  |
| 35   | 5.58~12.3 Pa | 8.94      | 6.337589         | 25 °C   | -  | -   | -           | -                | その他,quoted lit. ranges: effusion method | -                       | 2B     | ×              | 5.58-12.30; 10.4-14.0; 11.2-14.4; 7.71-17.2; 6.45-8.40 (quoted lit. ranges: effusion method; gas saturation; manometry; calculated; from GC-RT correlation, Delle Site 1997)   | Delle Site, A. (1997) The vapor pressure of environmentally significant organic chemicals: A review of methods and data at ambient temperature. J. Phys. Chem. Ref. Data 26, 157-193..                            | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

蒸気圧

収集データ

| 情報源名 | 蒸気圧          | 統一表記 [Pa] | 20℃における蒸気圧 [Pa] | 測定条件温度 | 試験方法等                | GLP | reliability | 情報源におけるキースタディの該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細 | 信頼性ランク | 評価IIにおけるキースタディ | 備考   | 文献   | ページ番号等 |
|------|--------------|-----------|-----------------|--------|----------------------|-----|-------------|------------------|--|---------|--------|----------------|--|--|--------|
| 36   | 11.3 Pa      | 11.3      | 8.0106          | 25 °C  | その他,effusion method, | -   | -           | -                | -  | -       | 2B     | ×              | 11.30* (effusion method, de Kruijff 1980)<br>log (P/Pa) = 14.187 – 3907/(T/K); temp range 253–273 K (torsion effusion, regression, de Kruijff 1980)<br>log (P/Pa) = 14.053 – 3860/(T/K); temp range 253–273 K (weighing effusion, regression, de Kruijff 1980)<br>log (P/Pa) =14.107-3886/(T/K); temp range 253-273 K (effusion, mean regression, de Kruijff 1980) | De Kruijff, C.G. (1980) Enthalpies of sublimation and vapor pressures of 11 polycyclic hydrocarbons. J. Chem. Thermodyn. 12,243–248..  | p.623  |
| 37   | 10.4~14 Pa   | 12.2      | 8.648612        | 25 °C  | -                    | -   | -           | -                | その他,quoted lit. ranges: gas saturation         | -       | 2B     | ×              | 5.58–12.30; 10.4–14.0; 11.2–14.4; 7.71–17.2; 6.45–8.40 (quoted lit. ranges: effusion method; gas saturation; manometry; calculated; from GC-RT correlation, Delle Site 1997)   | Delle Site, A. (1997) The vapor pressure of environmentally significant organic chemicals: A review of methods and data at ambient temperature. J. Phys. Chem. Ref. Data 26, 157–193.. | p.623  |
| 38   | 11.2~14.4 Pa | 12.8      | 9.073954        | 25 °C  | -                    | -   | -           | -                | その他,quoted lit. ranges: manometry              | -       | 2B     | ×              | 5.58–12.30; 10.4–14.0; 11.2–14.4; 7.71–17.2; 6.45–8.40 (quoted lit. ranges: effusion method; gas saturation; manometry; calculated; from GC-RT correlation, Delle Site 1997)   | Delle Site, A. (1997) The vapor pressure of environmentally significant organic chemicals: A review of methods and data at ambient temperature. J. Phys. Chem. Ref. Data 26, 157–193.. | p.623  |
| 39   | 7.71~17.2 Pa | 12.455    | 8.829382        | 25 °C  | -                    | -   | -           | -                | その他(推定値),quoted lit. ranges: calculated;       | -       | 4C     | ×              | 5.58–12.30; 10.4–14.0; 11.2–14.4; 7.71–17.2; 6.45–8.40 (quoted lit. ranges: effusion method; gas saturation; manometry; calculated; from GC-RT correlation, Delle Site 1997)   | Delle Site, A. (1997) The vapor pressure of environmentally significant organic chemicals: A review of methods and data at ambient temperature. J. Phys. Chem. Ref. Data 26, 157–193.. | p.623  |
| 40   | 6.45~8.04 Pa | 7.425     | 5.263602        | 25 °C  | -                    | -   | -           | -                | その他,quoted lit. ranges: from GC-RT correlation | -       | 2B     | ×              | 5.58–12.30; 10.4–14.0; 11.2–14.4; 7.71–17.2; 6.45–8.40 (quoted lit. ranges: effusion method; gas saturation; manometry; calculated; from GC-RT correlation, Delle Site 1997)   | Delle Site, A. (1997) The vapor pressure of environmentally significant organic chemicals: A review of methods and data at ambient temperature. J. Phys. Chem. Ref. Data 26, 157–193.. | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

蒸気圧

収集データ

| 情報源名 | 蒸気圧      | 統一表記 [Pa] | 20°Cにおける蒸気圧 [Pa] | 測定条件温度 | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源におけるキースタディの該非 | 値の種類  | 値の種類の詳細        | 信頼性ランク | 評価IIにおけるキースタディ | 備考  | 文献   | ページ番号等 |
|------|----------|-----------|------------------|--------|--|-----|-------------|------------------|---|----------------|--------|----------------|---|--|--------|
| 41   | 11.16 Pa | 11.16     | 7.911353         | 25 °C  | -  | -   | -           | -                | -   | -              | 2B     | ×              | 11.16 (solid PS, van der Linde et al. 1998)   | Van der Linde, P.R., Blok, J.G., Oonk, A.J. (1998) Naphthalene as a reference substance for vapour pressure measurements looked upon from an unconventional point of view. J. Chem. Thermodyn. 30, 909-917.. | p.623  |
| 42   | 40 Pa    | 40        | 28.35611         | 25 °C  | -  | -   | -           | -                | その他,quoted PL from Hinckley et al. 1990                           | PI(過冷却液体蒸気圧)の値 | 2B     | ×              | 40.0; 12.4 (quoted PL from Hinckley et al. 1990; converted to PS with fugacity ratio F, Passivirta et al. 1999) log (P_S/Pa) = 10.90 - 2927/(T/K) (solid, Passivirta et al. 1999) log (P_L/Pa) = 8.06 - 1923/(T/K) (supercooled liquid, Passivirta et al. 1999) Bidleman(1984)を引用しているとの記載あり | Hinckley, D.A., Bidleman, T.F., Foreman, W.T. (1990) Determination of vapor pressures for nonpolar and semipolar organic compounds from gas chromatographic retention data. J. Chem. Eng. Data 35, 232-237.. | p.623  |
| 43   | 12.4 Pa  | 12.4      | 8.790393         | 25 °C  | -  | -   | -           | -                | その他,converted to PS with fugacity ratio F, Passivirta et al. 1999 | -              | 2B     | ×              | 40.0; 12.4 (quoted PL from Hinckley et al. 1990; converted to PS with fugacity ratio F, Passivirta et al. 1999) log (P_S/Pa) = 10.90 - 2927/(T/K) (solid, Passivirta et al. 1999) log (P_L/Pa) = 8.06 - 1923/(T/K) (supercooled liquid, Passivirta et al. 1999)                             | Hinckley, D.A., Bidleman, T.F., Foreman, W.T. (1990) Determination of vapor pressures for nonpolar and semipolar organic compounds from gas chromatographic retention data. J. Chem. Eng. Data 35, 232-237.. | p.623  |
| 44   | 37 Pa    | 37        | 26.2294          | 25 °C  | その他,supercooled liquid PL, GC-RT correlation | -   | -           | -                | -   | PI(過冷却液体蒸気圧)の値 | 2B     | ×              | 37.0 (supercooled liquid PL, GC-RT correlation, Lei et al. 2002) log (P_L/Pa) = -2930/(T/K) + 11.39; ΔHvap. = -56.1 kJ · mol <sup>-1</sup> (GC-RT correlation, Lei et al. 2002)   | Lei, Y.D., Chankalal, R., Chan, A., Wania, F. (2002) Supercooled liquid vapor pressures of the polycyclic aromatic hydrocarbons.J. Chem. Eng. Data 47, 801-806..   | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

蒸気圧

収集データ

| 情報源名 | 蒸気圧       | 統一表記 [Pa] | 20°Cにおける蒸気圧 [Pa] | 測定条件 温度    | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源におけるキースタディの該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細        | 信頼性ランク | 評価IIにおけるキースタディ | 備考   | 文献  | ページ番号等     |
|------|-----------|-----------|------------------|------------|---|-----|-------------|------------------|------|----------------|--------|----------------|--|---|------------|
| 45   | 14.26 Pa  | 14.26     | 10.10895         | 25 °C      | その他,manometry-Rodebush gauge,                     | -   | -           | -                | -    |                | 2B     | ○              | 14.26* (manometry-Rodebush gauge, Sears & Hopke 1949) log (P/mmHg) = -[108.30/(t°C + 27)] + 1.115; temp range 19 -35°C (manometry-Rodebush gauge, Sears & Hopke 1949) <b>Mackayの表4.1.1.2.2より20°Cにおいて8.533と記されているのでこの値を採用値とする</b> | Sears, G.W., Hopke, E.R. (1949) Vapor pressures of naphthalene, anthracene, and hexachlorobenzene in a low pressure region. J. Am.Chem. Soc. 71, 1632-1634..                    | p.623,p633 |
| 46   | 10.8 Pa   | 10.8      | 7.656148         | 25 °C      | その他,effusion method, measured range 6.7-20.7°C,   | -   | -           | -                | -    |                | 2B     | ×              | 10.8* (effusion method, measured range 6.7-20.7°C, Bradley & Cleasby 1953) log (P/cmHg) = 10.597 - 3783/(T/K); temp range 6.7-20.7°C, (Antoine eq., effusion, Bradley & Cleasby 1953)  | Bradley, R.S., Cleasby, T.G. (1953) The vapor pressure and lattice energy of some aromatic ring compounds. J. Chem. Soc. 1690-1692..  | p.623      |
| 47   | 10.42 Pa  | 10.42     | 7.386765         | 25 °C      | その他,effusion method,                              | -   | -           | -                | 実測値  |                | 2B     | ×              | 10.42* (effusion method, de Kruij et al. 1981)   | De Kruij, C.G., Kuipers, T., Van Miltenburg, J.C., Schaake, R.C.F., Stevens, G. (1981) The vapour pressure of solid and liquid naphthalene. J. Chem. Thermodyn. 13, 1081-1086.. | p.623      |
| 48   | 6815 Pa   | 6815      | 28.97952         | 126.325 °C | その他,manometry, measured range 126.325-218.638°C,  | -   | -           | -                | -    | PI(過冷却液体蒸気圧)の値 | 4A     | ×              | 6815* (126.325°C, manometry, measured range 126.325-218.638°C, Camin & Rossini 1955) log (P/mmHg) = 6.84577 - 1606.529/(187.227 + t°C); temp range 126.3-218.6°C (Antoine eq. Camin & Rossini 1955)                              | Camin, D.L., Rossini, F.D. (1955) Physical properties of fourteen American Petroleum Institute research hydrocarbons, C9 to C15.J. Phys. Chem. 59, 1173-1179..                  | p.623      |
| 49   | 0.1188 Pa | 0.1188    | 1.603202         | -13 °C     | その他,Knudsen effusion, measured range -43 to -13°C | -   | -           | -                | -    |                | 4A     | ×              | -  | Miller, G.A. (1963) Vapor pressure of naphthalene. Thermodynamic consistency with proposed frequency assignments. J. Chem.Eng. Data 8, 69-72..                                  | p.623      |
| 50   | 46.66 Pa  | 46.66     | 12.33499         | 40.33 °C   | その他,Hg manometer, measured range 40.33-80.34°C,   | -   | -           | -                | -    |                | 4A     | ×              | 46.66* (40.33°C, Hg manometer, measured range 40.33-80.34°C, Fowler et al. 1968)   | Fowler, L., Trump, W.N., Vogler, C.E. (1968) Vapor pressure of naphthalene. J. Chem. Eng. Data 13(2), 209-210..   | p.623      |



基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

蒸気圧

収集データ

| 情報源名 | 蒸気圧      | 統一表記 [Pa] | 20°Cにおける蒸気圧 [Pa] | 測定条件温度 | 試験方法等                                  | GLP | reliability | 情報源におけるキースタディの該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細                 | 信頼性ランク | 評価IIにおけるキースタディ | 備考  | 文献   | ページ番号等 |
|------|----------|-----------|------------------|--------|--|-----|-------------|------------------|--------|-------------------------|--------|----------------|---|--|--------|
| 51   | 10.98 Pa | 10.98     | 7.783751         | 25 °C  | その他,manometry, extrapolated solid      | -   | -           | -                | 外挿(補外) | extrapolated solid      | 4C     | ×              | 10.98, 32.95 (manometry, extrapolated solid, supercooled liquid PL, Fowler et al. 1968)<br>log (P_S/mmHg) = 9.58102 - 2692.92/(t°C + 220.651);<br>temp range 40-80°C (Antoine eq.,mercury manometer, Fowler et al. 1968)  | Fowler, L., Trump, W.N., Vogler, C.E. (1968) Vapor pressure of naphthalene. J. Chem. Eng. Data 13(2), 209-210..  | p.623  |
| 52   | 32.95 Pa | 32.95     | 23.35834         | 25 °C  | その他,manometry, supercooled liquid P_L, | -   | -           | -                | -      | PI(過冷却液体蒸気圧)の値          | 2B     | ×              | 10.98, 32.95 (manometry, extrapolated solid, supercooled liquid PL, Fowler et al. 1968)<br>log (PL/mmHg) = 7.03382 - 1756.91/(t°C + 204.931);<br>temp range 81-180°C (Antoine eq., mercury manometer, Fowler et al. 1968)   | Fowler, L., Trump, W.N., Vogler, C.E. (1968) Vapor pressure of naphthalene. J. Chem. Eng. Data 13(2), 209-210..  | p.623  |
| 53   | 30.66 Pa | 30.66     | 21.73495         | 25 °C  | -                                      | -   | -           | -                | 外挿(補外) | extrapolated-Antoine eq | 4C     | ×              | 30.66* (extrapolated-Antoine eq., Zwolinski & Wilhoit 1971)<br>log (P/mmHg) = 7.01065 - 1733.71/(201.859 + t°C);<br>temp range 86.581-250.27°C (Antoine eq., Zwolinski & Wilhoit 1971)  | Zwolinski, B.J., Wilhoit, R.C. (1971) Handbook of Vapor Pressures and Heats of Vaporization of Hydrocarbons and Related Compounds. American Petroleum Institute Project 44, API 44-TRC Publications in Science and Engineering, Texas A & M University, College. | p.623  |
| 54   | 11.6 Pa  | 11.6      | 8.22327          | 25 °C  | -                                      | -   | -           | -                | 内挿(補間) | nterpolated-Antoine eq  | 4C     | ×              | 11.60 (interpolated-Antoine eq., Weast 1972-73)<br>log (P/mmHg) = [-0.2185 × 17065.2/(T/K)] + 11.450; temp range 0-80.0°C (Antoine eq., Weast 1972-73)<br>log (P/mmHg) = [-0.2185 × 12311.6/(T/K)] + 8.413089; temp range 52.6-217.9°C (Antoine eq., Weast 1972-73)<br>CRCの引用 | Weast, R. (1972-73) Handbook of Chemistry and Physics. 53rd ed., CRC Press, Cleveland..  | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

蒸気圧

収集データ

| 情報源名 | 蒸気圧      | 統一表記 [Pa] | 20°Cにおける蒸気圧 [Pa] | 測定条件温度 | 試験方法等                              | GLP | reliability | 情報源におけるキースタディの該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細                                  | 信頼性ランク | 評価IIにおけるキースタディ | 備考  | 文献   | ページ番号等     |
|------|----------|-----------|------------------|--------|------------------------------------|-----|-------------|------------------|--------|--|--------|----------------|---|--|------------|
| 55   | 12.26 Pa | 12.26     | 8.691146         | 25 °C  | その他,Knudsen effusion method,       | -   | -           | -                | 内挿(補間) | extrapolated from measured data,         | 4C     | ×              | 12.26* (Knudsen effusion method, extrapolated from measured data, Radchenko & Kitiagorodskii 1974)<br>log (P/mmHg) = 11.7041 – 3796.574/(T/K); temp range 9.0–23.91°C (Antoine eq., Knudsen effusion, Radchenko & Kitiagorodskii 1974)<br><b>Mackayの表4.1.1.2.2より20°Cにおいて48.37と記されていた。データの横並びから見て外れ値とする。</b>   | Radchenko, L.G., Kitiagorodskii, A.I. (1974) Vapor pressure and heat of sublimation of naphthalene, biphenyl, octafluoronaphthalene, decafluorobiphenyl, acenaphthene and $\alpha$ -nitronaphthalene. Zhur. Fiz. Khim. 48, 2702–2704.. | p.623,p634 |
| 56   | 10.93 Pa | 10.93     | 7.748306         | 25 °C  | -                                  | -   | -           | -                | -      | -  | 2B     | ×              | 10.93* (gas saturation, Sinke 1974)   | Sinke, G.C. (1974) A method for measurement of vapor pressures of organic compounds below 0.1 torr, naphthalene as a reference.  | p.623      |
| 57   | 11.21 Pa | 11.21     | 7.946798         | 25 °C  | -                                  | -   | -           | -                | -      | -  | 2B     | ×              | 11.21* (Baratron model diaphragm pressure gauge, Ambrose et al. 1975)<br>$T \cdot \log (P/Pa) = \frac{1}{2} \cdot a_0 + \sum a_i E_i(x)$ ; $a_0 = 310.6247$ , $a_1 = 791.4937$ , $a_2 = -82536$ , $a_3 = 0.4043$ ; temp range: 230–344 K,<br>(Chebyshev polynomial, diaphragm pressure gauge, Ambrose et al. 1975)<br>log (P/Pa)13.70 – 3773/(T/K)<br>(Antoine eq. derived from exptl data of Ambrose et al. 1975. Wania et al. 1994) | Ambrose, M., Lawrenson, I.J., Sprake, C.H.S. (1975) The vapour pressure of naphthalene. J. Chem. Thermodyn. 7, 1173–1176..   | p.623      |
| 58   | 11.41 Pa | 11.41     | 8.088579         | 25 °C  | その他,Knudsen effusion,              | -   | -           | -                | 外挿(補外) | extrapolated-Antoine eq. from exptl data | 4C     | ×              | 11.41* (Knudsen effusion, extrapolated-Antoine eq. from exptl data, Colomina et al. 1982)<br>log (P/Pa) = 14.01 – 3861.8/(T/K); temp range 271.46–284.63 K (Antoine eq., Knudsen effusion, Colomina et al. 1982)  | Colomina, M., Jimenez, P., Turrión, C. (1982) Vapor pressures and enthalpies of sublimation of naphthalene and benzoic acid. J. Chem. Thermodynamics 14, 779–784..   | p.623      |
| 59   | 13.5 Pa  | 13.5      | 9.570185         | 25 °C  | その他,effusion method-pressure gauge | -   | -           | -                | -      | -  | 2B     | ×              | -   | De Pablo, R.S. (1976) Determination of saturated vapor pressure in range 10–1–10–4 torr by effusion method. J. Chem. Eng. Data 21, 141–143..   | p.623      |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

蒸気圧

収集データ

| 情報源名 | 蒸気圧      | 統一表記 [Pa] | 20°Cにおける蒸気圧 [Pa] | 測定条件温度   | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源におけるキースタディの該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細                   | 信頼性ランク | 評価IIにおけるキースタディ | 備考  | 文献  | ページ番号等 |
|------|----------|-----------|------------------|----------|---|-----|-------------|------------------|--------|---------------------------|--------|----------------|---|---|--------|
| 60   | 10.64 Pa | 10.64     | 7.542724         | 25 °C    | その他,gas saturation  | -   | -           | -                | 内挿(補間) | interpolated-Clapeyron eq | 4C     | ×              | 10.64* (gas saturation, interpolated-Clapeyron eq., Macknick & Prausnitz 1979) log (P/mmHg) = 26.250 - 8575/(T/K); temp range 7.15-31.85°C (Clapeyron eq., gas saturation, Macknick & Prausnitz 1979) | Macknick, A.B., Prausnitz, J.M. (1979) Vapor pressures of high-molecular-weight hydrocarbons. J. Chem. Eng. Data 24, 175-178..  | p.623  |
| 61   | 8.64 Pa  | 8.64      | 8.64             | 20 °C    | その他,effusion, measured range 10-30°C                      | -   | -           | -                | -      | -                         | 2B     | ○              | 8.64* (20°C, effusion, measured range 10-30°C Swan & Mack 1925) log (P/mmHg) = 29.820/(T/K) - 200.682·log (T/K) + 595.642; measured temp range 10-30°C (effusion, Swan& Mack 1925)                    | Swan, T.H., Mack, Jr., E. (1925) Vapor pressures of organic crystals by an effusion method. J. Am. Chem. Soc. 47, 2112-2116..   | p.623  |
| 62   | 133.3 Pa | 133.3     | 17.1078          | 52.6 °C  | -   | -   | -           | -                | -      | -                         | 4A     | ×              | 133.3* (52.6°C, summary of literature data, temp range 52.6-217.9°C, Stull 1947)  | Stull, D.R. (1947) Vapor pressure of pure substances. Organic compounds. Ind. Eng. Chem. 39, 517-560..  | p.623  |
| 63   | 11.33 Pa | 11.33     | 8.031867         | 25 °C    | その他,gas saturation-GC                                     | -   | -           | -                | -      | -                         | 2B     | ×              | 11.33* (gas saturation-GC, Grayson & Fosbraey 1982) ln (P/Pa) = 31.8 - 8753/(T/K); temp range 302-352 K, (Antoine eq., gas saturation, Grayson & Fosbraey 1982)                                       | Grayson, B.T., Fosbraey, L.A. (1982) Determination of the vapor pressure of pesticides. Pestic. Sci. 13, 269-278..  | p.623  |
| 64   | 6.53 Pa  | 6.53      | 6.53             | 20 °C    | -   | -   | -           | -                | -      | -                         | 2B     | ○              | 6.53 (20°C, Mackay et al. 1983)   | Mackay, D. Shiu, W.Y., Chau, E. (1983) Calculation of diffusion resistance controlling volatilization rates of organic contaminants from water. Can. J. Fish. Aqua. Sci. 40, 295-303..                                  | p.623  |
| 65   | 10.4 Pa  | 10.4      | 7.372587         | 25 °C    | その他,gas saturation-HPLC/UV,                               | -   | -           | -                | -      | -                         | 2B     | ×              | 10.4* (gas saturation-HPLC/UV, Sonnefeld et al. 1983) log (P/Pa) = 14.299 - 3960.03/(T/K); temp range 10-50°C (Antoine eq., gas saturation, Sonnefeld et al. 1983)                                    | Sonnefeld, W.J., Zoller, W.H., May, W.E. (1983) Dynamic coupled-column liquid chromatographic determination of ambient temperature vapor pressures of polynuclear aromatic hydrocarbons. Anal. Chem. 5, 275-280..       | p.623  |
| 66   | 1.63 Pa  | 1.63      | 9.97E+01         | 244.19 K | その他,spinning-rotor gauge, measured range 244.19-255.86 K, | -   | -           | -                | -      | -                         | 4A     | ×              | 1.63* (244.19°C, spinning-rotor gauge, measured range 244.19-255.86 K, Van Ekeren et al. 1983)  | Van Ekeren, P.J., Jacobs, M.H.G., Offringa, J.C.A., De Kruif, C.G. (1983) Vapour-pressure measurements on trans-diphenylethene and naphthalene using a spinning-rotor friction gauge. J. Chem. Thermodyn. 15, 409-417.. | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

蒸気圧

収集データ

| 情報源名 | 蒸気圧       | 統一表記 [Pa]                          | 20°Cにおける蒸気圧 [Pa] | 測定条件温度   | 試験方法等                      | GLP         | reliability | 情報源におけるキースタディの該非              | 値の種類                | 値の種類の詳細                         | 信頼性ランク | 評価IIにおけるキースタディー | 備考  | 文献   | ページ番号等                      |
|------|-----------|------------------------------------|------------------|----------|----------------------------|-------------|-------------|-------------------------------|---------------------|---------------------------------|--------|-----------------|---|--|-----------------------------|
| 67   | 10.4 Pa   | 10.4                               | 7.372587         | 25 °C    | その他.generator column-HPLC, | -           | -           | -                             | -                   | -                               | 2B     | ×               | 10.4 (generator column-HPLC, Wasik et al. 1983) | Wasik, S.P., Miller, M.M., Teware, Y.B., May, W.E., Sonnefeld, W.J., DeVoe, H., Zoller, W.H. (1983) Determination of the vapor pressure, aqueous solubility, and octanol/water partition coefficient of hydrophobic substances by coupled generator column/ liq. | p.623                       |
| 68   | MOE初期評価   | 0.085 mmHg                         | 11.3324          | 8.033569 | 25 °C                      | -           | -           | -                             | -                   | -                               | 2B     | ×               | Mackayと同じ引用                                     | Ambrose D, Lawrenson IJ, and Sprake CHS (1975): The vapour pressure of naphthalene. J. Chem. Thermodynamics. 7: 1173-1176..  | p.1                         |
| 69   |           | 11 Pa[0.085 mmHg (= 11 Pa) (25°C)] | 11               | 7.797929 | 25 °C                      | -           | -           | -                             | -                   | -                               | 2B     | ×               | -   | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 108..  | p.1                         |
| 70   | PhysProp  | 0.085 mmHg                         | 11.3324          | 8.033569 | 25 °C                      | -           | -           | -                             | experimental result | -                               | 2B     | ×               | Mackay,MOEと同じ引用                                 | AMBROSE,D ET AL. (1975C).  | p.1                         |
| 71   | REACH登録情報 | 7.2 Pa                             | 7.2              | 7.2      | 20 °C                      | OECD TG 104 | no data     | 2: reliable with restrictions | key study           | experimental result             |        |                 | SIDSと同じ引用                                       | その他(2003)、DeKruif CG, Kuipers T, Van Miltenburg JC, Scaake RCF and Stevens G(1982) The vapour pressure of solid and liquid naphthalene J. Chem. Thermodynamics 13, 1081-1086 (1982) (cited from HSE/UK 2003)   | Exp Key Vapour pressure.001 |
| 72   |           | 10.5 Pa                            | 10.5             | 7.443478 | 25 °C                      | OECD TG 104 | no data     | 2: reliable with restrictions | key study           |                                 |        |                 |   | 2003   | Exp Key Vapour pressure.001 |
| 73   | SIDS      | 7.29 Pa                            | 7.29             | 6.94714  | 20.69 °C                   |             |             |                               | key study           | experimental result (corrected) |        |                 |   | DeKruif CG, Kuipers T, Van Miltenburg JC, Scaake RCF and Stevens G(1982) The vapour pressure of solid and liquid naphthalene J. Chem. Thermodynamics 13, 1081-1086 (1982) (cited from HSE/UK 2003)   | p.8-9, 13                   |
| 74   |           | 10.42 Pa                           | 10.42            | 7.761675 | 24.27 °C                   |             |             |                               | key study           | experimental result (corrected) |        |                 |   |  | p.8-9, 13                   |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

水溶解度

収集データ

| 情報源名        | 水溶解度                         | 統一表記<br>[mg/L] | 20°Cにおける<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等  | GLP     | reliability | 情報源にお<br>けるキースタ<br>ディの該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキースタ<br>ディ | 備考                         | 文献   | ページ番号等  |
|-------------|------------------------------|----------------|----------------------------|------------|----|--|---------|-------------|--------------------------|--------|---------|------------|------------------------|----------------------------|--|---|
| 1 ATSDR     | 31.7 mg/L                    | 31.7           | 29.5921541                 | 25 °C      |    |  |         |             |                          |        |         | 2B         | ×                      | Mackayと同じ引用                | EPA. 1982e. Aquatic fate process data for organic priority pollutants. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency, Office of Water Regulations and Standards. EPA440481014.. | p.161   |
| 2 CCD       | [insoluble]                  | 単位換算不可         |                            |            |    | -  | -       | -           | -                        | -      |         | 3          | ×                      |                            |  | Naphthalene   |
| 3 CRC       | [insoluble]                  | 単位換算不可         |                            |            |    | -  | -       | -           | -                        | -      |         | 3          | ×                      | i_H_2 O                    |  | Physical Constants of Organic Compounds                                       |
| 4           | 0.0019 mass %                | 19.000361      | 21.9630836                 | 10 °C      |    | -  | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                      |                            | Solubility Data Series, International Union of Pure and Applied Chemistry, Vol. 38, Pergamon Press, Oxford, 1988.  | Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5) |
| 5           | 0.0082 mass %                | 82.0067246     | 56.030479                  | 50 °C      |    | -  | -       | -           | -                        | -      |         | 4A         | ×                      |                            | Solubility Data Series, International Union of Pure and Applied Chemistry, Vol. 38, Pergamon Press, Oxford, 1988.  | Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5) |
| 6           | 0.00316 mass %               | 31.6009986     | 29.4997356                 | 25 °C      |    | -  | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                      |                            | Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C, J. Phys. Chem. Ref. Data, 29, 41, 2000.   | Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5) |
| 7           | 0.0316 g/Kg                  | 31.6           | 29.4988034                 | 25 °C      |    | -  | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                      |                            | Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C, J. Phys. Chem. Ref. Data, 29, 41, 2000.   | Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5) |
| 8 EHC       | 31700 ug/L                   | 31.7           | 29.5921541                 | 25 °C      |    | -  | -       | -           | -                        | -      |         | 2B         | ×                      | Mackayと同じ引用                | Mackay D & Shiu WY (1977) Aqueous solubility of polynuclear aromatic hydrocarbons. J Chem Eng Data, 22: 399-402..  | 2.2 Physical and chemical properties Table 4                                  |
| 9 EPI Suite | 48.93 mg/L[2B以上の値を用いて推定(2C)] | 48.93          | 45.67647                   | 25 °C      |    | WSKOWWIN   |         |             |                          | (QSAR) |         | 2C         | ×                      |                            |  |   |
| 10 HSDB     | 31 mg/L                      | 31             | 28.9386996                 | 25 °C      |    |  |         |             |                          |        |         | 2B         | ×                      | Mackayと同じ引用                | Pearlman RS et al; J Chem Ref Data 13:555-562 (1984)   | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:                                 |
| 11 IUCLID   | 22 mg/L[of low solubility]   | 22             | 20.5371416                 | 25 °C      |    | その他, Fluorescence Method, detection limit: Naphthalene 0.03 µg/l | no data |             |                          |        |         | 4A         | ×                      | Naphthalene recrystallized |  | p.19  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度                                | 統一表記<br>[mg/L] | 20°Cにおける<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等  | GLP     | reliability | 情報源にお<br>けるキースタ<br>ディの該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキース<br>タディ | 備考   | 文献 | ページ番号等 |
|------|-------------------------------------|----------------|----------------------------|------------|----|--|---------|-------------|--------------------------|------|---------|------------|------------------------|--|----|--------|
| 12   | 31.69<br>mg/L[of low<br>solubility] | 31.69          | 29.582819                  | 25 °C      |    | その他,DCCLC<br>= dynamic<br>coupled column<br>liquid<br>chromatographi<br>c method with<br>saturated<br>solution,<br>analysis by UV<br>spectrophotom<br>etry | no data |             |                          |      |         | 4A         | ×                      | Commercial<br>naphthalene, min. 97 %<br>pure |    | p.21   |
| 13   | 31.69<br>mg/L[of low<br>solubility] | 31.69          | 29.582819                  | 25 °C      |    | その他,DCCLC<br>= dynamic<br>coupled column<br>liquid<br>chromatographi<br>c method with<br>saturated<br>solution,<br>analysis by UV<br>spectrophotom<br>etry | no data |             |                          |      |         | 4A         | ×                      | Commercial<br>naphthalene, min. 97 %<br>pure |    | p.21   |
| 14   | 31.69<br>mg/L[of low<br>solubility] | 31.69          | 29.582819                  | 25 °C      |    | その他,DCCLC<br>= dynamic<br>coupled column<br>liquid<br>chromatographi<br>c method with<br>saturated<br>solution,<br>analysis by UV<br>spectrophotom<br>etry | no data |             |                          |      |         | 4A         | ×                      | Commercial<br>naphthalene, min. 97 %<br>pure |    | p.22   |
| 15   | 31.7 mg/L[of<br>low<br>solubility]  | 31.7           | 29.5921541                 | 25 °C      |    | no data  | no data |             |                          |      |         | 4A         | ×                      |  |    | p.22   |
| 16   | 33 mg/L[of<br>low<br>solubility]    | 33             | 30.8057124                 | 25 °C      |    | no data  | no data |             |                          |      |         | 4A         | ×                      |  |    | p.22   |
| 17   | 33 mg/L[of<br>low<br>solubility]    | 33             | 30.8057124                 | 25 °C      |    | no data  | no data |             |                          |      |         | 4A         | ×                      |  |    | p.22   |
| 18   | 33 mg/L[of<br>low<br>solubility]    | 33             | 30.8057124                 | 25 °C      |    | no data  | no data |             |                          |      |         | 4A         | ×                      |  |    | p.22   |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度                             | 統一表記<br>[mg/L] | 20°Cにおける<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等   | GLP     | reliability | 情報源にお<br>けるキースタ<br>ディの該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価Ⅱにお<br>けるキースタ<br>ディ | 備考   | 文献 | ページ番号等 |
|------|----------------------------------|----------------|----------------------------|------------|----|---|---------|-------------|--------------------------|------|---------|------------|-----------------------|--|----|--------|
| 19   | 33.6 mg/L[of low solubility]     | 33.6           | 31.3658163                 | 25 °C      |    | その他,Saturated solution, UV spectrophotometry                      | no data |             |                          |      |         | 4A         | ×                     | Naphthalene, 4x recrystallized from ethanol and sublimed |    | p.22   |
| 20   | 34.4 mg/L[of low solubility]     | 34.4           | 32.1126215                 | 25 °C      |    | no data   | no data |             |                          |      |         | 4A         | ×                     | Commercial naphthalene, purified by vacuum distillation  |    | p.23   |
| 21   | 0                                | 単位換算不可         |                            |            |    |   |         |             |                          |      |         | 3          | ×                     |  |    | p.23   |
| 22   | 30[of low solubility]単位の記載なし]    | 単位換算不可         |                            | 25 °C      |    | その他,Fluorescence method, detection limit: 0.03 µg/l (naphthalene) | no data |             |                          |      |         | 3          | ×                     | Naphthalene pure > 99.9 mole %                           |    | p.19   |
| 23   | 30[of low solubility]単位の記載なし]    | 単位換算不可         |                            | 25 °C      |    | その他,Fluorescence method, detection limit: 0.03 µg/l (naphthalene) | no data |             |                          |      |         | 3          | ×                     | Naphthalene pure > 99.9 mole %                           |    | p.20   |
| 24   | 30[of low solubility]単位の記載なし]    | 単位換算不可         |                            | 25 °C      |    | その他,Fluorescence method, detection limit: 0.03 µg/l (naphthalene) | no data |             |                          |      |         | 3          | ×                     | Naphthalene pure > 99.9 mole %                           |    | p.20   |
| 25   | 30.25[of low solubility]単位の記載なし] | 単位換算不可         |                            | 25 °C      |    | その他,Fluorescence method, temperature range 8.4 – 31.8 °C          | no data |             |                          |      |         | 3          | ×                     | Naphthalene pure > 99.9 %                                |    | p.20   |
| 26   | 30.64 mg/L[of low solubility]    | 30.64          | 28.6026373                 | 25 °C      |    | その他,HPLC–Method   | no data |             |                          |      |         | 4A         | ×                     |  |    | p.20   |
| 27   | 31.2 mg/L[of low solubility]     | 31.2           | 29.1254009                 | 25 °C      |    | no data   | no data |             |                          |      |         | 4A         | ×                     |  |    | p.20   |
| 28   | 31.3 mg/L[of low solubility]     | 31.3           | 29.2187515                 | 25 °C      |    | その他,Extraction method with hexane, analysis by gas chromatography | no data |             |                          |      |         | 4A         | ×                     | Naphthalene, analytical grade                            |    | p.21   |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度                                 | 統一表記<br>[mg/L] | 20°Cにおける<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等   | GLP     | reliability | 情報源にお<br>けるキースタ<br>ディの該非 | 値の種類       | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価Ⅱにお<br>けるキース<br>タデー | 備考   | 文献  | ページ番号等  |
|------|--------------------------------------|----------------|----------------------------|------------|----|---|---------|-------------|--------------------------|------------|---------|------------|-----------------------|--|---|---|
| 29   | 31.3 mg/L[of<br>low<br>solubility]   | 31.3           | 29.2187515                 | 25 °C      |    | その他,Extraction<br>method with<br>hexane,<br>analysis by gas<br>chromatograph<br>y | no data |             |                          |            |         | 4A         | ×                     | Naphthalene, analytical<br>grade   |   | p.21  |
| 30   | IUPAC<br>0.00286<br>g(1)/100g<br>sln | 28.6           | 28.6601376                 | 293 K      |    | -   | -       | -           | -                        | 内挿(補<br>間) | -       | 4C         | ×                     | Sol. Power : 3   | Bohon, R.L.; Claussen, W.F., J. Am.<br>Chem. Soc. 1951, 73, 1571-8..  | Table 2. Recommended<br>(R) and Tentative Values<br>of the Solubility of<br>Naphthalene (1) in Water<br>(2) |
| 31   | 0.0028<br>g(1)/100g<br>sln           | 28             | 28.058876                  | 293 K      |    | -   | -       | -           | -                        | 内挿(補<br>間) | -       | 4C         | ×                     | Sol. Power : 3   | Wauchop, R.D.; Getzen, F.W., J.<br>Chem. Eng. Data 1972, 17(1), 38-<br>41..   | Table 2. Recommended<br>(R) and Tentative Values<br>of the Solubility of<br>Naphthalene (1) in Water<br>(2) |
| 32   | 0.00262<br>g(1)/100g<br>sln          | 26.2           | 26.2550911                 | 293 K      |    | -   | -       | -           | -                        | 内挿(補<br>間) | -       | 4C         | ×                     | Sol. Power : 3   | Schwarz, F.P., J. Chem. Eng. Data.<br>1977, 22, 273-7..   | Table 2. Recommended<br>(R) and Tentative Values<br>of the Solubility of<br>Naphthalene (1) in Water<br>(2) |
| 33   | Mackay<br>20.4 mg/L                  | 20.4           | 19.0435313                 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask  | -       | -           | -                        | -          | -       | 2B         | ×                     | -  | Sahyun, M.R.V. (1966) Binding of<br>aromatic compounds to bovine<br>serum albumin. Nature 209, 613-<br>614..  | p.623   |
| 34   | 30.25 mg/L                           | 30.25          | 28.2385697                 | 25 °C      |    | その他,25°C,<br>shake flask-<br>fluorescence,<br>measured<br>range 8.4-<br>31.8°C    | -       | -           | -                        | -          | -       | 2B         | ×                     | -  | Schwarz, F.P. (1977) Determination<br>of temperature dependence of<br>solubilities of polycyclic aromatic<br>hydrocarbons in aqueous solutions<br>by a fluorescence method. J. Chem.<br>Eng. Data 22, 273-277..         | p.623   |
| 35   | 31.69 mg/L                           | 31.69          | 29.582819                  | 25 °C      |    | その他,generator<br>column-<br>HPLC/UV,<br>measured temp<br>range 5-30°C             | -       | -           | -                        | -          | -       | 2B         | ×                     | 31.69 (generator<br>column-HPLC/UV,<br>measured temp range 5-<br>30°C, May et al. 1978)<br>S/(mg/kg) = 13.66 +<br>0.2499 · (t°C) + 0.0189 ·<br>(t°C) <sup>2</sup> ; temp range 5-<br>30°C (generator column-<br>HPLC/UV, May et al.<br>1978) | May, W.E., Wasik, S.P., Freeman,<br>D.H. (1978a) Determination of<br>aqueous solubility of polynuclear<br>aromatic hydrocarbons by coupled<br>column liquid chromatographic<br>technique. Anal. Chem. 50, 175-<br>179.. | p.623   |



基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度       | 統一表記<br>[mg/L] | 20°Cにおける<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源にお<br>けるキースタ<br>ディの該非 | 値の種類  | 値の種類の詳細            | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキースタ<br>ディ | 備考   | 文献   | ページ番号等 |
|------|------------|----------------|----------------------------|------------|----|--|-----|-------------|--------------------------|-------|--------------------|------------|------------------------|--|--|--------|
| 36   | 30.64 mg/L | 30.64          | 28.6026373                 | 25 °C      |    | その他,generator column-HPLC/UV                                   | -   | -           | -                        | -     | -                  | 2B         | ×                      | -  | Wasik, S.P., Miller, M.M., Teware, Y.B., May, W.E., Sonnefeld, W.J., DeVoe, H., Zoller, W.H. (1983) Determination of the vapor pressure, aqueous solubility, and octanol/water partition coefficient of hydrophobic substances by coupled generator column/ liq. | p.623  |
| 37   | 31.94 mg/L | 31.94          | 29.8161956                 | 25 °C      |    | その他,(25°C, generator column-HPLC/UV, measured range 8.2–27° C) | -   | -           | -                        | -     | -                  | 2B         | ×                      | 31.94* (25°C, generator column-HPLC/UV, measured range 8.2–27° C, May et al. 1983)<br>$R \cdot \ln x = -80.55/(\theta/K) + 28.7/[1/(\theta/K) - 1/(T/K)] + 0.31 \cdot \{(\theta/K)/(T/K) - 1 - \ln[(\theta/K)/(T/K)]\}$ , $\theta = 298.15$ K, temp range 8.2–27°C (generator column-HPLC/UV, May et al. 1983) | May, W.E., Wasik, S.P., Miller, M.M., Tewari, Y.B., Brown-Thomas, J.M., Goldberg, R.N. (1983) Solution thermodynamics of some slightly soluble hydrocarbons in water. J. Chem. Eng. Data 28, 197–200..   | p.623  |
| 38   | 32.2 mg/L  | 32.2           | 30.0589073                 | 25 °C      |    | -  | -   | -           | -                        | その他,- | average lit. value | 2B         | ○                      | 12個のデータがあり、うち外れ値4つを除いた8つのデータの平均値を採用  | Pearlman, R.S., Yalkowsky, S.H., Banerjee, S. (1984) Water solubilities of polynuclear aromatic and heteroaromatic compounds. J. Phys. Chem. Ref. Data 13(2), 555–562..  | p.623  |
| 39   | 32.9 mg/L  | 32.9           | 30.7123618                 | 25 °C      |    | その他,generator column-HPLC/fluorescence                         | -   | -           | -                        | -     | -                  | 2B         | ×                      | -  | Walters, R.W., Luthy, R.G. (1984) Equilibrium adsorption of polycyclic aromatic hydrocarbons from water onto activated carbon. Environ. Sci. Technol. 18(6), 395–403..   | p.623  |
| 40   | 30.75 mg/L | 30.75          | 28.6277993                 | 25.2 °C    |    | その他,shake flask-UV   | -   | -           | -                        | -     | -                  | 2B         | ×                      | 30.75* (25.2°C, shake flask-UV, Bennet & Canady 1984)<br>$\ln x = -1767.4601/R \cdot (T/K) + (17.95209/R) \cdot \ln(T/K) + 1$ ; temp range 2–45°C (shake flask-UV, Bennet & Canady 1984)   | Bennet, D., Canady, J. (1984) Thermodynamics of solution of naphthalene in various water-ethanol mixtures. J. Am. Chem. Soc.106,910–915..  | p.623  |
| 41   | 30.6 mg/L  | 30.6           | 28.565297                  | 25 °C      |    | その他,shake flask-HPLC/UV  | -   | -           | -                        | -     | -                  | 2B         | ×                      | -  | Fu, J.-K., Luthy, R.G. (1985) Aromatic compound solubility in solvent/water mixtures. J. Environ. Eng. 112, 328–346. Fu, J.-K., Luthy, R.G. (1985) Pollutant Sorption to Soils and Sediments in Organic/Aqueous Solvent Systems. NTIS P–85-242535. EPA/600/3–85. | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度       | 統一表記<br>[mg/L] | 20°Cにおける<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等                                     | GLP | reliability | 情報源にお<br>けるキースタ<br>ディの該非 | 値の種類  | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキースタ<br>ディ | 備考  | 文献  | ページ番号等 |
|------|------------|----------------|----------------------------|------------|----|---|-----|-------------|--------------------------|---|---------|------------|------------------------|---|---|--------|
| 42   | 31.12 mg/L | 31.12          | 29.0507203                 | 25 °C      |    | その他,vapor saturation-GC,                  | -   | -           | -                        | -   | -       | 2B         | ×                      |   | Akiyoshi, M., Deguchi, T., Sanemasa, I. (1987) The vapor saturation method for preparing aqueous solutions of solid aromatic hydrocarbons. Bull. Chem. Soc. Jpn. 60, 3935-3939.               | p.623  |
| 43   | 31.3 mg/L  | 31.3           | 29.2187515                 | 25 °C      |    | その他,generator column-HPLC/UV              | -   | -           | -                        | -   | -       | 2B         | ×                      | 31.3, 31.9 (generator column-HPLC/UV, Billington et al. 1988)   | Billington, J.W., Huang, G.L., Szeto, F., Shiu, W.Y., Mackay, D. (1988) Preparation of sparingly soluble organic substances: I. Single component systems. Environ. Toxicol. Chem. 7, 117-124. | p.623  |
| 44   | 33.47 mg/L | 33.47          | 31.2444605                 | 25 °C      |    | その他,shake flask-GC                        | -   | -           | -                        | -   | -       | 2B         | ×                      | Pearman et al. (1984) の採用値の一つ   | Gordon, J.E., Thorne, R.L. (1967) Salt effects on the activity coefficient of naphthalene in mixed aqueous electrolyte solutions. I. Mixtures of two salts. J. Phys. Chem. 71, 4390-4399.     | p.623  |
| 45   | 31.9 mg/L  | 31.9           | 29.7788554                 | 25 °C      |    | その他,generator column-HPLC/UV              | -   | -           | -                        | -   | -       | 2B         | ×                      | 31.3, 31.9 (generator column-HPLC/UV, Billington et al. 1988)   | Billington, J.W., Huang, G.L., Szeto, F., Shiu, W.Y., Mackay, D. (1988) Preparation of sparingly soluble organic substances: I. Single component systems. Environ. Toxicol. Chem. 7, 117-124. | p.623  |
| 46   | 31 mg/L    | 31             | 28.9386996                 | 25 °C      |    |   | -   | -           | -                        | その他,recommended, IUPAC Solubility Data Series | -       | 2B         | ×                      | 31* (recommended, IUPAC Solubility Data Series, Shaw 1989)  | Shaw, D.G., Editor (1989) IUPAC Solubility Data Series, Vol. 38: Hydrocarbons (C8 -C36) with Water and Seawater. Pergamon Press, Oxford, England..  | p.623  |
| 47   | 33.71 mg/L | 33.71          | 31.468502                  | 25 °C      |    | その他,shake flask-UV, measured range 5-40°C | -   | -           | -                        | -   | -       | 2B         | ×                      | 33.71* (shake flask-UV, measured range 5-40°C, Perez-Tejeda et al. 1990)<br>$\log [S/(\text{mol}/\text{dm}^3)] = -31.24 - 143.5/(T/K) + 4.772 \cdot \ln (T/K)$ ; temp range 5-40°C (shake flask-UV, Perez-Tejeda et al. 1990) | Perez-Tejeda, P., Yanes, C., Maestre, A. (1990) Solubility of naphthalene in water and alcohol solutions at various temperatures. J. Chem. Eng. Data 35, 244-246.                             | p.623  |
| 48   | 30.6 mg/L  | 30.6           | 28.565297                  | 25 °C      |    | その他,generator column-HPLC                 | -   | -           | -                        | -   | -       | 2B         | ×                      |   | Vadas, G.G., MacIntyre, W.G., Burris, D.R. (1991) Aqueous solubility of liquid hydrocarbon mixtures containing dissolved solid components. Environ. Toxicol. Chem. 10, 633-639.               | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度      | 統一表記<br>[mg/L] | 20°Cにおける<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源にお<br>けるキースタ<br>ディの該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価Ⅱにお<br>けるキースタ<br>ディ | 備考  | 文献   | ページ番号等 |
|------|-----------|----------------|----------------------------|------------|----|---|-----|-------------|--------------------------|------|---------|------------|-----------------------|---|--|--------|
| 49   | 29.9 mg/L | 29.9           | 27.9118425                 | 25 °C      |    | その他,dialysis<br>tubing<br>equilibration-<br>GC                  | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     |   | Etzweiler, F., Senn, E., Schmidt,<br>H.W.H. (1995) Method for measuring<br>aqueous solubilities of organic<br>compounds. Anal. Chem. 67,655-<br>658..  | p.623  |
| 50   | 34.8 mg/L | 34.8           | 32.486024                  | 25 °C      |    | その他,generator<br>column-<br>HPLC/fluoresce<br>nce               | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     | 34.8 (generator column-<br>HPLC/fluorescence, De<br>Maagd et al. 1998)                      | De Maagd, P.G.-J., ten Hulscher,<br>T.E.M., Van den Heuvel, H.,<br>Opperhuizen, A., Sijm, D.T.H.M.<br>(1998) Physicochemical properties of<br>polycyclic aromatic hydrocarbons:<br>aqueous solubilities, n-octanol/water<br>partition coefficients, and Henry's law<br>constants. En.  | p.623  |
| 51   | 30 mg/L   | 30             | 28.0051931                 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-<br>gravimetric,<br>measured<br>range 0-25°C | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     | 30.0* (shake flask-<br>gravimetric, measured<br>range 0-25°C, Hilpert<br>1916)<br>SIDSと同じ引用 | Hilpert, S. (1916) The solubility of<br>naphthalene in ammonia. A possible<br>cause for naphthalene stoppages.<br>Angew. Chem. 29, 57-59..   | p.623  |
| 52   | 31.5 mg/L | 31.5           | 29.4054528                 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-UV   | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     |   | Andrews, L.J., Keefer, R.M. (1949)<br>Cation complexes of compounds<br>containing carbon-carbon double<br>bonds. IV. The argentation of<br>aromatic hydrocarbons. J. Am.<br>Chem. Soc. 71, 3644-3647..   | p.623  |
| 53   | 12.5 mg/L | 12.5           | 11.6688305                 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-UV   | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     | <b>外れ値</b><br>Pearlman et al. (1984)<br>より  | Klevens, H.B. (1950) Solubilization of<br>polycyclic hydrocarbons. J. Phys.<br>Colloid Chem. 54, 283-298..   | p.623  |
| 54   | 34.4 mg/L | 34.4           | 32.1126215                 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-UV,<br>measured<br>range 2-42°C,             | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     | 34.4* (shake flask-UV,<br>measured range 2-42°C,<br>Bohon & Claussen 1951)                  | Bohon, R.L., Claussen, W.F. (1951)<br>The solubility of aromatic<br>hydrocarbons in water. J. Am. Chem.<br>Soc. 73, 1571-1578..  | p.623  |
| 55   | 38.4 mg/L | 38.4           | 38.4                       | 20 °C      |    | その他,20°C,<br>shake flask-UV                                     | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     | <b>外れ値</b><br>Pearlman et al. (1984)<br>より  | Eisenbrand, J., Baumann, K. (1970)<br>Über die bestimmung der<br>wasserlöslichkeit von coronen,<br>fluoranthen, perylen, picen, tetraacen<br>und triphenylen und über die bildung<br>wasserlöslicher komplexe dieser<br>kohlenwasserstoffe mit coffein.<br>Zeitschrift für Lebensmitt. | p.623  |
| 56   | 30.6 mg/L | 30.6           | 28.565297                  | 25 °C      |    |   | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     |   | Stephen, H., Stephen, D., Editors<br>(1963) Solubility of Inorganic and<br>Organic Compounds. Macmillan Co.,<br>New York..   | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度                         | 統一表記<br>[mg/L] | 20°Cにおける<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源にお<br>けるキースタ<br>ディの該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価Ⅱにお<br>けるキースタ<br>ディ | 備考   | 文献   | ページ番号等                       |
|------|------------------------------|----------------|----------------------------|------------|----|--|-----|-------------|--------------------------|------|---------|------------|-----------------------|--|--|------------------------------|
| 57   | 31.2 mg/L                    | 31.2           | 29.1254009                 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-UV,<br>measured<br>range 29-73.4°<br>C              | -   | -           | -                        | -    | 外挿(補外)? | 2B         | ×                     | 31.2* (shake flask-UV,<br>measured range 29-<br>73.4°C, Wauchope &<br>Getzen 1972)<br>R · ln x = -8690/(T/K) +<br>(0.000408)[(T/K) -<br>291.15]2 - 13.4 +<br>0.0139 · (T/K); temp<br>range 29.2-73.4°C<br>(shake<br>flask-UV, Wauchope &<br>Getzen 1972) | Wauchope, R.D., Getzen, F.W.<br>(1972) Temperature dependence of<br>solubilities in water and heats of<br>fusion of solid aromatic<br>hydrocarbons. J. Chem. Eng. Data<br>17, 38-41..  | p.623                        |
| 58   | 32.17 mg/L                   | 32.17          | 30.0309021                 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-UV  | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     | -  | Vesala, A. (1974) Thermodynamics<br>of transfer of nonelectrolytes from<br>light to heavy water. I. Linear free<br>energy correlations of free energy of<br>transfer with solubility and heat of<br>melting of a nonelectrolyte. Acta<br>Chemica Scand. A28, 839-845.. | p.623                        |
| 59   | 31.3 mg/L                    | 31.3           | 29.2187515                 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-GC  | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     | -  | Eganhouse, R.P., Calder, J.A. (1976)<br>The solubility of medium molecular<br>weight aromatic hydrocarbons and<br>the effects of hydrocarbon co-<br>solutes and salinity. Geochim.<br>Cosmochim. Acta 40, 555-561..  | p.623                        |
| 60   | 22 mg/L                      | 22             | 20.5371416                 | 25 °C      |    | その<br>他,fluorescence   | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     | -  | Schwarz, F.P., Wasik, S.P. (1976)<br>Fluorescence measurements of<br>benzene, naphthalene, anthracene,<br>pyrene, fluoranthene, and<br>benzo[a]pyrene in water. Anal.<br>Chem. 48, 524-528..   | p.623                        |
| 61   | 31.7 mg/L                    | 31.7           | 29.5921541                 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-<br>fluorescence                                    | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     | Pearlman et al. (1984)<br>の採用値の一つ  | Mackay, D., Shiu, W.Y. (1977)<br>Aqueous solubility of polynuclear<br>aromatic hydrocarbons. J. Chem.<br>Eng. Data 22, 399-402..   | p.623                        |
| 62   | 30 mg/L                      | 30             | 28.0051931                 | 25 °C      |    | その他,25°C,<br>shake flask-<br>fluorescence,<br>measured<br>range 8-31°C | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     | Pearlman et al. (1984)<br>の採用値の一つ  | Schwarz, F.P., Wasik, S.P. (1977) A<br>fluorescence method for the<br>measurement of the partition<br>coefficients of naphthalene, 1-<br>methylnaphthalene, and 1-<br>ethylnaphthalene in water. J. Chem.<br>Eng. Data 22, 270-273..                                   | p.623                        |
| 63   | Merck<br>[Insol in<br>water] | 単位換算不<br>可     |                            |            |    | -  | -   | -           | -                        | -    |         | 3          | ×                     | -  |  | Monograph Number:<br>0006370 |
| 64   | MOE初期評<br>価                  | 31             | 28.9386996                 | 25 °C      |    | -  | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                     | -  | Yalkowsky, S.H. and R.M.<br>Dannfleiser (1994): Aqueosol<br>Database of Aqueous Solubility.<br>Version 5. College of Pharmacy,<br>University of Arizona..  | p.1                          |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

水溶解度

収集データ

| 情報源名 | 水溶解度   | 統一表記<br>[mg/L] | 20°Cにおける<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH    | 試験方法等       | GLP | reliability                   | 情報源にお<br>けるキースタ<br>ディの該非 | 値の種類                | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価Ⅱにお<br>けるキースタ<br>ディ | 備考          | 文献  | ページ番号等                       |
|------|--|----------------|----------------------------|------------|-------|-------------|-----|-------------------------------|--------------------------|---------------------|---------|------------|-----------------------|-------------|---|------------------------------|
| 65   | 31.6<br>mg/1000 g                              | 31.6           | 29.4988034                 | 25 °C      |       | -           | -   | -                             | -                        | -                   | -       | 2B         | ×                     |             | Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM).   | p.1                          |
| 66   | 31 mg/L  | 31             | 28.9386996                 | 25 °C      |       | -           | -   | -                             | -                        | -                   | -       | 2B         | ×                     |             | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 108..                             | p.1                          |
| 67   | 31~34<br>mg/L                                  | 32.5           | 30.3389592                 | 25 °C      |       | -           | -   | -                             | -                        | -                   | -       | 2B         | ×                     |             | Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM). | p.1                          |
| 68   | PhysProp<br>31 mg/L                            | 31             | 28.9386996                 | 25 °C      |       | -           | -   | -                             | -                        | experimental result | -       | 2B         | ×                     | Mackayと同じ引用 | PEARLMAN,RS ET AL. (1984)   | p.1                          |
| 69   | REACH登録<br>情報<br>30.8~34.4<br>mg/L             | 32.6           | 30.4323099                 | 25 °C      | 7~7.5 | OECD TG 105 | no  | 2: reliable with restrictions | key study                | experimental result |         | 1B         | ×                     |             | 2003 Various sources from literature ^ (Report, Tab. 10)  | Exp Key Water solubility.001 |
| 70   | 31.7 mg/L                                      | 31.7           | 29.5921541                 | 25 °C      | 7~7.5 | OECD TG 105 | no  | 2: reliable with restrictions | key study                | experimental result |         | 1B         | ×                     | Mackayと同じ引用 | 2003 Mackay, D.; Shiu, W.Y. 1977: Aqueous solubility of polynuclear aromatic hydrocarbons. J. Chem. Eng. Data, 22, 399-402  | Exp Key Water solubility.001 |
| 71   | SIDS<br>0.03<br>g/L[Practical<br>ly insoluble] | 30             | 28.0051931                 | 25 °C      |       |             |     |                               | key study                |                     |         | 4A         | ○                     |             | Hilpert, 1916   | p.10, 13                     |
| 72   | 既存点検事<br>業<br>[不溶]                             | 単位換算不<br>可     |                            |            |       | -           | -   | -                             | -                        | -                   | -       | 3          | ×                     |             |   | K0058                        |
| 73   | 0.00003 g/g                                    | 30             | 26.2024336                 | 30 °C      |       | -           | -   | -                             | -                        | -                   | -       | 4A         | ×                     |             | 提示資料.   | K0058                        |
| 74   | 0.00003 g/g                                    | 30             | 26.2024336                 | 30 °C      |       | -           | -   | -                             | -                        | -                   | -       | 4A         | ×                     |             | 提示資料.   | K0058                        |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

logPow

収集データ

| 情報源名        | 値    | 統一表記 | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等  | GLP     | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                     | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキースタ<br>ディー | 備考                | 文献   | ページ番号等   |
|-------------|------|------|------------|----|--|---------|-------------|--------------------------|--------------------------|---------|------------|-------------------------|-------------------|--|--|
| 1 ATSDR     | 3.29 | 3.29 |            |    | -  | -       | -           | -                        | -                        |         | 2B         | ×                       |                   | EPA. 1982e. Aquatic fate process data for organic priority pollutants. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency, Office of Water Regulations and Standards. EPA440481014.. | p.161  |
| 2 CRC       | 3.34 | 3.34 | 25 °C      |    | -  | -       | -           | -                        | -                        |         | 2B         | ×                       |                   | Pinsuwan, S., Li, L., and Yalkowsky, S. H., J. Chem. Eng. Data, 40, 623, 1995..  | Octanol-Water Partition Coefficients (Section 16)                    |
| 3 EHC       | 3.4  | 3.4  |            |    | -  | -       | -           | -                        | -                        |         | 2B         | ×                       | Mackayと同じ引用       | Karickhoff SW, Brown DS, & Scott TA (1979) Sorption of hydrophobic   | 2.2 Physical and chemical properties                                 |
| 4 EPI Suite | 3.17 | 3.17 |            |    | KOWWIN                                       |         |             |                          | (Q)SAR                   |         | 2C         | ×                       |                   |  |  |
| 5 HSDB      | 3.3  | 3.3  |            |    |  |         |             |                          |                          |         | 2B         | ×                       | Mackayと同じ引用       | Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR -Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995., p. 66                               | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT: |
| 6 IUCLID    | 3.2  | 3.2  |            |    |  | no data |             |                          | estimated by calculation |         | 4C         | ×                       |                   |  | p.16   |
| 7           | 3.37 | 3.37 | 20 °C      |    | OECD TG 107                                  | no data |             |                          |                          |         | 1B         | ○                       |                   |  | p.18   |
| 8           | 3.4  | 3.4  |            |    |  | no data |             |                          | estimated by calculation |         | 4C         | ×                       |                   |  | p.18   |
| 9           | 3.45 | 3.45 |            |    |  | no data |             |                          | experimental result      |         | 4A         | ×                       |                   |  | p.18   |
| 10          | 3.57 | 3.57 |            |    | その他,calculated according to Molar refraction | no data |             |                          | estimated by calculation |         | 4C         | ×                       |                   |  | p.18   |
| 11          | 3.57 | 3.57 |            |    | その他,calculated according to Molar refraction | no data |             |                          | estimated by calculation |         | 4C         | ×                       |                   |  | p.18   |
| 12          | 3.57 | 3.57 |            |    | その他,calculated according to Molar refraction | no data |             |                          | estimated by calculation |         | 4C         | ×                       |                   |  | p.19   |
| 13          | 3.59 | 3.59 |            |    |  | no data |             |                          | experimental result      |         | 4A         | ×                       |                   |  | p.19   |
| 14          | 4.7  | 4.7  |            |    |  | no data |             |                          |                          |         | 4A         | ×                       | 外れ値<br>SIDSの記載による | Veith 1979 (SIDSの記載による)  | p.19   |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

logPow

収集データ

| 情報源名 | 値      | 統一表記 | 測定条件<br>温度 | pH    | 試験方法等   | GLP     | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキースタ<br>ディ | 備考  | 文献  | ページ番号等 |
|------|--------|------|------------|-------|---|---------|-------------|--------------------------|-----------------------------|---------|------------|------------------------|---|---|--------|
| 15   | 3.28   | 3.28 |            |       | その他,calculated<br>according to<br>ionization<br>potential | no data |             |                          | estimated by<br>calculation |         | 4C         | ×                      |   |   | p.16   |
| 16   | 3.28   | 3.28 |            |       | その他,calculated<br>according to<br>ionization<br>potential | no data |             |                          | estimated by<br>calculation |         | 4C         | ×                      |   |   | p.16   |
| 17   | 3.28   | 3.28 |            |       | その他,calculated<br>according to<br>ionization<br>potential | no data |             |                          | estimated by<br>calculation |         | 4C         | ×                      |   |   | p.17   |
| 18   | 3.3    | 3.3  | 20 °C      |       | OECD TG<br>107  | no data |             |                          |                             |         | 1B         | ×                      |   |   | p.17   |
| 19   | 3.31   | 3.31 | 20 °C      |       | OECD TG<br>107  | no data |             |                          |                             |         | 1B         | ○                      |   |   | p.17   |
| 20   | 3.35   | 3.35 |            |       | HPLC-<br>Method   | no data |             |                          | experimental<br>result      |         | 4A         | ×                      |   |   | p.17   |
| 21   | 3.35   | 3.35 | 25°C       |       | HPLC-<br>Method   | no data |             |                          | experimental<br>result      |         | 4A         | ×                      |   |   | p.17   |
| 22   | 3.36   | 3.36 |            |       |   | no data |             |                          |                             |         | 4A         | ×                      | No further data available                       |   | p.18   |
| 23   | Mackay | 3.43 | 3.43       | 25 °C | その他,HPLC-<br>RT<br>correlation                            | -       | -           | -                        | -                           |         | 2B         | ×                      | 3.43 (HPLC-RT<br>correlation, Edsforth<br>1986) | Eadsforth, C.V. (1986) Application of<br>reverse-phase HPLC for the<br>determination of partition<br>coefficients. Pestic. Sci. 17, 311-<br>325.  | p.623  |
| 24   |        | 3.29 | 3.29       | 25 °C | その他,HPLC-<br>RT<br>correlation                            | -       | -           | -                        | -                           |         | 2B         | ×                      | -   | Wang, L., Wang, X., Xu, O., Tian, L.<br>(1986) Determination of the n-<br>octanol/water partition coefficients of<br>polycyclic aromatic hydrocarbons by<br>HPLC and estimation of their<br>aqueous solubilities. Huanjing Kexue<br>Xuebao 6, 491-497.. | p.623  |
| 25   |        | 3.29 | 3.29       | 25 °C | その他,HPLC-<br>RT<br>correlation                            | -       | -           | -                        | -                           |         | 2B         | ×                      | -   | De Kock, A.C., Lord, D.A. (1987) A<br>simple procedure for determining<br>octanol-water partition coefficients<br>using reverse phase high<br>performance liquid chromatography<br>(RPHPLC). Chemosphere 16, 133-<br>142..                              | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

logPow

収集データ

| 情報源名 | 値    | 統一表記 | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>ギースタディ<br>の該非 | 値の種類                    | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるギースタ<br>ディー | 備考  | 文献  | ページ番号等 |
|------|------|------|------------|----|---|-----|-------------|--------------------------|-------------------------|---------|------------|-------------------------|---|---|--------|
| 26   | 3.3  | 3.3  | 25 °C      |    | その他,HPLC-<br>RT<br>correlation,   | -   | -           | -                        | その<br>他,average         | -       | 2B         | ×                       | 3.30 (average, HPLC-RT<br>correlation, Ge et al.<br>1987) | Ge, J., Liu, W., Dong, S. (1987)<br>Determination of partition coefficient<br>with chemically bonded omega-<br>hydroxysilica as HPLC column<br>packing. Sepu 5, 182-185.  | p.623  |
| 27   | 3.37 | 3.37 | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | -                       | -       | 2B         | ×                       | 3.37, 3.01, 3.45 (Leo et al.<br>1971)                     | Leo, A., Hansch, C., Elkins, D.<br>(1971) Partition coefficients and their<br>uses. Chemical Reviews 71, 525-<br>616.   | p.623  |
| 28   | 3.35 | 3.35 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-GC   | -   | -           | -                        | -                       | -       | 2B         | ×                       | -   | Opperhuizen, A. (1987)<br>Relationships between octan-1-<br>ol/water partition coefficients,<br>aqueous activity coefficients and<br>reversed phaseHPLC capacity<br>factors of alkylbenzenes,<br>chlorobenzenes, chloronaphthalenes<br>and chlorobiphenyls. Toxicol.<br>Environ. Chem.15. | p.623  |
| 29   | 3.23 | 3.23 | 25 °C      |    | その他,HPLC-<br>RT<br>correlation  | -   | -           | -                        | -                       | -       | 2B         | ×                       | -   | Minick, D.J., Frenz, J.H., Patrick,<br>M.A., Brent, D.A. (1988) A<br>comprehensive method for<br>determining hydrophobicity constants<br>by reversed-phase high-<br>performance liquid chromatography.<br>J. Med. Chem. 31, 1923-1933..   | p.623  |
| 30   | 3.29 | 3.29 | 25 °C      |    | その他,RP-<br>HPLC-RT<br>correlation,O<br>DS column<br>with masking<br>agent | -   | -           | -                        | -                       | -       | 2B         | ×                       | -   | Bechalany, A., Rothlisberger, T., El<br>Tayler, N., Testa, B. (1989)<br>Comparison of various non-polar<br>stationary phases used for assessing<br>lipophilicity. J. Chromatog. 473, 115-<br>124..  | p.623  |
| 31   | 3.35 | 3.35 | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | その<br>他,recommend<br>ed | -       | 2B         | ×                       | -   | Sangster, J. (1989) Octanol-water<br>partition coefficients of simple<br>organic compounds. J. Phys. Chem.<br>Ref. Data 18, 1111-1230..   | p.623  |
| 32   | 3.49 | 3.49 | 25 °C      |    | その<br>他,centrifugal<br>partition<br>chromatograp<br>hy                    | -   | -           | -                        | -                       | -       | 2B         | ×                       | -   | Menges, R.A., Bertrand, G.L.,<br>Armstrong, D.W. (1990) Direct<br>measurement of octanol-water<br>partition coefficients using centrifugal<br>partition chromatography with a<br>back-flushing technique. J. Liq.<br>Chromatogr. 13, 3061-3077..  | p.623  |



基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

logPow

収集データ

| 情報源名 | 値    | 統一表記 | 測定条件<br>温度 | pH  | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキースタ<br>ディー | 備考   | 文献  | ページ番号等 |
|------|------|------|------------|-----|--|-----|-------------|--------------------------|---------------------|---------|------------|-------------------------|--|---|--------|
| 33   | 3.36 | 3.36 | 25 °C      |     | その他,shake<br>flask-<br>HPLC/UV                     | -   | -           | -                        | -                   | -       | 2B         | ×                       | -  | Menges, R.A., Armstrong, D.W.<br>(1991) Use of a three-phase model<br>with hydroxypropyl-β-cyclodextrin for<br>the direct determination of large<br>octanol-water and cyclodextrin-water<br>partition coefficients. Anal. Chim.<br>Acta 255, 157-162. | p.623  |
| 34   | 3.3  | 3.3  | 25 °C      |     | その他,TLC-<br>RT<br>correlation                      | -   | -           | -                        | -                   | -       | 2B         | ×                       | -  | De Voogt, P., Van Zijl, G.A., Govers,<br>H., Brinkman, U.A.T. (1990)<br>Reversed-phase TLC and structure-<br>activity relationships of polycyclic<br>(hetero) aromatic hydrocarbons. J.<br>Planar Chromatog.-Mod. TLC 3, 24-<br>33.                   | p.623  |
| 35   | 3.7  | 3.7  | 25 °C      |     | その他,centrifugal<br>partition<br>chromatograp<br>hy | -   | -           | -                        | -                   | -       | 2B         | ×                       | SIDSと同じ引用  | Berthod, A., Menges, R.A.,<br>Armstrong, D.W. (1992) Direct<br>octanol-water partition coefficient<br>determination using co-current<br>chromatography. J. Liq. Chromatogr.<br>15, 2769-2785.   | p.623  |
| 36   | 3.37 | 3.37 | 25 °C      | 7.4 | その他,shake<br>flask-UV                              | -   | -           | -                        | -                   | -       | 2B         | ×                       | 3.37 (shake flask-UV, pH<br>7.4, Alcorn et al. 1993) | Alcorn, C.J., Simpson, R.J., Leahy,<br>D.E., Peters, T.J. (1993) Partition<br>and distribution coefficients of<br>solutes and drugs in brush border<br>membrane vesicles. Biochem<br>Pharmacol. 45, 1775-1782.  | p.623  |
| 37   | 3.3  | 3.3  | 25 °C      |     | -  | -   | -           | -                        | その他,recommend<br>ed | -       | 2B         | ×                       | -  | Hansch, C., Leo, A.J., Hoekman, D.<br>(1995) Exploring QSAR,<br>Hydrophobic, Electronic, and Steric<br>Constants. ACS Professional<br>Reference Book, American Chemical<br>Society, Washington, DC.   | p.623  |
| 38   | 3.45 | 3.45 | 25 °C      |     | -  | -   | -           | -                        | -                   | -       | 2B         | ×                       | 3.37, 3.01, 3.45 (Leo et al.<br>1971)                | Leo, A., Hansch, C., Elkins, D.<br>(1971) Partition coefficients and their<br>uses. Chemical Reviews 71, 525-<br>616.   | p.623  |
| 39   | 3.44 | 3.44 | 26 °C      |     | -  | -   | -           | -                        | その他,quoted          | -       | 2B         | ×                       | 3.44; 3.68 (26°C; 4°C,<br>quoted, Piatt et al. 1996) | Piatt, J.J., Backhus, D.A., Capel,<br>P.D., Eisenreich, S.J. (1996)<br>Temperature-dependent sorption of<br>naphthalene, phenanthrene, and<br>pyrene to low organic carbon aquifer<br>sediments. Environ. Sci. Technol. 30,<br>751-760.               | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

logPow

収集データ

| 情報源名 | 値                                      | 統一表記 | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>ギースタディ<br>の該非 | 値の種類                       | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価 II にお<br>けるギースタ<br>ディー | 備考   | 文献  | ページ番号等 |
|------|--|------|------------|----|---|-----|-------------|--------------------------|----------------------------|---------|------------|---------------------------|--|---|--------|
| 40   | 3.68                                   | 3.68 | 4 °C       |    | -   | -   | -           | -                        | その他,quoted                 | -       | 2B         | ×                         | 3.44; 3.68 (26°C; 4°C,<br>quoted, Piatt et al. 1996)   | Piatt, J.J., Backhus, D.A., Capel,<br>P.D., Eisenreich, S.J. (1996)<br>Temperature-dependent sorption of<br>naphthalene, phenanthrene, and<br>pyrene to low organic carbon aquifer<br>sediments. Environ. Sci. Technol. 30,<br>751-760..  | p.623  |
| 41   | 3.47                                   | 3.47 | 25 °C      |    | その他,HPLC-<br>k' correlation:<br>ODS column                        | -   | -           | -                        | -                          | -       | 2B         | ×                         | 3.47, 3.58; 3.40 (HPLC-k'<br>correlation: ODS column;<br>Diol column; quoted lit.<br>average, Helweg et al.<br>1997) | Helweg, C., Nielson, T., Hansen,<br>P.E. (1997) Determination of octanol-<br>water partition coefficients of polar<br>polycyclic aromatic (NPAC) by high<br>performance liquid chromatography.<br>Chemosphere 34, 1673-1684..   | p.623  |
| 42   | 3.58                                   | 3.58 | 25 °C      |    | その他,HPLC-<br>k' correlation::<br>Diol column;                     | -   | -           | -                        | -                          | -       | 2B         | ×                         | 3.47, 3.58; 3.40 (HPLC-k'<br>correlation: ODS column;<br>Diol column; quoted lit.<br>average, Helweg et al.<br>1997) | Helweg, C., Nielson, T., Hansen,<br>P.E. (1997) Determination of octanol-<br>water partition coefficients of polar<br>polycyclic aromatic (NPAC) by high<br>performance liquid chromatography.<br>Chemosphere 34, 1673-1684..   | p.623  |
| 43   | 3.4                                    | 3.4  | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | その他,quoted<br>lit. average | -       | 2B         | ×                         | 3.47, 3.58; 3.40 (HPLC-k'<br>correlation: ODS column;<br>Diol column; quoted lit.<br>average, Helweg et al.<br>1997) | Helweg, C., Nielson, T., Hansen,<br>P.E. (1997) Determination of octanol-<br>water partition coefficients of polar<br>polycyclic aromatic (NPAC) by high<br>performance liquid chromatography.<br>Chemosphere 34, 1673-1684..   | p.623  |
| 44   | 3.33[3.33<br>(range<br>3.24-<br>3.40)] | 3.33 | 25 °C      |    | その他,slow<br>stirring<br>method-<br>HPLC/fluo.                     | -   | -           | -                        | -                          | -       | 2B         | ×                         | 3.33 (range 3.24-3.40)<br>(slow stirring method-<br>HPLC/fluo., De Maagd et<br>al. 1998)                             | De Maagd, P.G.-J., ten Hulscher,<br>T.E.M., Van den Heuvel, H.,<br>Opperhuizen, A., Sijm, D.T.H.M.<br>(1998) Physicochemical properties<br>of polycyclic aromatic hydrocarbons:<br>aqueous solubilities, n-octanol/water<br>partition coefficients, and Henry's<br>law constants. En. | p.623  |
| 45   | 3.4                                    | 3.4  | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-dialysis<br>tubing-<br>HPLC/UV,<br>both phases | -   | -           | -                        | -                          | -       | 2B         | ×                         | -  | Andersson, J.T., Schröder, W.<br>(1999) A method for measuring 1-<br>octanol-water partition coefficients.<br>Anal. Chem. 71, 3610-3614..   | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

logPow

収集データ

| 情報源名 | 値     | 統一表記  | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>ギースタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細                        | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるギースタ<br>ディー | 備考   | 文献  | ページ番号等 |
|------|-------|-------|------------|----|---|-----|-------------|--------------------------|-----------------------------|--------------------------------|------------|-------------------------|--|---|--------|
| 46   | 3.77  | 3.77  | 25 °C      |    | その他,RP-<br>HPLC-RT<br>correlation,<br>short ODP<br>column | -   | -           | -                        | -                           | -                              | 2B         | ×                       | -  | Donovan, S.F., Pescatore, M.C. (2002) Method for measuring the logarithm of the octanol-water partition coefficient by using short octadecyl-poly-poly(vinyl alcohol) high-performance liquid chromatography columns. J. Chromatog. A, 952, 47-61.. | p.623  |
| 47   | 3.37  | 3.37  | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | calculated-<br>fragment const. | 4C         | ×                       | -  | Rekker, R.F. (1977) The Hydrophobic Fragmental Constant. Its Derivation and Application. A Means of Characterizing Membrane Systems. Elsevier Sci. Publishers Co., New York..   | p.623  |
| 48   | 3.395 | 3.395 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-<br>fluorometry                        | -   | -           | -                        | -                           | -                              | 2B         | ×                       | -  | Krishnamurthy, T., Wasik, S.P. (1978) Fluorometric determination of partition coefficient of naphthalene homologues in octanolwater mixtures. J. Environ. Sci. Health A13(8), 595-602..   | p.623  |
| 49   | 3.37  | 3.37  | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | その他,quoted                  | -                              | 2B         | ×                       | 3.30, 3.01, 3.37, 3.45, 3.59 (quoted, Hansch & Leo 1979) | Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, N.Y..  | p.623  |
| 50   | 3.45  | 3.45  | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | その他,quoted                  | -                              | 2B         | ×                       | 3.30, 3.01, 3.37, 3.45, 3.59 (quoted, Hansch & Leo 1979) | Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, N.Y..  | p.623  |
| 51   | 3.59  | 3.59  | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | その他,quoted                  | -                              | 2B         | ×                       | 3.30, 3.01, 3.37, 3.45, 3.59 (quoted, Hansch & Leo 1979) | Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, N.Y..  | p.623  |
| 52   | 3.37  | 3.37  | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask  | -   | -           | -                        | -                           | -                              | 2B         | ×                       | -  | Fujita, T., Iwasa, J., Hansch, C. (1964) A new substituent constant, "pi" derived from partition coefficients. J. Am. Chem. Soc. 86,5175-5180.  | p.623  |
| 53   | 3.3   | 3.3   | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | その他,quoted                  | -                              | 2B         | ×                       | 3.30, 3.01, 3.37, 3.45, 3.59 (quoted, Hansch & Leo 1979) | Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, N.Y..  | p.623  |
| 54   | 3.01  | 3.01  | 25 °C      |    | -   | -   | -           | -                        | その他,quoted                  | -                              | 2B         | ×                       | 3.30, 3.01, 3.37, 3.45, 3.59 (quoted, Hansch & Leo 1979) | Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, N.Y..  | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

logPow

収集データ

| 情報源名 | 値    | 統一表記 | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等                                   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキースタ<br>ディー | 備考 | 文献   | ページ番号等 |
|------|------|------|------------|----|---|-----|-------------|--------------------------|------|---------|------------|-------------------------|----|--|--------|
| 55   | 3.17 | 3.17 | 25 °C      |    | その他,HPLC-<br>RT<br>correlation          | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | -  | Veith, G.D., Austin, N.M., Morris, R.T. (1979a) A rapid method for estimation log P for organic chemicals. Water Res. 13, 43-47. .   | p.623  |
| 56   | 3.36 | 3.36 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask-UV,<br>concn. Ratio  | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | -  | Karickhoff, S.W., Brown, D.S., Scott, T.A. (1979) Sorption of hydrophobic pollutants on natural water sediments. Water Res. 13,241-248..   | p.623  |
| 57   | 3.21 | 3.21 | 25 °C      |    | その他,HPLC-<br>k' correlation             | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | -  | Hanai, T., Tran, C., Hubert, J. (1981) An approach to the prediction of retention times in liquid chromatography. J. High Resolution Chromatography & Chromatography Communication (J. HRC & CC) 4, 454-460..  | p.623  |
| 58   | 3.18 | 3.18 | 25 °C      |    | その他,HPLC-<br>k' correlation             | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | -  | D'Amboise, M., Hanai, T. (1982) Hydrophobicity and retention in reverse phase liquid chromatography. J. Liq. Chromatogr. 229-244..   | p.623  |
| 59   | 3.35 | 3.35 | 25 °C      |    | その<br>他,generator<br>column-<br>HPLC/UV | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | -  | Wasik, S.P., Miller, M.M., Teware, Y.B., May, W.E., Sonnefeld, W.J., DeVoe, H., Zoller, W.H. (1983) Determination of the vapor pressure, aqueous solubility, and octanol/water partition coefficient of hydrophobic substances by coupled generator column/liqu. | p.623  |
| 60   | 3.35 | 3.35 | 25 °C      |    | その他,RP-<br>TLC-k'<br>correlation        | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | -  | Bruggeman, W.A., Van Der Steen, J., Hutzinger, O. (1982) Reversed-phase thin-layer chromatography of polynuclear aromatic hydrocarbons and chlorinated biphenyls. Relationship with hydrophobicity as measured by aqueous solubility and octanolwater partition. | p.623  |
| 61   | 3.45 | 3.45 | 25 °C      |    | その他,HPLC-<br>RT<br>correlation          | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | -  | Hammers, W.E., Meurs, G.J., De Ligny, C.L. (1982) Correlations between liquid chromatographic capacity ratio data on Lichrosorb RP-18 and partition coefficients in the octanol-water system. J. Chromatogr. 247, 1-13..   | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

logPow

収集データ

| 情報源名 | 値    | 統一表記 | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等                       | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキースタ<br>ディー | 備考   | 文献   | ページ番号等 |
|------|------|------|------------|----|-----------------------------|-----|-------------|--------------------------|------|---------|------------|-------------------------|--|--|--------|
| 62   | 3.31 | 3.31 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask;         | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | 3.31; 3.35 (shake flask;<br>HPLC correlation,<br>Eadsforth & Moser 1983) | Eadsforth, C.V., Moser, P. (1983)<br>Assessment of reverse phase<br>chromatographic methods for<br>determining partition<br>coefficients.Chemosphere 12, 1459-<br>1475..   | p.623  |
| 63   | 3.01 | 3.01 | 25 °C      |    | -                           | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | 3.37, 3.01, 3.45 (Leo et al.<br>1971)                                    | Leo, A., Hansch, C., Elkins, D.<br>(1971) Partition coefficients and their<br>uses. Chemical Reviews 71, 525-<br>616.  | p.623  |
| 64   | 3.35 | 3.35 | 25 °C      |    | その他,HPLC<br>correlation     | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | 3.31; 3.35 (shake flask;<br>HPLC correlation,<br>Eadsforth & Moser 1983) | Eadsforth, C.V., Moser, P. (1983)<br>Assessment of reverse phase<br>chromatographic methods for<br>determining partition<br>coefficients.Chemosphere 12, 1459-<br>1475..   | p.623  |
| 65   | 3.36 | 3.36 | 25 °C      |    | その他,HPLC-<br>k' correlation | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | -  | Hafkenschied, T.L., Tomlinson, E.<br>(1983) Correlations between<br>alkane/water and octan-1-ol/water<br>distribution coefficients and<br>isocratic reversed-phase liquid<br>chromatographic capacity factors of<br>acids, bases and neutrals. Int'l J.<br>Pharmaceutics 16, 225-239.    | p.623  |
| 66   | 3.35 | 3.35 | 25 °C      |    | その他,shake<br>flask          | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | 3.35; 3.42 (shake flask;<br>ALPM, Garst & Wilson<br>1984)                | Garst, J.E., Wilson, W.C. (1984)<br>Accurate, wide-range, automated<br>high- performance liquid<br>chromatographic method for the<br>estimation of octanol/water partition<br>coefficients. I: Effect of<br>chromatographic conditions and<br>procedure variables on accuracy and<br>re. | p.623  |
| 67   | 3.42 | 3.42 | 25 °C      |    | その他,ALPM                    | -   | -           | -                        | -    |         | 2B         | ×                       | 3.35; 3.42 (shake flask;<br>ALPM, Garst & Wilson<br>1984)                | Garst, J.E., Wilson, W.C. (1984)<br>Accurate, wide-range, automated<br>high- performance liquid<br>chromatographic method for the<br>estimation of octanol/water partition<br>coefficients. I: Effect of<br>chromatographic conditions and<br>procedure variables on accuracy and<br>re. | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

logPow

収集データ

| 情報源名 | 値           | 統一表記 | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等                          | GLP | reliability | 情報源における<br>ギースタディ<br>の該非 | 値の種類                   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるギースタ<br>ディー | 備考          | 文献   | ページ番号等 |
|------|-------------|------|------------|----|--------------------------------|-----|-------------|--------------------------|------------------------|---------|------------|-------------------------|-------------|--|--------|
| 68   | 3.57        | 3.57 | 25 °C      |    | その他,HPLC-<br>RV<br>correlation | -   | -           | -                        | -                      | -       | 2B         | ×                       | -           | Garst, J.E., Wilson, W.C. (1984) Accurate, wide-range, automated high- performance liquid chromatographic method for the estimation of octanol/water partition coefficients. I: Effect of chromatographic conditions and procedure variables on accuracy and re. | p.623  |
| 69   | 3.38        | 3.38 | 25 °C      |    | その他,RP-<br>HPLC<br>correlation | -   | -           | -                        | -                      | -       | 2B         | ×                       | -           | Chin, Y.P., Weber Jr., W.J., Voice, T.C. (1986) Determination of partition coefficient and water solubilities by reversed phase chromatography. II. Evaluation of partitioning and solubility models. Water Res. 20, 1443-1450..                                 | p.623  |
| 70   | MOE初期評<br>価 | 3.3  |            |    | -                              | -   | -           | -                        | experimental<br>result | -       | 2B         | ×                       | Mackayと同じ引用 | Hansch, C., A. Leo and D. Hoekman (1995): Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. American Chemical Society..  | p.1    |
| 71   |             | 3.34 |            |    | -                              | -   | -           | -                        | -                      | -       | 2B         | ×                       | CRC2006から引用 | Lide, D.R. ed. (2006): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th Edition (CD-ROM Version 2006), Boca Raton, Taylor and Francis. (CD-ROM)..   | p.1    |
| 72   |             | 3.3  |            |    | -                              | -   | -           | -                        | -                      | -       | 2B         | ×                       | -           | Howard, P.H., and Meylan, W.M. ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers: 108..  | p.1    |
| 73   |             | 3.01 |            |    | -                              | -   | -           | -                        | -                      | -       | 2B         | ×                       | -           | Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM)..   | p.1    |
| 74   |             | 3.32 |            |    | -                              | -   | -           | -                        | -                      | -       | 2B         | ×                       | -           | Verschueren, K. ed. (2001): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th Edition, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, John Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM)..   | p.1    |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

logPow

収集データ

| 情報源名 | 値             | 統一表記 | 測定条件<br>温度 | pH    | 試験方法等 | GLP                                      | reliability | 情報源における<br>ギースタディ<br>の該非              | 値の種類                   | 値の種類の詳細                | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるギースタ<br>ディー | 備考          | 文献  | ページ番号等                               |
|------|---------------|------|------------|-------|-------|--|-------------|---------------------------------------|------------------------|------------------------|------------|-------------------------|-------------|---|--------------------------------------|
| 75   | 3.45          | 3.45 |            |       | -     | -  | -           | -                                     | -                      | -                      | 2B         | ×                       | -           | Verschueren, K. ed. (2001):<br>Handbook of Environmental Data on<br>Organic Chemicals, 4th Edition, New<br>York, Chichester, Weinheim,<br>Brisbane, Singapore, Toronto, John<br>Wiley & Sons, Inc. (CD-ROM).. | p.1                                  |
| 76   | PhysProp      | 3.3  | 3.3        |       | -     | -  | -           | -                                     | experimental<br>result | -                      | 2B         | ×                       | Mackayと同じ引用 | HANSCH,C ET AL. (1995).   | p.1                                  |
| 77   | REACH登録<br>情報 | 3.4  | 3.4        | 25 °C | 7.75  | OECD TG<br>107                           | no data     | 1: reliable<br>without<br>restriction | key study              | experimental<br>result | 1B         | ×                       | SIDSと同じ引用   | Sanemasa I and Shi WJ and Toshio<br>D<br>A method for determining the<br>octanol/water partition coefficients of<br>volatile hydrocarbons. Anal. Sci.<br>10(4), 655-657 (1994) (cited from<br>HSE/UK 2003)    | Exp Key Partition<br>coefficient.001 |
| 78   | SIDS          | 3.7  | 3.7        |       |       | その他,co-<br>current<br>chromatograp<br>hy |             |                                       | key study              | experimental<br>result | 2A         | ○                       |             | Berthod et al., 1992  | p.10, 13                             |
| 79   |               | 3.4  | 3.4        |       |       | OECD TG<br>107<br>(REACH登録<br>情報より)      |             |                                       | key study              | experimental<br>result | 2A         | ○                       |             | Sanemasa et al. (1994)  | p.10, 13                             |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

Koc

収集データ

| 情報源名        | 項目     | 値   | 統一表記<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH | 土壌条件                               | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源におけ<br>るキースタディ<br>の誌非 | 値の種類                   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るキースタ<br>ディ | 備考  | 文献  | ページ番号等              |
|-------------|--------|---|----------------|------------|----|------------------------------------|--|-----|-------------|--------------------------|------------------------|---------|------------|------------------------|---|---|---------------------|
| 1 ATSDR     | logKoc | 2.97                                      | 940            |            |    |                                    |  |     |             |                          |                        |         | 2B         | x                      |   | EPA. 1982e. Aquatic fate process data for organic priority pollutants. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency, Office of Water Regulations and Standards. EPA440481014..  | p.161               |
| 2 EPI Suite | Koc    | 791.4 L/kg[2B<br>以上の値を用<br>いて推定<br>(2C) ] | 791.4          |            |    |                                    | KOCWIN   |     |             |                          | (Q)SAR                 |         | 2C         | x                      |   |   |                     |
| 3 HSDB      | Koc    | 1300                                      | 1300           |            |    | sediment<br>samples in<br>soils    |  |     |             |                          |                        |         | 2B         | x                      |   | Karickhoff SW et al; Wat Res 13: 241-248 (1979)   | ENVIRONMENTAL FATE: |
| 4           | Koc    | 440~830[in 5<br>different soils]          | 635            |            |    |                                    |  |     |             |                          | experimental<br>result |         | 2B         | x                      |   | Kishi H et al; Chemosphere 21: 975-89 (1990)  | ENVIRONMENTAL FATE: |
| 5 Mackay    | logKoc | 3.05                                      | 1122.018454    |            |    |                                    | その他,RP-<br>HPLC-k'<br>correlation on<br>different<br>stationary<br>phases      |     |             |                          |                        |         | 2B         | x                      | 3.16, 3.05, 3.06 (RP-HPLC-<br>k' correlation on different<br>stationary phases, Szabo et<br>al. 1995)   | Szabo, G., Gucci, J., Bulman,<br>R.A. (1995) Examination of<br>silica-salicylic acid and silica-8-<br>hydroxyquinoline HPLC<br>stationary phases for<br>estimation of the adsorption<br>coefficient of soil for some<br>aromatic hydrocarbons.<br>Chemosphere 30, 1717-1727.. | p.623               |
| 6           | logKoc | 2.63                                      | 426.5795188    |            |    | Elliot soil<br>foc=0.029<br>0      | その他, batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence, |     |             |                          |                        |         | 2B         | ○                      | 2.61, 2.63, 2.68, 2.77, 2.76,<br>mean 2.69 ± 0.073 (soils:<br>Woodburn soil, Elliot soil,<br>Marlette soil, Piketon soil,<br>Anoka soil, batch<br>equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Chouiu et al.<br>1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269..  | p.623               |
| 7           | logKoc | 2.68                                      | 478.6300923    |            |    | Marlette<br>soil<br>foc=0.018<br>0 | その他, batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence, |     |             |                          |                        |         | 2B         | ○                      | 2.61, 2.63, 2.68, 2.77, 2.76,<br>mean 2.69 ± 0.073 (soils:<br>Woodburn soil, Elliot soil,<br>Marlette soil, Piketon soil,<br>Anoka soil, batch<br>equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Chouiu et al.<br>1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269..  | p.623               |
| 8           | logKoc | 2.77                                      | 588.8436554    |            |    | Piketon<br>soil<br>foc=0.014<br>9  | その他, batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence, |     |             |                          |                        |         | 2B         | ○                      | 2.61, 2.63, 2.68, 2.77, 2.76,<br>mean 2.69 ± 0.073 (soils:<br>Woodburn soil, Elliot soil,<br>Marlette soil, Piketon soil,<br>Anoka soil, batch<br>equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Chouiu et al.<br>1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269..  | p.623               |
| 9           | logKoc | 2.76                                      | 575.4399373    |            |    | Anoka soil<br>foc=0.010<br>8       | その他, batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence, |     |             |                          |                        |         | 2B         | ○                      | 2.61, 2.63, 2.68, 2.77, 2.76,<br>mean 2.69 ± 0.073 (soils:<br>Woodburn soil, Elliot soil,<br>Marlette soil, Piketon soil,<br>Anoka soil, batch<br>equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Chouiu et al.<br>1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269..  | p.623               |



基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

← Koc

収集データ

| 情報源名 | 項目     | 値                                    | 統一表記<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH | 土壌条件 | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の誌非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るキースタ<br>ディ | 備考   | 文献   | ページ番号等 |
|------|--------|--------------------------------------|----------------|------------|----|------|---|-----|-------------|--------------------------|------|---------|------------|------------------------|--|--|--------|
| 10   | logKoc | 2.69±<br>0.073[mean<br>2.69 ± 0.073] | 489.7788194    |            |    |      | その他.batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence, | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | x                      | 2.61, 2.63, 2.68, 2.77, 2.76,<br>mean 2.69 ± 0.073 (soils:<br>Woodburn soil, Elliot soil,<br>Marlette soil, Piketon soil,<br>Anoka soil, batch<br>equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Choiu et al.<br>1998)   | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269.. | p.623  |
| 11   | logKoc | 2.91                                 | 812.8305162    |            |    |      | その他.batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence  | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | x                      | 2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89,<br>2.95, 3.07; mean 2.88 ±<br>0.22 (sediments: Lake<br>Michigan, Mississippi River,<br>Massachusetts Bay,<br>Spectacle Island, Peddocks<br>Island, Port Point Channel,<br>batch equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Choiu et al.<br>1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269.. | p.623  |
| 12   | logKoc | 2.86                                 | 724.4359601    |            |    |      | その他.batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence  | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | x                      | 2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89,<br>2.95, 3.07; mean 2.88 ±<br>0.22 (sediments: Lake<br>Michigan, Mississippi River,<br>Massachusetts Bay,<br>Spectacle Island, Peddocks<br>Island, Port Point Channel,<br>batch equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Choiu et al.<br>1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269.. | p.623  |
| 13   | logKoc | 2.88                                 | 758.577575     |            |    |      | その他.batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence  | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | x                      | 2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89,<br>2.95, 3.07; mean 2.88 ±<br>0.22 (sediments: Lake<br>Michigan, Mississippi River,<br>Massachusetts Bay,<br>Spectacle Island, Peddocks<br>Island, Port Point Channel,<br>batch equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Choiu et al.<br>1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269.. | p.623  |
| 14   | logKoc | 2.87                                 | 741.3102413    |            |    |      | その他.batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence  | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | x                      | 2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89,<br>2.95, 3.07; mean 2.88 ±<br>0.22 (sediments: Lake<br>Michigan, Mississippi River,<br>Massachusetts Bay,<br>Spectacle Island, Peddocks<br>Island, Port Point Channel,<br>batch equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Choiu et al.<br>1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269.. | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

Koc

収集データ

| 情報源名 | 項目     | 値                                  | 統一表記<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH | 土壌条件 | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源における<br>ケーススタディ<br>の誌非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るケーススタ<br>ディ | 備考  | 文献   | ページ番号等 |
|------|--------|------------------------------------|----------------|------------|----|------|--|-----|-------------|---------------------------|------|---------|------------|-------------------------|---|--|--------|
| 15   | logKoc | 2.89                               | 776.2471166    |            |    |      | その他.batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence | -   | -           | -                         | -    |         | 2B         | x                       | 2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89,<br>2.95, 3.07; mean 2.88 ±<br>0.22 (sediments: Lake<br>Michigan, Mississippi River,<br>Massachusetts Bay,<br>Spectacle Island, Peddocks<br>Island, Port Point Channel,<br>batch equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Chou et al.<br>1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269.. | p.623  |
| 16   | logKoc | 2.75                               | 562.3413252    |            |    |      | その他.HPLC-<br>screening<br>method;  | -   | -           | -                         | -    |         | 2B         | x                       | -   | Muller, M., Kordel, W. (1996)<br>Comparison of screening<br>methods for the estimation of<br>adsorption coefficients on soil.<br>Chemosphere 32, 2493-2504..                           | p.623  |
| 17   | logKoc | 2.95                               | 891.2509381    |            |    |      | その他.batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence | -   | -           | -                         | -    |         | 2B         | x                       | 2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89,<br>2.95, 3.07; mean 2.88 ±<br>0.22 (sediments: Lake<br>Michigan, Mississippi River,<br>Massachusetts Bay,<br>Spectacle Island, Peddocks<br>Island, Port Point Channel,<br>batch equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Chou et al.<br>1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269.. | p.623  |
| 18   | logKoc | 3.07                               | 1174.897555    |            |    |      | その他.batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence | -   | -           | -                         | -    |         | 2B         | x                       | 2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89,<br>2.95, 3.07; mean 2.88 ±<br>0.22 (sediments: Lake<br>Michigan, Mississippi River,<br>Massachusetts Bay,<br>Spectacle Island, Peddocks<br>Island, Port Point Channel,<br>batch equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Chou et al.<br>1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269.. | p.623  |
| 19   | logKoc | 2.88±<br>0.22[mean<br>2.88 ± 0.22] | 758.577575     |            |    |      | その他.batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherms-<br>HPLC-<br>fluorescence | -   | -           | -                         | -    |         | 2B         | x                       | 2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89,<br>2.95, 3.07; mean 2.88 ±<br>0.22 (sediments: Lake<br>Michigan, Mississippi River,<br>Massachusetts Bay,<br>Spectacle Island, Peddocks<br>Island, Port Point Channel,<br>batch equilibrium-sorption<br>isotherms-HPLC-<br>fluorescence, Chou et al.<br>1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E.,<br>Kile, D. (1998) Partition<br>characteristics of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons on soils<br>and sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 32, 264-269.. | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

Koc

収集データ

| 情報源名 | 項目     | 値                          | 統一表記<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH | 土壌条件  | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の誌非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細   | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキース<br>タディ | 備考  | 文献   | ページ番号等 |
|------|--------|----------------------------|----------------|------------|----|---|--|-----|-------------|--------------------------|-----------------------------|---|------------|------------------------|---|--|--------|
| 20   | logKoc | 3.11[3.11 (3.00<br>-3.19)] | 1288.249552    |            |    | sediments:<br>Lake<br>Oostvaard<br>ersplassen | その他,shake<br>flask-<br>HPLC/UV   | -   | -           | -                        | -                           |   | 2B         | x                      | 3.11 (3.00-3.19), 2.80<br>(sediments: Lake<br>Oostvaardersplassen, Lake<br>Ketelmeer, shake flask-<br>HPLC/UV, de Maagd<br>et al. 1998) | De Maagd, P.G.-J., ten<br>Hulscher, T.E.M., Van den<br>Heuvel, H., Opperhuizen, A.,<br>Sijm, D.T.H.M. (1998)<br>Physicochemical properties<br>of polycyclic aromatic<br>hydrocarbons: aqueous<br>solubilities, n-octanol/water<br>partition coefficients, and<br>Henry's law constants.<br>En. | p.623  |
| 21   | logKoc | 2.8                        | 630.9573445    |            |    | sediments:<br>Lake<br>Ketelmeer               | その他,shake<br>flask-<br>HPLC/UV   | -   | -           | -                        | -                           |   | 2B         | x                      | 3.11 (3.00-3.19), 2.80<br>(sediments: Lake<br>Oostvaardersplassen, Lake<br>Ketelmeer, shake flask-<br>HPLC/UV, de Maagd<br>et al. 1998) | De Maagd, P.G.-J., ten<br>Hulscher, T.E.M., Van den<br>Heuvel, H., Opperhuizen, A.,<br>Sijm, D.T.H.M. (1998)<br>Physicochemical properties<br>of polycyclic aromatic<br>hydrocarbons: aqueous<br>solubilities, n-octanol/water<br>partition coefficients, and<br>Henry's law constants.<br>En. | p.623  |
| 22   | logKoc | 3.6                        | 3981.071706    |            |    | soil  | -  | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | calculated-<br>universal solvation<br>model                             | 4C         | x                      | 3.60; 3.10 (soil, calculated-<br>universal solvation model;<br>quoted exptl., Winget et al.<br>2000)                                    | Winget, P., Cramer, C.J.,<br>Truhlar, D.G. (2000) Prediction<br>of soil sorption coefficients<br>using a universal solvation<br>model. Environ. Sci. Technol.<br>34, 4733-4740.  | p.623  |
| 23   | logKoc | 3.1                        | 1258.925412    |            |    | soil  | -  | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | quoted exptl.   | 4C         | x                      | 3.60; 3.10 (soil, calculated-<br>universal solvation model;<br>quoted exptl., Winget et al.<br>2000)                                    | Winget, P., Cramer, C.J.,<br>Truhlar, D.G. (2000) Prediction<br>of soil sorption coefficients<br>using a universal solvation<br>model. Environ. Sci. Technol.<br>34, 4733-4740.  | p.623  |
| 24   | logKoc | 3.09~5.51                  | 19952.62315    |            |    | 11 urban<br>soils                             | -  | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | range, calculated<br>from sequential<br>desorption of 11<br>urban soils | 4C         | x                      | 3.09-5.51; 2.60-5.0 (range,<br>calculated from sequential<br>desorption of 11 urban soils;<br>lit. range, Krauss & Wilcke<br>2001)      | Krauss, M., Wilcke, W. (2001)<br>Predicting soil-water<br>partitioning of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons and<br>polychlorinated biphenyls by<br>desorption with methanol-water<br>mixtures at different<br>temperatures. Environ. Sci.<br>Technol. 35, 2319-2325.                         | p.623  |
| 25   | logKoc | 2.6~5                      | 6309.573445    |            |    | -   | -  | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | lit. range  | 4C         | x                      | 3.09-5.51; 2.60-5.0 (range,<br>calculated from sequential<br>desorption of 11 urban soils;<br>lit. range, Krauss & Wilcke<br>2001)      | Krauss, M., Wilcke, W. (2001)<br>Predicting soil-water<br>partitioning of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons and<br>polychlorinated biphenyls by<br>desorption with methanol-water<br>mixtures at different<br>temperatures. Environ. Sci.<br>Technol. 35, 2319-2325.                         | p.623  |
| 26   | logKoc | 3.11                       | 1288.249552    |            |    | natural<br>sediment                           | その他,average<br>sorption<br>isotherms by<br>batch<br>equilibrium<br>technique-UV<br>spec. | -   | -           | -                        | -                           |   | 2B         | x                      | -   | Kanickhoff, S.W., Brown, D.S.,<br>Scott, T.A. (1979) Sorption of<br>hydrophobic pollutants on<br>natural water sediments. Water<br>Res. 13,<br>241-248.  | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

Koc

収集データ

| 情報源名 | 項目     | 値                                    | 統一表記<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH      | 土壌条件   | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の誌非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るキースタ<br>ディ | 備考  | 文献   | ページ番号等 |
|------|--------|--------------------------------------|----------------|------------|---------|--|--|-----|-------------|--------------------------|------|---------|------------|------------------------|---|--|--------|
| 27   | logKoc | 4.06[4.06<br>(range 3.95-<br>4.15);] | 11481.53621    | 4°C        |         | low<br>organic<br>carbon<br>sediment<br>f_OC =<br>0.0002                 | その他.batch<br>equilibrium   | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | x                      | 4.06 (range 3.95-4.15);<br>2.08 (range 2.08-2.11) (4°<br>C, low organic carbon<br>sediment fOC = 0.0002,<br>batch<br>equilibrium; column exptl.,<br>Piatt et al. 1996)  | Piatt, J.J., Backhus, D.A.,<br>Capel, P.D., Eisenreich, S.J.<br>(1996) Temperature-dependent<br>sorption of naphthalene,<br>phenanthrene, and pyrene to<br>low organic carbon aquifer<br>sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 30, 751-760..  | p.623  |
| 28   | logKoc | 2.38                                 | 239.8832919    | 22°C       |         | suspended<br>particulate<br>s  | -  | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | x                      | 2.38 (22°C, suspended<br>particulates, Herbes et al.<br>1980)   | Herbes, S.E., Southworth,<br>G.R., Shaeffer, D.L., Griest,<br>W.H., Maskarinec, M.P. (1980)<br>Critical pathways of polycyclic<br>aromatic hydrocarbons in<br>aquatic environments. In: The<br>Scientific Basis of Toxicity<br>Assessment. Witschi, H. Editor,<br>pp. 113-128,Elsevier/. | p.623  |
| 29   | logKoc | 2.94                                 | 870.96359      |            |         | sediment/s<br>oil  | その他.sediment/s<br>oil, sorption<br>isotherm by<br>batch<br>equilibrium | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | x                      | -   | Karickhoff, S.W. (1981) Semi-<br>empirical estimation of sorption<br>of hydrophobic pollutants on<br>natural sediments and soils.<br>Chemosphere 10, 833-846..   | p.623  |
| 30   | logKoc | 3.62                                 | 4168.693835    |            | 4.5~5.5 | soil I-very<br>strongly<br>acid sandy<br>soil pH 4.5<br>-5.5             | その他.OECD<br>1981   | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | x                      | Sorption Partition<br>Coefficient, log KOC at 25°<br>C or as indicated;3.62,<br>3.87, 4.23 (soil I-very<br>strongly acid sandy soil pH<br>4.5-5.5, soil II-moderately<br>or slightly acid loamy<br>soil pH 5.6-6.5, soil III-<br>slightly alkaline loamy soil<br>pH 7.1-8.0, OECD 1981) | OECD (1981) OECD<br>Guidelines for Testing of<br>Chemicals. Section 1: Physical-<br>Chemical Properties.<br>Organization for Economic<br>Cooperation<br>and Development, Paris..   | p.623  |
| 31   | logKoc | 3.87                                 | 7413.102413    |            | 5.6~6.5 | soil II-<br>moderately<br>or slightly<br>acid<br>loamysoil<br>pH 5.6-6.5 | その他.OECD<br>1981   | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | x                      | Sorption Partition<br>Coefficient, log KOC at 25°<br>C or as indicated;3.62,<br>3.87, 4.23 (soil I-very<br>strongly acid sandy soil pH<br>4.5-5.5, soil II-moderately<br>or slightly acid loamy<br>soil pH 5.6-6.5, soil III-<br>slightly alkaline loamy soil<br>pH 7.1-8.0, OECD 1981) | OECD (1981) OECD<br>Guidelines for Testing of<br>Chemicals. Section 1: Physical-<br>Chemical Properties.<br>Organization for Economic<br>Cooperation<br>and Development, Paris..   | p.623  |
| 32   | logKoc | 4.23                                 | 16982.43652    |            | 7.1~8   | soil III-<br>slightly<br>alkaline<br>loamy soil                          | その他.OECD<br>1981   | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | x                      | Sorption Partition<br>Coefficient, log KOC at 25°<br>C or as indicated;3.62,<br>3.87, 4.23 (soil I-very<br>strongly acid sandy soil pH<br>4.5-5.5, soil II-moderately<br>or slightly acid loamy<br>soil pH 5.6-6.5, soil III-<br>slightly alkaline loamy soil<br>pH 7.1-8.0, OECD 1981) | OECD (1981) OECD<br>Guidelines for Testing of<br>Chemicals. Section 1: Physical-<br>Chemical Properties.<br>Organization for Economic<br>Cooperation and<br>Development, Paris..   | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

Koc

収集データ

| 情報源名 | 項目     | 値                                   | 統一表記<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH  | 土壌条件   | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の誌非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにお<br>けるキース<br>タデー | 備考  | 文献  | ページ番号等 |
|------|--------|-------------------------------------|----------------|------------|-----|--|--|-----|-------------|--------------------------|------|---------|------------|------------------------|---|---|--------|
| 33   | logKoc | 3.5                                 | 3162.27766     |            | 7   | Speyer<br>soils  | OECD TG 106<br>"Adsorption/D<br>esorption"<br>(SIDSの記載<br>による) | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | ○                      | Sorption Partition<br>Coefficient, log KOC at 25°<br>C or as indicated:3.50;<br>4.43; 3.21 (Speyer soils: pH<br>7.0, 0.69% OC; pH 5.8,<br>2.24% OC; pH 7.1, 1.12%<br>OC at 0.15–0.5 mm,<br>batch equilibrium-sorption<br>isotherm, Rippen et al.<br>1982)                   | Rippen, G., Ilgenstein, M.,<br>Klopper, W., Poreniski, H.J.<br>(1982) Screening of the<br>adsorption behavior of new<br>chemicals: natural soils and<br>model adsorbents. Ecotox.<br>Environ. Saf. 6, 236–245..                             | p.623  |
| 34   | logKoc | 4.43                                | 26915.34804    |            | 5.8 | Speyer<br>soils  | OECD TG 106<br>"Adsorption/D<br>esorption"<br>(SIDSの記載に<br>よる) | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | ×                      | Sorption Partition<br>Coefficient, log KOC at 25°<br>C or as indicated:3.50;<br>4.43; 3.21 (Speyer soils: pH<br>7.0, 0.69% OC; pH 5.8,<br>2.24% OC; pH 7.1, 1.12%<br>OC at 0.15–0.5 mm,<br>batch equilibrium-sorption<br>isotherm, Rippen et al.<br>1982)<br><b>外れ値より除外</b> | Rippen, G., Ilgenstein, M.,<br>Klopper, W., Poreniski, H.J.<br>(1982) Screening of the<br>adsorption behavior of new<br>chemicals: natural soils and<br>model adsorbents. Ecotox.<br>Environ. Saf. 6, 236–245..                             | p.623  |
| 35   | logKoc | 3.21                                | 1621.810097    |            | 7.1 | Speyer<br>soils  | OECD TG 106<br>"Adsorption/D<br>esorption"<br>(SIDSの記載に<br>よる) | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | ○                      | Sorption Partition<br>Coefficient, log KOC at 25°<br>C or as indicated:3.50;<br>4.43; 3.21 (Speyer soils: pH<br>7.0, 0.69% OC; pH 5.8,<br>2.24% OC; pH 7.1, 1.12%<br>OC at 0.15–0.5 mm,<br>batch equilibrium-sorption<br>isotherm, Rippen et al.<br>1982)                   | Rippen, G., Ilgenstein, M.,<br>Klopper, W., Poreniski, H.J.<br>(1982) Screening of the<br>adsorption behavior of new<br>chemicals: natural soils and<br>model adsorbents. Ecotox.<br>Environ. Saf. 6, 236–245..                             | p.623  |
| 36   | logKoc | 3.11                                | 1288.249552    |            | 7.5 | soils:<br>Alfisol<br>0.76% OC<br>at pH 7.5               | OECD TG 106<br>"Adsorption/D<br>esorption"<br>(SIDSの記載に<br>よる) | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | ○                      | Sorption Partition<br>Coefficient, log KOC at 25°<br>C or as indicated:3.11; 3.16<br>(soils: Alfisol 0.76% OC at<br>pH 7.5, Entisol 1.11% OC at<br>pH 7.9, batch equilibrium-<br>sorption<br>isotherm, Rippen et al.<br>1982)   | Rippen, G., Ilgenstein, M.,<br>Klopper, W., Poreniski, H.J.<br>(1982) Screening of the<br>adsorption behavior of new<br>chemicals: natural soils and<br>model adsorbents. Ecotox.<br>Environ. Saf. 6, 236–245..                             | p.623  |
| 37   | logKoc | 3.16                                | 1445.439771    |            | 7.9 | soils:<br>Entisol<br>1.11% OC<br>at pH 7.9               | OECD TG 106<br>"Adsorption/D<br>esorption"<br>(SIDSの記載に<br>よる) | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | ○                      | Sorption Partition<br>Coefficient, log KOC at 25°<br>C or as indicated:3.11; 3.16<br>(soils: Alfisol 0.76% OC at<br>pH 7.5, Entisol 1.11% OC at<br>pH 7.9, batch equilibrium-<br>sorption<br>isotherm, Rippen et al.<br>1982)   | Rippen, G., Ilgenstein, M.,<br>Klopper, W., Poreniski, H.J.<br>(1982) Screening of the<br>adsorption behavior of new<br>chemicals: natural soils and<br>model adsorbents. Ecotox.<br>Environ. Saf. 6, 236–245..                             | p.623  |
| 38   | logKoc | 2.08[2.08<br>(range 2.08–<br>2.11)] | 120.2264435    |            |     | low<br>organic<br>carbon<br>sediment<br>f_OC =<br>0.0002 | その<br>他.column<br>exptl.                                       | -   | -           | -                        | -    | -       | 2B         | ×                      | 4.06 (range 3.95–4.15);<br>2.08 (range 2.08–2.11) (4°<br>C, low organic carbon<br>sediment fOC = 0.0002,<br>batch<br>equilibrium; column exptl.,<br>Piatt et al. 1996)  | Piatt, J.J., Backhus, D.A.,<br>Capel, P.D., Eisenreich, S.J.<br>(1996) Temperature-dependent<br>sorption of naphthalene,<br>phenanthrene, and pyrene to<br>low organic carbon aquifer<br>sediments. Environ. Sci.<br>Technol. 30, 751–760.. | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

Koc

収集データ

| 情報源名 | 項目     | 値    | 統一表記<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH | 土壌条件   | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の誌非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細          | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るキースタ<br>ディ | 備考   | 文献   | ページ番号等 |
|------|--------|------|----------------|------------|----|--|---|-----|-------------|--------------------------|-----------------------------|------------------|------------|------------------------|--|--|--------|
| 39   | logKoc | 3.3  | 1995.262315    |            |    | Offshore<br>Grand<br>Haven<br>sediment           | その他.batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherm | -   | -           | -                        | -                           | -                | 2B         | ×                      |  | Voice, T.C., Weber Jr., W.J.<br>(1985) Sorbent concentration<br>effects in liquid/solid<br>partitioning. Environ. Sci.<br>Technol. 19(9), 789-796.   | p.623  |
| 40   | logKoc | 2.67 | 467.7351413    |            |    | Lula<br>aquifer<br>0.032%<br>OC                  | その他.batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherm | -   | -           | -                        | -                           | -                | 2B         | ×                      | 2.67, 2.77 (Lula aquifer<br>0.032% OC, Apalachee soil<br>1.4% OC, batch equilibrium-<br>sorption isotherm, Stauffer<br>& MacIntyre 1986) | Stauffer, T.B., MacIntyre, W.G.<br>(1986) Sorption of low-polarity<br>organic compounds on oxide<br>minerals and aquifer material.<br>Environ.Toxicol. Chem. 5, 949-<br>955.   | p.623  |
| 41   | logKoc | 2.77 | 588.8436554    |            |    | Apalachee<br>soil 1.4%<br>OC                     | その他.batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherm | -   | -           | -                        | -                           | -                | 2B         | ○                      | 2.67, 2.77 (Lula aquifer<br>0.032% OC, Apalachee soil<br>1.4% OC, batch equilibrium-<br>sorption isotherm, Stauffer<br>& MacIntyre 1986) | Stauffer, T.B., MacIntyre, W.G.<br>(1986) Sorption of low-polarity<br>organic compounds on oxide<br>minerals and aquifer material.<br>Environ.Toxicol. Chem. 5, 949-<br>955.   | p.623  |
| 42   | logKoc | 2.95 | 891.2509381    |            |    | sediment   | -   | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | calculated,      | 4C         | ×                      |  | Paviou, S.P. (1987) The use of<br>equilibrium partition approach<br>in determining safe levels of<br>contaminants in marine<br>sediments, p.388-412. In: Fate<br>and Effects of Sediments-<br>Bound Chemicals in Aquatic<br>Systems. Dickson, K.L., Maki,<br>A.W., Brungs, W.A.,<br>Editors. | p.623  |
| 43   | logKoc | 2.93 | 851.1380382    |            |    | sediment<br>4.02% OC<br>from<br>Tamar<br>estuary | その他.batch<br>equilibrium-<br>GC                   | -   | -           | -                        | -                           | -                | 2B         | ×                      |  | Vowles, P.D., Mantoura, R.F.C.<br>(1987) Sediment-water<br>partition coefficients and HPLC<br>retention factors of aromatic<br>hydrocarbons.Chemosphere<br>16, 109-116.  | p.623  |
| 44   | logKoc | 3.27 | 1862.087137    |            |    | -  | -   | -   | -           | -                        | estimated by<br>calculation | calculated-MCI x | 4C         | ×                      |  | Bahnick, D.A., Doucette, W.J.<br>(1988) Use of molecular<br>indices to estimate soil sorption<br>coefficients for organic<br>chemicals. Chemosphere<br>17(9), 1703-1715.   | p.623  |
| 45   | logKoc | 3.02 | 1047.128548    |            |    | -  | -   | -   | -           | -                        | その他,observed                | -                | 2B         | ×                      | 3.02; 2.89 (Aldrich and<br>Fluka humic acid, observed;<br>predicted, Chin et al. 1989)   | Chin, Y.-P., Weber, Jr., W.J.<br>(1989) Estimating the effects of<br>dispersed organic polymers on<br>the sorption contaminants by<br>natural solid, I. A predictive<br>thermodynamic humic<br>substance-organic solute<br>interaction model. Environ. Sci.<br>Technol. 23, 978-984.         | p.623  |
| 46   | logKoc | 2.89 | 776.2471166    |            |    | -  | -   | -   | -           | -                        | その他(推定<br>値),predicted      | -                | 4C         | ×                      | 3.02; 2.89 (Aldrich and<br>Fluka humic acid, observed;<br>predicted, Chin et al. 1989)   | Chin, Y.-P., Weber, Jr., W.J.<br>(1989) Estimating the effects of<br>dispersed organic polymers on<br>the sorption contaminants by<br>natural solid, I. A predictive<br>thermodynamic humic<br>substance-organic solute<br>interaction model. Environ. Sci.<br>Technol. 23, 978-984.         | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

Koc

収集データ

| 情報源名 | 項目     | 値                           | 統一表記<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH                      | 土壌条件                                      | 試験方法等                                   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の誌非 | 値の種類        | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るキースタ<br>ディ | 備考  | 文献   | ページ番号等 |
|------|--------|-----------------------------|----------------|------------|-------------------------|---|---|-----|-------------|--------------------------|-------------|---------|------------|------------------------|---|--|--------|
| 47   | logKoc | 2.73~3.91                   | 2089.296131    |            |                         | aquifer<br>materials                      | -                                       | -   | -           | -                        | -           | -       | 2B         | ×                      |   | Stauffer, T.B., MacIntyre, W.G., Wickman, D.C. (1989) Sorption of nonpolar organic chemicals on low-carbon-content aquifer materials. Environ. Toxicol. Chem. 8, 845-852..   | p.623  |
| 48   | logKoc | 5                           | 100000         |            |                         | sediments                                 | -                                       | -   | -           | -                        | その他,average | -       | 2B         | ×                      | 5.00 (sediments average, Kayal & Connell 1990)  | Kayal, S.I., Connell, D.W. (1990) Partitioning of unsubstituted polycyclic aromatic hydrocarbons between surface sediments and the water column in the Brisbane River estuary. Aust. J. Mar. Freshwater Res. 41, 443-456.. | p.623  |
| 49   | logKoc | 3.9[3.90 (range 3.81-4.00)] | 7943.282347    |            |                         | low organic carbon sediment f_OC = 0.0002 | その他.batch equilibrium                   | -   | -           | -                        | -           | -       | 2B         | ×                      | 3.90 (range 3.81-4.00); 2.11 (range 2.11-2.13) (26° C, low organic carbon sediment fOC = 0.0002, batch equilibrium; column exptl., Piatt et al. 1996) | Piatt, J.J., Backhus, D.A., Capel, P.D., Eisenreich, S.J. (1996) Temperature-dependent sorption of naphthalene, phenanthrene, and pyrene to low organic carbon aquifer sediments. Environ. Sci. Technol. 30, 751-760..     | p.623  |
| 50   | logKoc | 3.15                        | 1412.537545    |            |                         | Menlo Park soil                           | その他.batch equilibrium-sorption isotherm | -   | -           | -                        | -           | -       | 2B         | ×                      | 3.15, 2.76 (Menlo Park soil, Eustis sand, batch equilibrium-sorption isotherm, Podoll et al. 1989)  | Podoll, R.T., Irwin, K.C., Parish, H.J. (1989) Dynamic studies of naphthalene sorption on soil from aqueous solution. Chemosphere 18, 2399-2412..  | p.623  |
| 51   | logKoc | 2.76                        | 575.4399373    |            |                         | Eustis sand                               | その他.batch equilibrium-sorption isotherm | -   | -           | -                        | -           | -       | 2B         | ×                      | 3.15, 2.76 (Menlo Park soil, Eustis sand, batch equilibrium-sorption isotherm, Podoll et al. 1989)  | Podoll, R.T., Irwin, K.C., Parish, H.J. (1989) Dynamic studies of naphthalene sorption on soil from aqueous solution. Chemosphere 18, 2399-2412..  | p.623  |
| 52   | logKoc | 3.21                        | 1621.810097    | 15°C       | 5.7 (Delle Site 2001より) | Menlo Park soil 1.6% OC                   | その他.flow sorption equilibrium           | -   | -           | -                        | -           | -       | 2B         | ×                      | 3.21, 3.16, 3.10, 3.00 (15, 25, 35, 50°C, Menlo Park soil 1.6% OC, flow sorption equilibrium, Podoll et al. 1989)                                     | Podoll, R.T., Irwin, K.C., Parish, H.J. (1989) Dynamic studies of naphthalene sorption on soil from aqueous solution. Chemosphere 18, 2399-2412..  | p.623  |
| 53   | logKoc | 3.16                        | 1445.439771    | 25°C       | 5.7 (Delle Site 2001より) | Menlo Park soil 1.6% OC                   | その他.flow sorption equilibrium           | -   | -           | -                        | -           | -       | 2B         | ○                      | 3.21, 3.16, 3.10, 3.00 (15, 25, 35, 50°C, Menlo Park soil 1.6% OC, flow sorption equilibrium, Podoll et al. 1989)                                     | Podoll, R.T., Irwin, K.C., Parish, H.J. (1989) Dynamic studies of naphthalene sorption on soil from aqueous solution. Chemosphere 18, 2399-2412..  | p.623  |
| 54   | logKoc | 3.1                         | 1258.925412    | 35°C       | 5.7 (Delle Site 2001より) | Menlo Park soil 1.6% OC                   | その他.flow sorption equilibrium           | -   | -           | -                        | -           | -       | 2B         | ×                      | 3.21, 3.16, 3.10, 3.00 (15, 25, 35, 50°C, Menlo Park soil 1.6% OC, flow sorption equilibrium, Podoll et al. 1989)                                     | Podoll, R.T., Irwin, K.C., Parish, H.J. (1989) Dynamic studies of naphthalene sorption on soil from aqueous solution. Chemosphere 18, 2399-2412..  | p.623  |
| 55   | logKoc | 3                           | 1000           | 50°C       | 5.7 (Delle Site 2001より) | Menlo Park soil 1.6% OC                   | その他.flow sorption equilibrium           | -   | -           | -                        | -           | -       | 2B         | ×                      | 3.21, 3.16, 3.10, 3.00 (15, 25, 35, 50°C, Menlo Park soil 1.6% OC, flow sorption equilibrium, Podoll et al. 1989)                                     | Podoll, R.T., Irwin, K.C., Parish, H.J. (1989) Dynamic studies of naphthalene sorption on soil from aqueous solution. Chemosphere 18, 2399-2412..  | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

Koc

収集データ

| 情報源名 | 項目     | 値                            | 統一表記<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH | 土壌条件                                      | 試験方法等                                    | GLP | reliability | 情報源における<br>ケーススタディ<br>の誌非 | 値の種類   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るケースス<br>タディー | 備考  | 文献   | ページ番号等 |
|------|--------|------------------------------|----------------|------------|----|---|--|-----|-------------|---------------------------|--|---------|------------|--------------------------|---|--|--------|
| 56   | logKoc | 2.97                         | 933.2543008    |            |    | modified EPA-6 sediments                  | その他, batch equilibrium-sorption isotherm | -   | -           | -                         | -  | -       | 2B         | x                        | 2.97, 2.67 (modified, unmodified EPA-6 sediments, batch equilibrium-sorption isotherm, Podoll et al. 1989)  | Podoll, R.T., Irwin, K.C., Parish, H.J. (1989) Dynamic studies of naphthalene sorption on soil from aqueous solution. Chemosphere 18, 2399-2412..  | p.623  |
| 57   | logKoc | 2.67                         | 467.7351413    |            |    | unmodified EPA-6 sediments                | その他, batch equilibrium-sorption isotherm | -   | -           | -                         | -  | -       | 2B         | x                        | 2.97, 2.67 (modified, unmodified EPA-6 sediments, batch equilibrium-sorption isotherm, Podoll et al. 1989)  | Podoll, R.T., Irwin, K.C., Parish, H.J. (1989) Dynamic studies of naphthalene sorption on soil from aqueous solution. Chemosphere 18, 2399-2412..  | p.623  |
| 58   | logKoc | 3.11                         | 1288.249552    |            |    | soil                                      | その他, RP-HPLC-k' correlation,             | -   | -           | -                         | -  | -       | 2B         | x                        | -   | Szabo, G., Prosser, S.L., Bulman, R.A. (1990a) Prediction of the adsorption coefficient (KOC) for soil by a chemically immobilized humic acid column using RP-HPLC. Chemosphere 21, 729-739..  | p.623  |
| 59   | logKoc | 3.29                         | 1949.8446      |            |    | Eustis soil OC 0.74% (Delle Site 2001より)  | -  | -   | -           | -                         | -  | -       | 2B         | ○                        | -   | Wood, A.L., Bouchard, D.C., Brusseau, M.L., Rao, P.S.C. (1990) Cosolvent effects on sorption and mobility of organic contaminants in soil. Chemosphere 21, 575-587..   | p.623  |
| 60   | logKoc | 2.11[2.11 (range 2.11-2.13)] | 128.8249552    |            |    | low organic carbon sediment f_OC = 0.0002 | その他, column exptl.                       | -   | -           | -                         | -  | -       | 2B         | x                        | 3.90 (range 3.81-4.00); 2.11 (range 2.11-2.13) (26°C, low organic carbon sediment fOC = 0.0002, batch equilibrium; column exptl., Piatt et al. 1996)                | Piatt, J.J., Backhus, D.A., Capel, P.D., Eisenreich, S.J. (1996) Temperature-dependent sorption of naphthalene, phenanthrene, and pyrene to low organic carbon aquifer sediments. Environ. Sci. Technol. 30, 751-760..                 | p.623  |
| 61   | logKoc | 2.97                         | 933.2543008    |            |    | dissolved organic matter                  | -  | -   | -           | -                         | -  | -       | 2B         | x                        | -   | Kan, A.T., Tomson, M.B. (1990) Ground water transport of hydrophobic organic compounds in the presence of dissolved organic matter. Environ. Sci. Technol. 9, 253-263..  | p.623  |
| 62   | logKoc | 2.98                         | 954.992586     |            |    | sediment                                  | -  | -   | -           | -                         | その他, concn ratio C_sed/C_W   | -       | 2B         | x                        | 2.98; 2.965, 2.98 (sediment concn ratio Csed/CW; concn-based coeff., areal-based coeff. of flux studies of sediment/water boundary layer, Helmstetter & Alden 1994) | Helmstetter, M.F., Alden III, R.W. (1994) Release rates of polynuclear aromatic hydrocarbons from natural sediments and their relationship to solubility and octanol-water partitioning. Arch. Environ. Contam. Toxicol. 26, 282-291.. | p.623  |
| 63   | logKoc | 2.965                        | 922.5714272    |            |    | sediment                                  | -  | -   | -           | -                         | その他, concn-based coeff. of flux studies of sediment/water boundary layer | -       | 2B         | x                        | 2.98; 2.965, 2.98 (sediment concn ratio Csed/CW; concn-based coeff., areal-based coeff. of flux studies of sediment/water boundary layer, Helmstetter & Alden 1994) | Helmstetter, M.F., Alden III, R.W. (1994) Release rates of polynuclear aromatic hydrocarbons from natural sediments and their relationship to solubility and octanol-water partitioning. Arch. Environ. Contam. Toxicol. 26, 282-291.. | p.623  |



基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

Koc

収集データ

| 情報源名 | 項目     | 値    | 統一表記<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH | 土壌条件                       | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源における<br>ケーススタディ<br>の誌非 | 値の種類   | 値の種類の詳細  | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るケーススタ<br>ディ | 備考  | 文献   | ページ番号等 |
|------|--------|------|----------------|------------|----|----------------------------|--|-----|-------------|---------------------------|--|--|------------|-------------------------|---|--|--------|
| 64   | logKoc | 2.98 | 954.992586     |            |    | sediment                   |  |     |             |                           | その他, areal-based coeff. of flux studies of sediment/water boundary layer |  | 2B         | x                       | 2.98; 2.965; 2.98 (sediment concn ratio Csed/CW; concn-based coeff., areal-based coeff. of flux studies of sediment/water boundary layer, Helmstetter & Alden 1994) | Helmstetter, M.F., Alden III, R.W. (1994) Release rates of polynuclear aromatic hydrocarbons from natural sediments and their relationship to solubility and octanol-water partitioning. Arch. Environ. Contam. Toxicol. 26, 282-291..               | p.623  |
| 65   | logKoc | 3.11 | 1288.249552    |            |    |                            |  |     |             |                           | estimated by calculation   | calculated-MCI 1x                                    | 4C         | x                       |   | Sabljic, A., Gusten, H., Verhaar, H., Hermens, J. (1995) QSAR modelling of soil sorption, improvement and systematics of log KOC vs. log KOW correlations. Chemosphere 31, 4489-4514..   | p.623  |
| 66   | logKoc | 3.06 | 1148.153621    |            |    |                            | その他, RP-HPLC-k' correlation on different stationary phases |     |             |                           |  |  | 2B         | x                       | 3.16; 3.05; 3.06 (RP-HPLC-k' correlation on different stationary phases, Szabo et al. 1995)   | Szabo, G., Gucci, J., Bulman, R.A. (1995) Examination of silica-salicylic acid and silica-8-hydroxyquinoline HPLC stationary phases for estimation of the adsorption coefficient of soil for some aromatic hydrocarbons. Chemosphere 30, 1717-1727.. | p.623  |
| 67   | logKoc | 3.16 | 1445.439771    |            |    |                            | その他, RP-HPLC-k' correlation on different stationary phases |     |             |                           |  |  | 2B         | x                       | 3.16; 3.05; 3.06 (RP-HPLC-k' correlation on different stationary phases, Szabo et al. 1995)   | Szabo, G., Gucci, J., Bulman, R.A. (1995) Examination of silica-salicylic acid and silica-8-hydroxyquinoline HPLC stationary phases for estimation of the adsorption coefficient of soil for some aromatic hydrocarbons. Chemosphere 30, 1717-1727.. | p.623  |
| 68   | logKoc | 3.91 | 8128.305162    |            |    | A2 alluvial grassland soil | その他, batch equilibrium                                     |     |             |                           |  |  | 2B         | x                       | 3.91; 4.12; 4.06; 4.94 (20°C batch equilibrium, A2 alluvial grassland soil; calculated values of expt 1,2,3-solvophobic approach, Krauss & Wilcke 2001)             | Krauss, M., Wilcke, W. (2001) Predicting soil-water partitioning of polycyclic aromatic hydrocarbons and polychlorinated biphenyls by desorption with methanol-water mixtures at different temperatures. Environ. Sci. Technol. 35, 2319-2325..      | p.623  |
| 69   | logKoc | 4.94 | 87096.359      | 20°C       |    |                            |  |     |             |                           | estimated by calculation   | calculated values of expt 1,2,3-solvophobic approach | 4C         | x                       | 3.91; 4.12; 4.06; 4.94 (20°C batch equilibrium, A2 alluvial grassland soil; calculated values of expt 1,2,3-solvophobic approach, Krauss & Wilcke 2001)             | Krauss, M., Wilcke, W. (2001) Predicting soil-water partitioning of polycyclic aromatic hydrocarbons and polychlorinated biphenyls by desorption with methanol-water mixtures at different temperatures. Environ. Sci. Technol. 35, 2319-2325..      | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

Koc

収集データ

| 情報源名 | 項目     | 値    | 統一表記<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH   | 土壌条件                        | 試験方法等                     | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の誌非 | 値の種類                     | 値の種類の詳細  | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るキースタ<br>ディ | 備考  | 文献  | ページ番号等 |
|------|--------|------|----------------|------------|------|-----------------------------|---------------------------|-----|-------------|--------------------------|--------------------------|--|------------|------------------------|---|---|--------|
| 70   | logKoc | 4.12 | 13182.56739    | 20°C       |      |                             |                           |     |             |                          | estimated by calculation | calculated values of expt 1,2,3-solvophobic approach | 4C         | ×                      | 3.91; 4.12, 4.06, 4.94 (20°C batch equilibrium, A2 alluvial grassland soil; calculated values of expt 1,2,3-solvophobic approach, Krauss & Wilcke 2001) | Krauss, M., Wilcke, W. (2001) Predicting soil-water partitioning of polycyclic aromatic hydrocarbons and polychlorinated biphenyls by desorption with methanol-water mixtures at different temperatures. Environ. Sci. Technol. 35, 2319-2325.. | p.623  |
| 71   | logKoc | 3.74 | 5495.408739    |            |      |                             | その他, HPLC-k' correlation; |     |             |                          |                          |  | 2B         | ×                      | 3.74 (humic acid, HPLC-k' correlation; Nielsen et al. 1997)   | Nielson, T., Sigur, S., Helweg, C., Jorgensen, O., Hansen, O.E., Kirso, U. (1997) Sorption of polycyclic aromatic compounds to humic acid as studied by high-performance liquid chromatography. Environ. Sci. Technol. 37, 1102-1108..          | p.623  |
| 72   | logKoc | 4.06 | 11481.53621    | 20°C       |      |                             |                           |     |             |                          | estimated by calculation | calculated values of expt 1,2,3-solvophobic approach | 4C         | ×                      | 3.91; 4.12, 4.06, 4.94 (20°C batch equilibrium, A2 alluvial grassland soil; calculated values of expt 1,2,3-solvophobic approach, Krauss & Wilcke 2001) | Krauss, M., Wilcke, W. (2001) Predicting soil-water partitioning of polycyclic aromatic hydrocarbons and polychlorinated biphenyls by desorption with methanol-water mixtures at different temperatures. Environ. Sci. Technol. 35, 2319-2325.. | p.623  |
| 73   | logKoc | 2.91 | 812.8305162    |            |      | Soil                        |                           |     |             |                          | その他, average             |  | 2B         | ×                      | 2.91, 3.02, 2.71 (soils: organic carbon OC ≥ 0.1%, OC ≥ 0.5%, 0.1 ≤ OC < 0.5%, average, Delle Site 2001)<br>この論文が引用したデータの<br>一部を採用する                    | Delle Site, A. (2001) Factors affecting sorption of organic compounds in natural sorbent/water systems and sorption coefficients for selected pollutants. A review. J. Phys. Chem. Ref. Data 30, 187-439..                                      | p.623  |
| 74   | logKoc | 3.02 | 1047.128548    |            |      | Soil                        |                           |     |             |                          | その他, average             |  | 2B         | ×                      | 2.91, 3.02, 2.71 (soils: organic carbon OC ≥ 0.1%, OC ≥ 0.5%, 0.1 ≤ OC < 0.5%, average, Delle Site 2001)<br>同上  | Delle Site, A. (2001) Factors affecting sorption of organic compounds in natural sorbent/water systems and sorption coefficients for selected pollutants. A review. J. Phys. Chem. Ref. Data 30, 187-439..                                      | p.623  |
| 75   | logKoc | 2.71 | 512.861384     |            |      | Soil                        |                           |     |             |                          | その他, average             |  | 2B         | ×                      | 2.91, 3.02, 2.71 (soils: organic carbon OC ≥ 0.1%, OC ≥ 0.5%, 0.1 ≤ OC < 0.5%, average, Delle Site 2001)<br>同上  | Delle Site, A. (2001) Factors affecting sorption of organic compounds in natural sorbent/water systems and sorption coefficients for selected pollutants. A review. J. Phys. Chem. Ref. Data 30, 187-439..                                      | p.623  |
|      | logKoc | 2.73 | 537.0317964    | 20°C       | 4.89 | Soil<br>OC=10.4<br>%        |                           |     |             |                          |                          |  |            | ○                      | Delle Site(2001)に記載されているデータ<br>有機炭素含有率が併記してあるデータより採用  | H. Kishi, N. Kogure, and Y. Hashimoto, Chemosphere 21, 867 (1990)   |        |
|      | logKoc | 3    | 1000           |            | 4.6  | Apison soil<br>OC=0.11<br>% |                           |     |             |                          |                          |  |            | ○                      | Delle Site(2001)に記載されているデータ<br>有機炭素含有率が併記してあるデータより採用  | G. R. Southworth and J. L. Keller, Water Air Soil Pollut. 28, 239 (1986)  |        |
|      | logKoc | 2.6  | 398.1071706    |            | 4.2  | Dormont soil<br>OC=1.2%     |                           |     |             |                          |                          |  |            | ○                      | Delle Site(2001)に記載されているデータ<br>有機炭素含有率が併記してあるデータより採用  | G. R. Southworth and J. L. Keller, Water Air Soil Pollut. 28, 239 (1986)  |        |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

Koc

収集データ

| 情報源名 | 項目     | 値    | 統一表記<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH  | 土壌条件                     | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>ケーススタディ<br>の誌非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るケースス<br>タディー | 備考   | 文献  | ページ番号等 |
|------|--------|------|----------------|------------|-----|--------------------------|---|-----|-------------|---------------------------|------|---------|------------|--------------------------|--|---|--------|
| 76   | logKoc | 3.06 | 1148.153621    |            |     | sediments<br>OC ≥ 0.5%   | その他,average<br>values for<br>sediments OC<br>≥ 0.5%                         | -   | -           | -                         | -    |         | 2B         | x                        | 3.06 (average values for<br>sediments OC ≥ 0.5%, Delle<br>Site 2001) | Delle Site, A. (2001) Factors<br>affecting sorption of organic<br>compounds in natural<br>sorber/water systems and<br>sorption coefficients for<br>selected pollutants. A review.<br>J. Phys. Chem. Ref. Data 30,<br>187-439..    | p.623  |
| 77   | logKoc | 4.43 | 26915.34804    |            |     | soil humic<br>acid       | その他,shake<br>flask-<br>HPLC/UV  | -   | -           | -                         | -    |         | 2B         | x                        | 4.43 (soil humic acid, shake<br>flask-HPLC/UV, Cho et al.<br>2002)   | Cho, H.-H., Park, J.-W., Liu,<br>C.K. (2002) Effect of molecular<br>structures on the solubility<br>enhancement of hydrophobic<br>organic compounds by<br>environmental amphiphiles.<br>Environ. Toxicol. Chem. 21,<br>999-1003.. | p.623  |
| 78   | logKoc | 2.48 | 301.995172     | 20°C       | 5.8 | CSAC<br>OC: 1.4%         | その他,batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherm<br>measured by<br>HPLC/UV | -   | -           | -                         | -    |         | 2B         | ○                        | 元文献より  | Bayard, R., Bama, L., Mahjoub,<br>B., Gourdon, R. (1998)<br>Investigation of naphthalene<br>sorption in soils and soil<br>fractions using batch and<br>column assays. Environ.<br>Toxicol. Chem. 17, 2383-<br>2390..              | p.623  |
|      | logKoc | 2.46 | 288.4031503    | 20°C       | 6.9 | CSAP<br>OC: 3.2%         | その他,batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherm<br>measured by<br>HPLC/UV | -   | -           | -                         | -    |         | 2B         | ○                        | 元文献より  | Bayard, R., Bama, L., Mahjoub,<br>B., Gourdon, R. (1998)<br>Investigation of naphthalene<br>sorption in soils and soil<br>fractions using batch and<br>column assays. Environ.<br>Toxicol. Chem. 17, 2383-<br>2390..              |        |
|      | logKoc | 2.53 | 338.8441561    | 20°C       | 5.2 | Pequest<br>OC: 1.4%      | その他,batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherm<br>measured by<br>HPLC/UV | -   | -           | -                         | -    |         | 2B         | ○                        | 元文献より  | Bayard, R., Bama, L., Mahjoub,<br>B., Gourdon, R. (1998)<br>Investigation of naphthalene<br>sorption in soils and soil<br>fractions using batch and<br>column assays. Environ.<br>Toxicol. Chem. 17, 2383-<br>2390..              |        |
|      | logKoc | 2.5  | 316.227766     | 20°C       | 5.3 | Eurosoil III<br>OC: 3.4% | その他,batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherm<br>measured by<br>HPLC/UV | -   | -           | -                         | -    |         | 2B         | ○                        | 元文献より  | Bayard, R., Bama, L., Mahjoub,<br>B., Gourdon, R. (1998)<br>Investigation of naphthalene<br>sorption in soils and soil<br>fractions using batch and<br>column assays. Environ.<br>Toxicol. Chem. 17, 2383-<br>2390..              |        |
|      | logKoc | 2.52 | 331.1311215    | 20°C       | 7   | Eurosoil IV<br>OC: 1.5%  | その他,batch<br>equilibrium-<br>sorption<br>isotherm<br>measured by<br>HPLC/UV | -   | -           | -                         | -    |         | 2B         | ○                        | 元文献より  | Bayard, R., Bama, L., Mahjoub,<br>B., Gourdon, R. (1998)<br>Investigation of naphthalene<br>sorption in soils and soil<br>fractions using batch and<br>column assays. Environ.<br>Toxicol. Chem. 17, 2383-<br>2390..              |        |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

Koc

収集データ

| 情報源名 | 項目        | 値    | 統一表記<br>[L/kg]                          | 測定条件<br>温度 | pH  | 土壌条件   | 試験方法等  | GLP     | reliability                   | 情報源における<br>ケーススタディ<br>の誌非 | 値の種類                     | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るケーススタ<br>ディ | 備考   | 文献  | ページ番号等                              |
|------|-----------|------|---|------------|-----|--|--|---------|-------------------------------|---------------------------|--------------------------|---------|------------|-------------------------|--|---|-------------------------------------|
| 79   | logKoc    | 2.61 | 407.3802778                             |            |     | Woodburn soil foc=0.0126   | その他, batch equilibrium-sorption isotherms-HPLC-fluorescence,             | -       | -                             | -                         | -                        | -       | 2B         | ○                       | 2.61, 2.63, 2.68, 2.77, 2.76, mean 2.69 ± 0.073 (soils: Woodburn soil, Elliot soil, Marlette soil, Piketon soil, Anoka soil, batch equilibrium-sorption isotherms-HPLC-fluorescence, Chou et al. 1998) | Chiou, C.T., McGroddy, S.E., Kile, D. (1998) Partition characteristics of polycyclic aromatic hydrocarbons on soils and sediments. Environ. Sci. Technol. 32, 264-269.. | p.623                               |
| 80   | MOE初期評価   | Koc  | 378~3200[378~3,200 (幾何平均値により集計: 1,100)] | 1789       |     |  |  |         |                               |                           |                          |         | 2B         | x                       | SIDSの引用  | European Commission (2003): European Union Risk Assessment Report 1st Priority List Volume 33. Naphthalene..  | p.2                                 |
| 81   | REACH登録情報 | Koc  | 664 cm³/g                               | 664        | 5.2 | Texture Clay, <0.002 mm (%) 4.8 Silt, 0.002-0.02 mm (%) 3.8 Fine sand, 0.02-0.2 mm (%) 17.3 Coarse sand, 0.2-2 mm (%) 71.9<br><br>1.1% organic carbon (SIDSの記載による) |  | no data | 2: reliable with restrictions | key study                 | experimental result      |         | 4A         | ○                       |  | Lindhardt Bo, Christensen Thomas H. (1994) Measured And Estimated Volatilisation Of Naphthalene From a Sandy Soil. Chemosphere, Vol. 29, No. 7, pp. 1407-1419, 1994     | Exp Key Adsorption / desorption.001 |
| 85   |           | Koc  | 989                                     | 989        |     | Organic carbon content 0.18%   |  |         |                               |                           |                          |         |            | ○                       | SIDSに記載してあり有機炭素含有率が併記してあるデータより採用   | Klecka GM, Davis JW, Gray DR and Madsen SS (1990). Natural bioremediation of organic contaminants in groundwater: Cliffs-Dow Superfund site. Groundwater 28, 534-543.   | p.54                                |
|      |           | Koc  | 1250 L/kg                               | 1250       |     |  | その他, QSAR approach given in Chapter 4 of the Technical Guidance Document |         |                               | key study                 | estimated by calculation |         | 4C         | x                       |  |   | p.55                                |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

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<br>[Pa・m <sup>3</sup> /mol] | 測定条件<br>温度 | pH | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価における<br>キースタ<br>ディ | 備考  | 文献  | ページ番号等  |
|-------------|-------------------------------------|----------------------------------|------------|----|-------------|--------------------------|--------|---------|------------|----------------------|---|---|---|
| 1 ATSDR     | 0.00046 atm・<br>m <sup>3</sup> /mol | 46.6095                          |            |    | -           | -                        | -      | -       | 2B         | ○                    |   | EPA. 1982e. Aquatic fate process data for organic priority pollutants. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency, Office of Water Regulations and Standards. EPA440481014..  | p.161   |
| 2 CRC       | 0.043 kPa・m <sup>3</sup> /mol       | 43                               |            |    | -           | -                        | -      | -       | 3          | ○                    |   | Shiu, W.-Y., and Ma, K.-C. J. Phys. Chem. Ref. Data, 29, 41, 2000..   | Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5) |
| 3 EHC       | 0.0489 kPa                          | 0.006268002                      |            |    | -           | -                        | -      | -       | 2B         | ×                    | Mackayと同じ引用   | Mackay D, Shiu WY, & Sutherland RP (1979) Determination of air-   | 2.2 Physical and chemical properties  |
| 4 EPI Suite | 31 Pa・m <sup>3</sup> /mol           | 31                               |            |    |             |                          | (Q)SAR |         | 2C         | ×                    |   |   |   |
| 5 HSDB      | 4.4E-4 atm・m <sup>3</sup> /mol      | 44.583                           |            |    |             |                          |        |         | 2B         | ×                    | Mackayと同じ引用   | Shiu WY, Mackay D; J Chem Eng Data 42: 951-953 (1997)   | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:           |
| 6 Mackay    | 44.6 Pa・m <sup>3</sup> /mol         | 44.6                             |            |    | -           | -                        | -      | -       | 2B         | ×                    |   | Mackay, D., Shiu, W.Y., Bobra, A., Billington, J., Chau, E., Yeun, A., Ng, C., Szeto, F. (1982) Volatilization of Organic Pollutants from Water. EPA600/3-82-019. National Technical Information Service, Springfield, Virginia.. | p.623   |
| 7           | 62.5 Pa・m <sup>3</sup> /mol         | 62.5                             | 24.6°C     |    | -           | -                        | -      | -       | 2B         | ×                    | 26.2, 35.5, 48.1, 62.5, 77.7, 108.1 (9.2, 14.5, 20.1, 24.6, 30.5, 34.8°C, seawater with salinity of 35‰ (0.660M NaCl), gas stripping-GC, Alaei et al. 1996) | Alaei, M., Whittall, R.M., Strachan, W.M., J. (1996) The effect of water temperature and composition on Henry's law constant for various PAHs. Chemosphere 32, 1153-1164..  | p.623   |
| 8           | 77.7 Pa・m <sup>3</sup> /mol         | 77.7                             | 30.5°C     |    | -           | -                        | -      | -       | 2B         | ×                    | 26.2, 35.5, 48.1, 62.5, 77.7, 108.1 (9.2, 14.5, 20.1, 24.6, 30.5, 34.8°C, seawater with salinity of 35‰ (0.660M NaCl), gas stripping-GC, Alaei et al. 1996) | Alaei, M., Whittall, R.M., Strachan, W.M., J. (1996) The effect of water temperature and composition on Henry's law constant for various PAHs. Chemosphere 32, 1153-1164..  | p.623   |
| 9           | 108.1 Pa・m <sup>3</sup> /mol        | 108.1                            | 34.8°C     |    | -           | -                        | -      | -       | 2B         | ×                    | 26.2, 35.5, 48.1, 62.5, 77.7, 108.1 (9.2, 14.5, 20.1, 24.6, 30.5, 34.8°C, seawater with salinity of 35‰ (0.660M NaCl), gas stripping-GC, Alaei et al. 1996) | Alaei, M., Whittall, R.M., Strachan, W.M., J. (1996) The effect of water temperature and composition on Henry's law constant for various PAHs. Chemosphere 32, 1153-1164..  | p.623   |
| 10          | 44.6 Pa・m <sup>3</sup> /mol         | 44.6                             |            |    | -           | -                        | -      | -       | 2B         | ○                    | 44.6 (gas stripping-GC; calculated-P/C, Shiu & Mackay 1997)   | Shiu, W.-Y., Mackay, D. (1997) Henry's law constants of selected aromatic hydrocarbons, alcohols, and ketones. J. Chem. Eng. Data 42, 27-30..   | p.623   |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

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<br>[Pa・m <sup>3</sup> /mol] | 測定条件<br>温度 | pH | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                     | 値の種類の詳細  | 信頼性ラ<br>ンク | 評価Iにお<br>けるキース<br>タデー | 備考   | 文献   | ページ番号等 |
|------|-----------------------------|----------------------------------|------------|----|-------------|--------------------------|--------------------------|--|------------|-----------------------|--|--|--------|
| 11   | 45 Pa・m <sup>3</sup> /mol   | 45                               |            |    | -           | -                        | -                        |  | 2B         | ○                     | 45.0 (gas stripping-HPLC/flu., De Maagd et al. 1998) | De Maagd, P.G.-J., ten Hulscher, T.E.M., Van den Heuvel, H., Opperhuizen, A., Sijm, D.T.H.M. (1998) Physicochemical properties of polycyclic aromatic hydrocarbons: aqueous solubilities, n-octanol/water partition coefficients, and Henry's law constants. <i>Env.</i> | p.623  |
| 12   | 56 Pa・m <sup>3</sup> /mol   | 56                               |            |    | -           | -                        | -                        |  | 2B         | ×                     |  | Southworth, G.R. (1979) The role of volatilization in removing polycyclic aromatic hydrocarbons from aquatic environments. <i>Bull. Environ. Contam. Toxicol.</i> 21, 507-514..  | p.623  |
| 13   | 48.9 Pa・m <sup>3</sup> /mol | 48.9                             |            |    | -           | -                        | -                        |  | 2B         | ×                     |  | Mackay, D., Shiu, W.Y., Sutherland, R.P. (1979) Determination of air-water Henry's law constants for hydrophobic pollutants. <i>Environ. Sci. Technol.</i> 13, 333-337.  | p.623  |
| 14   | 57 Pa・m <sup>3</sup> /mol   | 57                               |            |    | -           | -                        | -                        |  | 2B         | ×                     | 57.0 (gas stripping-GC, Altschuh et al. 1999)        | Altschuh, J., Bruggemann, Santl, H., Eichinger, G., Piringer, O.G. (1999) Henry's law constants for a diverse set of organic chemicals: Experimental determination and comparison of estimation methods. <i>Chemosphere</i> 39, 1871-1887..                              | p.623  |
| 15   | 36.5 Pa・m <sup>3</sup> /mol | 36.5                             |            |    | -           | -                        | -                        |  | 2B         | ×                     |  | Yuteri, C., Ryan, D.F., Callow, J.J., Guroi, M.D. (1987) The effect of chemical composition of water on Henry's law constant. <i>J. Water Pollut. Control Fed.</i> 59, 950-956..   | p.623  |
| 16   | 74.3 Pa・m <sup>3</sup> /mol | 74.3                             |            |    | -           | -                        | -                        |  | 2B         | ×                     |  | Fendinger, N.J., Goltfelty, D.E. (1990) Henry's law constants for selected pesticides, PAHs and PCBs. <i>Environ. Toxicol. Chem.</i> 9, 731-735..  | p.623  |
| 17   | 124 Pa・m <sup>3</sup> /mol  | 124                              |            |    | -           | -                        | estimated by calculation | calculated-vapor-liquid equilibrium (VLE) data | 4C         | ×                     |  | Yaws, C.L., Yang, J.C., Pan, X. (1991) Henry's law constants for 362 organic compounds in water. <i>Chem. Eng.</i> November, 179-185.  | p.623  |
| 18   | 47.1 Pa・m <sup>3</sup> /mol | 47.1                             |            |    | -           | -                        | -                        |  | 2B         | ×                     |  | Zhang, Z., Pawliszyn, J. (1993) Headspace solid-phase microextraction. <i>Anal. Chem.</i> 65, 1843-1852..  | p.623  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

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<br>[Pa・m <sup>3</sup> /mol] | 測定条件<br>温度 | pH | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                   | 値の種類の詳細           | 信頼性ラ<br>ンク | 評価Iにおけ<br>るキースタ<br>ディ | 備考   | 文献   | ページ番号等 |
|------|---|----------------------------------|------------|----|-------------|--------------------------|------------------------|-------------------|------------|-----------------------|--|--|--------|
| 19   | 42.6 Pa・m <sup>3</sup> /mol                     | 42.6                             |            |    | -           | -                        | -                      |                   | 2B         | ×                     | 42.6* (gas stripping-GC, measured range 3.7-35.5°C, Alae et al. 1996)<br>ln KAW = 13.95 - 5364.45/(T/K), temp range: 3.7-35.5°C (gas stripping-GC, Alae et al. 1996) | Alae, M., Whittal, R.M., Strachan, W.M., J. (1996) The effect of water temperature and composition on Henry's law constant for various PAHs. Chemosphere 32, 1153-1164.. | p.623  |
| 20   | 26.2 Pa・m <sup>3</sup> /mol                     | 26.2                             | 9.2°C      |    | -           | -                        | -                      |                   | 2B         | ×                     | 26.2, 35.5, 48.1, 62.5, 77.7, 108.1 (9.2, 14.5, 20.1, 24.6, 30.5, 34.8°C, seawater with salinity of 35‰ (0.660M NaCl), gas stripping-GC, Alae et al. 1996)           | Alae, M., Whittal, R.M., Strachan, W.M., J. (1996) The effect of water temperature and composition on Henry's law constant for various PAHs. Chemosphere 32, 1153-1164.. | p.623  |
| 21   | 35.5 Pa・m <sup>3</sup> /mol                     | 35.5                             | 14.5°C     |    | -           | -                        | -                      |                   | 2B         | ×                     | 26.2, 35.5, 48.1, 62.5, 77.7, 108.1 (9.2, 14.5, 20.1, 24.6, 30.5, 34.8°C, seawater with salinity of 35‰ (0.660M NaCl), gas stripping-GC, Alae et al. 1996)           | Alae, M., Whittal, R.M., Strachan, W.M., J. (1996) The effect of water temperature and composition on Henry's law constant for various PAHs. Chemosphere 32, 1153-1164.. | p.623  |
| 22   | 48.1 Pa・m <sup>3</sup> /mol                     | 48.1                             | 20.1°C     |    | -           | -                        | -                      |                   | 2B         | ○                     | 26.2, 35.5, 48.1, 62.5, 77.7, 108.1 (9.2, 14.5, 20.1, 24.6, 30.5, 34.8°C, seawater with salinity of 35‰ (0.660M NaCl), gas stripping-GC, Alae et al. 1996)           | Alae, M., Whittal, R.M., Strachan, W.M., J. (1996) The effect of water temperature and composition on Henry's law constant for various PAHs. Chemosphere 32, 1153-1164.. | p.623  |
| 23   | PhysProp<br>0.00044 atm・<br>m <sup>3</sup> /mol | 44.583                           |            |    | -           | -                        | experimental<br>result | -                 | 2B         | ×                     | Mackayと同じ引用  | SHIU,WY & MACKAY,D (1997).   | p.1    |
| 24   | SIDS<br>26.75 Pa・m <sup>3</sup> /mol            | 26.75                            | 16.6°C     |    |             |                          | experimental<br>result | naphthalene as 90 | 2B         | ×                     |  | Schwartz and Wasik (1977)  | p.55   |
| 25   | 46.8 Pa・m <sup>3</sup> /mol                     | 46.8                             | 25.3°C     |    |             |                          | experimental<br>result | naphthalene as 53 | 2B         | ×                     |  | Schwartz and Wasik (1977)  | p.55   |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

解離定数

収集データ

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



基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

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 REACH登録情報 |     | 2%          | O_2 consumption    |       | OECD TG 302C | no  | 2: reliable with restrictions | key study        | experimental result |         |           | NITE National Institute of Technology and Evaluation, Japan(1979) Biodegradation and Bioconcentration of Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law - Naphthalene Chemical Inspection & Testing Institute (CITI), Japan(1992) Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan | Exp Key Biodegradation in water: screening tests.002 |
| 2           |     | 0%          | Test mat. analysis |       | OECD TG 302C | no  | 2: reliable with restrictions | key study        | experimental result |         |           | NITE National Institute of Technology and Evaluation, Japan(1979) Biodegradation and Bioconcentration of Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law - Naphthalene Chemical Inspection & Testing Institute (CITI), Japan(1992) Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan | Exp Key Biodegradation in water: screening tests.002 |
| 3 SIDS      |     | 2%          | O_2 consumption    |       | OECD TG 302C |     |                               |                  | experimental result |         |           |   | p.51   |
| 4 既存点検事業    |     | [揮散のため検出せず] | Test mat. analysis |       | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result |         | 揮散のため検出せず | 1975  | K0058  |
| 5           |     | 0.30%       | O_2 consumption    |       | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result |         | 揮散のため検出せず | 1975  | K0058  |
| 6           |     | [揮散のため検出せず] | Test mat. analysis |       | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result |         | 揮散のため検出せず | 1975  | K0058  |
| 7           |     | 0%          | Test mat. analysis |       | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result |         | -         | 1977  | K0058  |
| 8           |     | 0%          | O_2 consumption    |       | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result |         | -         | 1977  | K0058  |
| 9           |     | 0%          | Test mat. analysis |       | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result |         | -         | 1977  | K0058  |
| 10          |     | 2%          | O_2 consumption    |       | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result |         | -         | 1977  | K0058  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

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是非 | 値の種類                | 値の種類の詳細 | 信頼性ランク | 評価IIにおけるキースタディ | 備考 | 文献  | ページ番号等   |
|-------------|------|-------|--|------|--------|-------|-------------------------------------|-------------|--------------|-----|-------------------------------|------------------|---------------------|---------|--------|----------------|----|---|--|
| 1 EPI Suite |      | 1     |  |      | BCF    |       | 74.26 L/kg (wet) [2B以上の値を用いて推定(2C)] | 74.26       | BCFBAFWIN    |     |                               |                  | (Q)SAR              |         | 2C     | ×              |    |   |  |
| 2 REACH登録情報 |      | 1     | 0.003±0.002 mg/L [単位記載なしだったが、Nominal and measured concentrationsに3 µg/Lとあったため mg/Lとした] | 2週   | BCF    | 定常状態  | 30 無次元                              | 30          | OECD TG 305  | no  | 2: reliable with restrictions | supporting study | experimental result |         | 1B     | ×              |    | Roubal WT, Stranahan SI, and Malins DC(1978) The accumulation of low molecular weight aromatic hydrocarbon of crude oil by Coho salmon (Oncorhynchus kisutch) and starry flounder (Platichthys stellatus).  | Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.002 |
| 3           |      | 1     | 0.003±0.002 mg/L [単位記  | 5週   | BCF    | 定常状態  | 95 無次元                              | 95          | OECD TG 305  | no  | 2: reliable with restrictions | supporting study | experimental result |         | 1B     | ×              |    |   | Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic                |
| 4           | 低濃縮性 | 2     | 0.015 mg/L   | 8週   | BCF    | 定常状態  | 23~146 無次元                          | 84.5        | OECD TG 305  | no  | 2: reliable with restrictions | key study        | experimental result |         | 1B     | ×              |    | NITE National Institute of Technology and Evaluation, Japan(1979) Biodegradation and Bioconcentration of Existing Chemical Substances under the Chemical Substances Control Law - Naphthalene Chemical Inspection & Testing Institute (CITI), Japan(1992) Biodegradation and bioaccumulation data of existing chemicals based on the CSCL Japan | Exp Key Bioaccumulation: aquatic / sediment.001        |
| 5           | 低濃縮性 | 1     | 0.15 mg/L  | 8週   | BCF    | 定常状態  | 36.5~168 無次元                        | 102.25      | OECD TG 305  | no  | 2: reliable with restrictions | key study        | experimental result |         | 1B     | ×              |    |   | Exp Key Bioaccumulation: aquatic / sediment.001        |
| 6 SIDS      |      | 1     | 0.15 mg/L  |      | BCF    |       | 36.5~168                            | 102.25      | OECD TG 305C |     |                               |                  | experimental result |         | 1B     | ×              |    |   | p.59   |
| 7 既存点検事業    | -    | 1     | 0.015 ppm w/v  | 2週   | Rawデータ | -     | 23[参考値]                             | 23          | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result | -       | 1A     | ×              | -  |   | K0058  |
| 8           | -    | 1     | 0.015 ppm w/v  | 2週   | Rawデータ | -     | 28[参考値]                             | 28          | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result | -       | 1A     | ×              | -  |   | K0058  |
| 9           | -    | 1     | 0.015 ppm w/v  | 3週   | Rawデータ | -     | 38[参考値]                             | 38          | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result | -       | 1A     | ×              | -  |   | K0058  |
| 10          | -    | 1     | 0.015 ppm w/v  | 3週   | Rawデータ | -     | 77.9                                | 77.9        | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result | -       | 1A     | ×              | -  |   | K0058  |
| 11          | -    | 1     | 0.015 ppm w/v  | 4週   | Rawデータ | -     | 69.4                                | 69.4        | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result | -       | 1A     | ○              | -  |   | K0058  |
| 12          | -    | 1     | 0.015 ppm w/v  | 4週   | Rawデータ | -     | 50[参考値]                             | 50          | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result | -       | 1A     | ×              | -  |   | K0058  |
| 13          | -    | 1     | 0.015 ppm w/v  | 6週   | Rawデータ | -     | 146                                 | 146         | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result | -       | 1A     | ○              | -  |   | K0058  |
| 14          | -    | 1     | 0.015 ppm w/v  | 6週   | Rawデータ | -     | 38[参考値]                             | 38          | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result | -       | 1A     | ×              | -  |   | K0058  |
| 15          | -    | 1     | 0.015 ppm w/v  | 8週   | Rawデータ | -     | 64[参考値]                             | 64          | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result | -       | 1A     | ×              | -  |   | K0058  |
| 16          | -    | 1     | 0.015 ppm w/v  | 8週   | Rawデータ | -     | 130                                 | 130         | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result | -       | 1A     | ○              | -  |   | K0058  |
| 17          | -    | 2     | 0.15 ppm w/v   | 2週   | Rawデータ | -     | 39.3                                | 39.3        | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result | -       | 1A     | ×              | -  |   | K0058  |
| 18          | -    | 2     | 0.15 ppm w/v   | 2週   | Rawデータ | -     | 40.8                                | 40.8        | 化審法TG        | -   | -                             | -                | experimental result | -       | 1A     | ×              | -  |   | K0058  |

基本情報

|              |         |
|--------------|---------|
| 優先評価化学物質通し番号 | 76      |
| 物質名称         | ナフタレン   |
| CAS番号        | 91-20-3 |

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<br>[L/kg] | 試験方法等 | GLP | reliability | 情報源におけるキースタディ<br>の該当 | 値の種類                   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク | 評価IIにおけ<br>るキースタ<br>ディー | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|------|----|-------|-----------------|------|--------|-------|------|----------------|-------|-----|-------------|----------------------|------------------------|---------|------------|-------------------------|----|----|--------|
| 19   | -  | 2     | 0.15 ppm<br>w/v | 3 週  | Rawデータ | -     | 36.5 | 36.5           | 化審法TG | -   | -           | -                    | experimental<br>result | -       | 1A         | x                       | -  |    | K0058  |
| 20   | -  | 2     | 0.15 ppm<br>w/v | 3 週  | Rawデータ | -     | 45.1 | 45.1           | 化審法TG | -   | -           | -                    | experimental<br>result | -       | 1A         | x                       | -  |    | K0058  |
| 21   | -  | 2     | 0.15 ppm<br>w/v | 4 週  | Rawデータ | -     | 70.9 | 70.9           | 化審法TG | -   | -           | -                    | experimental<br>result | -       | 1A         | x                       | -  |    | K0058  |
| 22   | -  | 2     | 0.15 ppm<br>w/v | 4 週  | Rawデータ | -     | 61   | 61             | 化審法TG | -   | -           | -                    | experimental<br>result | -       | 1A         | x                       | -  |    | K0058  |
| 23   | -  | 2     | 0.15 ppm<br>w/v | 6 週  | Rawデータ | -     | 79.8 | 79.8           | 化審法TG | -   | -           | -                    | experimental<br>result | -       | 1A         | x                       | -  |    | K0058  |
| 24   | -  | 2     | 0.15 ppm<br>w/v | 6 週  | Rawデータ | -     | 103  | 103            | 化審法TG | -   | -           | -                    | experimental<br>result | -       | 1A         | x                       | -  |    | K0058  |
| 25   | -  | 2     | 0.15 ppm<br>w/v | 8 週  | Rawデータ | -     | 168  | 168            | 化審法TG | -   | -           | -                    | experimental<br>result | -       | 1A         | x                       | -  |    | K0058  |
| 26   | -  | 2     | 0.15 ppm<br>w/v | 8 週  | Rawデータ | -     | 111  | 111            | 化審法TG | -   | -           | -                    | experimental<br>result | -       | 1A         | x                       | -  |    | K0058  |