

(案)

優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

n－ヘキサン

優先評価化学物質通し番号 3



令和 2 年 1 月

経済産業省

目 次

1		
2		
3	1 評価対象物質の性状	1
4	1-1 物理化学的性状及び濃縮性	1
5	1-2 分解性	1
6	2 【付属資料】	6
7	2-1 物理化学的性状等一覧	6
8	2-2 その他	7
9		
10		
11		

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

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

表 1-1 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ※

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	—	86.17	—	86.17
融点	°C	-95.3 ^{1,2)}	測定値か推計値については記載なし	-95.3 ^{1,2)}
沸点	°C	68.73 ^{3,4)}	標準圧力(1,013 hPa)での測定値の算術平均値	68.73 ^{3,4)}
蒸気圧	Pa	<u>1.62 × 10⁴</u> ⁵⁾	複数の温度における測定値に基づく回帰式から 20 °C に内挿した値の平均値	1.43 × 10 ⁴ ⁵⁾
水に対する溶解度	mg/L	<u>12</u> ^{5,6)}	20 °C での測定値	9.3 ⁷⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	3.9 ^{2,5,8)}	測定値	3.9 ^{2,8)}
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	<u>1.35 × 10⁵</u> ⁵⁾	20 °C での測定値	1.68 × 10 ⁵ ^{5,9)}
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	<u>132</u> ¹⁰⁾	KOCWIN ¹⁰⁾ による推計値(MCI 法)	397 ^{9,11)}
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	174	BCFBAF ¹⁰⁾ による推計値	174
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ¹²⁾	1
解離定数(pKa)	—	—	解離性の基を有さない物質	— ¹³⁾

※平成 29 年度第 1 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 29 年 5 月 25 日)で了承された値

1) 環境省(2002)

2) PhysProp

3) CRC

4) CCD

5) Mackay(2006)

6) IUPAC

7) 通商産業省(1996)

8) HSDB

9) ATSDR(1999)

10) EPI Suite(2012)

11) EHC(1991)

12) MHLW, METI, MOE(2014)

13) 評価Ⅰにおいては解離定数を考慮しない

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で採用した値は、環境省（2002）及び PhysProp に記載された値である。他の信頼性の定まった情報源¹における記載データも、ほぼ同様であったことから、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同じ値（-95.3℃）を用いる。

② 沸点

評価Ⅰで採用した値は、CRC 及び CCD に記載された、標準圧力(1,013 hPa) における値の算術平均値である。他の信頼性の定まった情報源等における記載データも、ほぼ同様であったことから、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同じ値（68.73℃）を用いる。

③ 蒸気圧

評価Ⅰで採用した値は、信頼性の定まった情報源に記載の 20~25℃における蒸気圧データの中央値であった。

評価Ⅱにおいては Mackay (2006)における複数の測定値に基づく 2つの回帰式から 20℃に内挿した値の平均値（ 1.62×10^4 Pa）を用いる。

④ 水に対する溶解度

評価Ⅰで採用した値（9.3 mg/L）は OECD TG 105 によって測定された値（10 mg/L 以下、 $25 \pm 1^\circ\text{C}$ ）（通商産業省, 1996）を、10 mg/L と仮定し、20℃における値に補正したものである。評価Ⅰで採用した値は確定値ではないため、評価Ⅱにおいては Mackay (2006)に記載された 20℃での測定値（12 mg/L）を用いる。この値は IUPAC-NIST Solubility Database における推奨値でもある。

⑤ logPow

評価Ⅰで採用した値は、HSDB、PhysProp に記載された測定値である。他の信頼性の定まった情報源等に記載の測定値も同様であったことから、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同じ値（3.9）を用いる。

⑥ ヘンリー係数

評価Ⅰで採用した値は、信頼性の定まった情報源に記載の複数のデータ（推計値を含む）の中央値であった。

一方、Mackay (2006) には、約 15℃~35℃まで一連の温度域におけるヘンリー係数の実測値（equilibrium cell GC 法）が記載されており、評価Ⅱではそのうち 20℃における測

¹ 「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」の「3. 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報源のこと

1 定値 $1.35 \times 10^5 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$ を採用する。

3 ⑦ Koc

4 評価Ⅰで採用した値は、ATSDR (1999)、EHC (1991) に記載された値の算術平均値であ
5 った。評価Ⅱにおいて、原著論文にて確認したところ、これらの値は Koc の値ではないこ
6 とが分かった²。

7 Koc について、信頼性の定まった情報源等にあるその他のデータは、すべて推定値であっ
8 た。そのため、評価Ⅱでは EPI Suite の KOCWIN による推計値を用いる。KOCWIN には
9 2 種類の推計法があり、MCI 法による推計値が 132 L/kg、logKow 法による推計値が 2,420
10 L/Kg であった。MCI 法の方が若干推計精度がよいため、評価Ⅱでは MCI 法による推計値
11 132 L/kg を用いる。

13 ⑧ BCF

14 評価Ⅰで採用した値は、EPI Suite の BCFBAF を用いた推計値である。n-ヘキサンにつ
15 いて、測定値及び推計値に関する情報は得られなかったため、評価Ⅱでもこの値 (174 L/kg)
16 を用いる。

18 ⑨ BMF

19 評価Ⅰで採用した値は、logPow 及び BCF から化審法における優先評価化学物質に関す
20 るリスク評価の技術ガイダンス(MHLW, METI, MOE, 2014) (以下、「技術ガイダンス」と
21 いう。)に従って設定したものである。BMF の測定値は得られなかったため、評価Ⅱにお
22 いてもこの値 (1) を用いる。

² ATSDR (1999) に記載の値は、ヘキサンの logPow の値、EHC (1991) に記載の値は土
壤中フミン酸へのヘキサンの蒸気収着量。

1-2 分解性

下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

表 1-2 分解に係るデータのまとめ※

項目			半減期 (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期		NA	
	機序別の 半減期	OH ラジカルとの反応	3.1 ¹⁾	反応速度定数の測定値 ¹⁾ から、OH ラジカル濃度を 5×10^5 molecule/cm ³ として算出
		オゾンとの反応	NA	
		硝酸ラジカルとの反応	315 ¹⁾	反応速度定数の測定値 ¹⁾ から、硝酸ラジカル濃度を 2.4×10^8 molecule/cm ³ として算出
水中	水中における総括分解半減期		NA	
	機序別の 半減期	生分解	5 ²⁾	化審法の分解度試験結果 ²⁾ から生分解半減期へ換算
		加水分解	－	加水分解はしない
		光分解	－	直接光分解はしない
土壌	土壌における総括分解半減期		NA	
	機序別の 半減期	生分解	5	水中生分解半減期と同じと仮定
		加水分解	－	水中加水分解の項参照
底質	底質における総括分解半減期		NA	
	機序別の 半減期	生分解	20	水中生分解半減期の 4 倍と仮定
		加水分解	－	水中加水分解の項参照

※平成 29 年度第 1 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 29 年 5 月 25 日）で了承された値

1) Mackay (2006)

2) 通商産業省(1996)

NA:情報が得られなかったことを示す

－: 無視できる

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

①大気

大気中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。また、機序別の半減期についても、オゾンとの反応に関する情報は得られなかった。

①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

Mackay (2006) に、大気中における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値に関する記載があった。反応速度定数は、 5.19×10^{-12} cm³/molecule/s (25 °C、relative method) であり、大気中の OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの 5×10^5 molecule/cm³ とした場合、半減期は 3.1 日と算出された。評価Ⅱではこの値 (3.1 日) を用いる。

①-2 硝酸ラジカルとの反応の半減期

Mackay (2006) に、大気中における硝酸ラジカルとの反応速度定数の測定値に関する記載があった。反応速度定数は、 $1.06 \times 10^{-16} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ (23 °C、relative method) であり、大気中の硝酸ラジカル濃度を技術ガイダンスの $2.4 \times 10^8 \text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半減期は 315 日と算出された。評価Ⅱではこの値 (315 日) を用いる。

②水中

水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかった。機序別の半減期については、生分解に関する情報が得られた。

②-1 生分解の半減期

OECD TG 301C に準じた試験法で、被験物質濃度 100 mg/L、活性汚泥濃度 30 mg/L で 28 日間試験を行った結果、BOD 分解度、GC 分解度はそれぞれ 100 %であった (通商産業省,1996)。そのため、技術ガイダンスに従い、水中での生分解半減期を 5 日とする。

②-2 加水分解の半減期

n-ヘキサンはその構造式より、加水分解を受けないと考えられるため、水中での加水分解反応は無視できるとする。

②-3 光分解の半減期

n-ヘキサンはその構造式より、直接光分解を受けないと考えられるため、水中での光分解反応は無視できるとする。

③土壌

土壌中での総括分解半減期及び機序別の半減期に関する情報は得られなかった。

③-1 生分解の半減期

半減期に関するデータは得られなかったため、技術ガイダンスに従い、水中での生分解半減期と同じ 5 日とする。

③-2 加水分解の半減期

半減期に関するデータは得られなかったが、本物質は加水分解を受ける基を有さないため、土壌中での加水分解反応は無視できるとする。

④底質

底質中での総括分解半減期及び機序別の半減期に関する情報は得られなかった。

④-1 生分解の半減期

半減期に関するデータは得られなかったため、底質中での生分解半減期は、技術ガイダンスに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 20 日とする。

④-2 加水分解の半減期

半減期に関するデータは得られなかったが、本物質は加水分解を受ける基を有さないため、底質中での加水分解反応は無視できるとする。

2 【付属資料】

2 - 1 物理化学的性状等一覧

収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

出典)

ATSDR (1999): Agency for Toxic Substances and Disease Registry. “Toxicological Profile
n-Hexane”, Toxicological Profiles. 1999.

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

CRC: Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 94th ed., CRC
Press, 2013-2014. EHC (1991): ENVIRONMENTAL HEALTH CRITERIA 122, n-
Hexane, International Programme on Chemical Safety

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

Hefer, G. T. (1986): Solubility System: Hexane with Water. IUPAC-NIST Solubility
Database.

https://srdata.nist.gov/solubility/sol_detail.aspx?sysID=37_252;

https://srdata.nist.gov/solubility/IUPAC/SDS-37/SDS-37-pages_314.pdf (2017-03-03 閲
覧)

HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. [http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-
bin/sis/htmlgen?HSDB](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB), (2017-03-03 閲覧).

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

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
ガイダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2017-03-07 閲
覧).

環境省 (2002): 化学物質の環境リスク評価 第1巻, n-ヘキサン (平成14年3月)

- 1 通商産業省（1996）：平成 7 年度化学物質安全対策費補助事業に係る安全性試験結果報告
- 2 書，ヘキサン
- 3 **2-2 その他**
- 4 特になし。

情報源略称	詳細等
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
ATSDR	Agency for Toxic Substances and Disease Registry
CCD	Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics, 97th, CRC-Press
EHC	WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」
ECHA	Information on Chemicals - Registered substances
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUCLID	EU ECB International Uniform Chemical Information Database
Mackay	Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Second Edition
Merck	The Merck Index, 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」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	融点	-95 °C	-95							2B	×	×			p.1431
2 ATSDR	融点	-95 °C	-95	-	-	-	-	-		2B	×	×	-	Lide DR.1994. CRC handbook of chemistry and physics. 74th edition. Boca Raton, FL: CRC Press Inc..	p.149
3 CCD	凝固点	-95 °C	-95	-	-	-	-	-		2B	×	×	-		n-hexane
4 CRC	融点	-95 27 °C[-95 27(0.02)]	-95 27	-	-	-	-	-		2B	×	×	-	Frenkel, M., Chirico, R. D., Diky, V. V., Kazakov, A., and Muzny, C. D., ThermoData Engine, NIST Standard Reference Database 103b, Version 5.0 (Pure Compounds, Binary Mixtures, and Chemical Reactions, TDE-SOURCE Version 5.1), National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD – Boulder, CO, 2010, <http://www.nist.gov/srd/nist103b.cfm>..	Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
5	融点	-95 35 °C	-95 35	-	-	-	-	-		2B	×	×	-		Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
6 EHC	融点	-95 35 °C	-95 35	-	-	-	-	-		2B	×	×	-	CLAYTON, G D. & CLAYTON, F.E. (1981) Patty's industrial hygiene and toxicology, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, John Wiley and Sons, Vol. 2B..	2 2. Physical and chemical properties
7 EPI Suite	融点	-93 84 °C	-93 84	MPBPW N				(Q)SAR		2C	×	×			
8 HSDB	融点	-95 35 °C	-95 35							2B	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
9 IUCLID	融点	-95 °C	-95	その他	no					4A	×	×			p.5
10 Mackay	融点	-95 35 °C	-95 35	-	-	-	-	-		2B	×	×	-	Lide, D R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th ed., CRC Press, LLC. Boca Raton, Florida..	p.114
11 Merck	融点	-100~-95 °C	-97.5	-	-	-	-	-		2B	×	×	-		Monograph Number: 0004694
12 MOE初期評価	融点	-95 3 °C	-95 3	-	-	-	-	-		2B	○	○	-	化学物質安全情報研究会編 (1999) 化学物質安全性データブック(改訂増補版), オーム社.	p.1
13 PhysProp	融点	-95 3 °C	-95 3	-	-	-	-	-		2B	○	○	-		p.1
14 ECHA	融点	-95 35 °C	-95 35		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		Lide D (Editor in Chief) Handbook of Chemistry and Physics, 89th edition.2008,CRC Press, Boca Raton.	Exp Key Melting point/freezing point.001

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

融点

収集データ

	情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
15	既存点検事 業	融点	-95 °C	-95	-	-	-	-	-		4A	×	×	-	The Sigma-Aldrich Library of Regulatory and Safety Data.	K1074

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

沸点

収集データ

	情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1	Aldrich	69 °C	69									4A	×	×			p.1431
2	ATSDR	69 °C	69			-	-	-	-	-		4A	×	×	-	Slide DR.1994. CRC handbook of chemistry and physics. 74th edition. Boca Raton, FL: CRC Press Inc..	p.149
3	CCD	68.742 °C	68.742	68.742	760 mmHg	-	-	-	-	-		2B	○	○	-		n-hexane
4	CRC	68.72 ° C[68.72(0.06)]	68.72	68.72	760 mmHg	-	-	-	-	-		2B	○	○	-	Frenkel, M., Chirico, R. D., Diky, V. V., Kazakov, A., and Muzny, C. D., ThermoData Engine, NIST Standard Reference Database 103b, Version 5.0 (Pure Compounds, Binary Mixtures, and Chemical Reactions, TDE-SOURCE Version 5.1), National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD – Boulder, CO, 2010, <http://www.nist.gov/srd/nist103b.cfm>..	Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
5		68.73 °C	68.73			-	-	-	-	-		4A	×	×	-		Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
6		68.73 °C	68.73			-	-	-	-	-		4A	×	×	-		Flammability of Chemical Substances (Section 16)
7	EHC	68.74 °C	68.74			-	-	-	-	-		4A	×	×	-	CLAYTON, G. D. & CLAYTON, F. E. (1981) Patty's industrial hygiene and toxicology, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, John Wiley and Sons, Vol. 2B..	2.2. Physical and chemical properties
8	EPI Suite	71.53 °C	71.53			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
9	HSDB	68.73 °C	68.73									4A	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
10	IUCL D	65~70 °C	67.5									4A	×	×			p.5
11		69 °C	69	69.007698	1013 hPa	その他	no					4A	×	×			p.5
12	Mackay	68.73 °C	68.73			-	-	-	-	-		4A	×	×	-	Slide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th ed., CRC Press, LLC. Boca Raton, Florida..	114
13	Merck	69 °C	69			-	-	-	-	-		4A	×	×	-		Monograph Number: 0004694
14	MOE初期評価	68.7 °C	68.7			-	-	-	-	-		4A	×	×	-	化学物質安全情報研究会編 (1999) 化学物質安全性データブック(改訂増補版), オーム社.	p.1
15	PhysProp	68.7 °C	68.7			-	-	-	-	-		4A	×	×	-		p.1

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

沸点

収集データ

	情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
16	ECHA	68.73 °C	68.73	68.737692	101.3 kPa		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		Lide D (Editor in Chief).Handbook of Chemistry and Physics, 89th edition.CRC Press, Boca Raton.	Exp Key Boiling point 001
17	既存点検事 業	69 °C	69			-	-	-	-	-		4A	×	×	-	The Sigma-Aldrich Library of Regulatory and Safety Data.	K1074

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	5.2 psi	35852.752	11148.298	37.7 °C							4A	×	×			p.1431
2	132 mmHg	17598.553	17598.553	20 °C							2B	×	×			p.1431
3	256 mmHg	34130.526	10612.777	37.7 °C							4A	×	×			p.1431
4 ATSDR	150 mmHg	19998.355	14176.887	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×	×	-	HSDB.1996. Hazardous Substances Database: n-Hexane. National Library of Medicine, National Toxicology Information Program, Bethesda, MD..	p.149
5	138 mmHg	18398.487	13958.833	24 °C	-	-	-	-	-		2B	×	×	-	Chiou et al. 1988.	p.149
6 CRC	20.2 kPa	20200	14319.833	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×	×	-		Laboratory Solvents and other Liquid Reagents (Section 15)
7 EHC	20 kPa	20000	14178.053	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×	×	20 kPa (150 mmHg)	RPTC (1990) IRPTC Legal file, Geneva, International Register of Potentially Toxic Chemicals, United Nations Environment Programme.. MELLAN, I., ed. (1977) Industrial solvents handbook, 2nd ed., Park Ridge, New Jersey, Noyes Data Corporation, p. 14..	2.2. Physical and chemical properties
8 EPI Suite	20000 Pa[2B以上の値を用いて推定(2C)]	20000	14178.053	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
9 HSDB	153 mmHg	20398.322	14460.424	25 °C							2B	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERT ES: > VAPOR PRESSURE:
10	120 mmHg	15998.684	15998.684	20 °C							2B	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERT ES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERT ES:
11	190 mmHg	25331.25	12875.334	30 °C							2B	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERT ES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERT ES:

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

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	値の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
12	IUCLID	160 hPa	16000	16000	20 °C	その他	no			estimated by calculation		4C	×	×			p.5
13	Mackay	20180 Pa	20180	14305 655	25 °C	-	-	-	-	内挿（補 間）	interpolated- Antoine equations I	4C	×	×	20180, 20300, 20165 (interpolated-Antoine equations I, II and IV, Stephenson & Malanowski 1987) log (PL/kPa) = 6.00431 – 1172.04/(-48.747 + T/K); temp range 293–343 K (Antoine eq.- I, Stephenson & Malanowski 1987) log (PL/kPa) = 6.15142 – 1224.492/(-45.358	Stephenson, R.M., Malanowski, S. (1987) Handbook of the Thermodynamic of Organic Compounds. Elsevier Science New York, N.Y..	p.114
14		20170 Pa	20170	14298 566	25 °C	-	-	-	-	その他,lit. average	-	2B	○	×	20170 (lit. average, Riddick et al. 1986) log (P/kPa) = 6.00091 – 1171.91/(224.408 + t/°C), temp range not specified (Antoine eq., Riddick et al. 1986)	Riddick, J.A., Bunger, W B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents. Wiley Interscience, New York..	p.114
15		24811 Pa	24811	12610 902	30 °C	その他,static- manometer, measured range 30–60° C	-	-	-	-	-	2B	×	×	-	Smyth, C.P., Engel, E.W. (1929) Molecular orientation and the partial vapor pressures of binary mixtures. I. Systems compounds of normal liquids. J. Am. Chem. Soc. 51, 2646–2660..	p.114
16	Mackay	19920 Pa	19920	14411.171	24.7 °C	その他,ebulliometry , measured range 13.033– 69.541°C	-	-	-	-	-	2B	×	○	Vapor Pressure (Pa at 25°C or as indicated and reported temperature dependence equations. Additional data at other temperatures designated * are compiled at the end of this section.);19920* (24.7°C, ebulliometry, measured range 13.033–69.541°C Willingham	Willingham, C B., Taylor, W.J., Pignocco, J M., Rossini, F.D. (1945) Vapor pressure and boiling points of some paraffin, alkylcyclopentane, alkylcyclohexane, and alkylbenzene hydrocarbons. J. Res. Natl. Bur. Std. 34, 219–244..	p.114

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
17		19700 Pa	19700	13965.382	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated- Antoine eq. regression, temp range -53.9 to 68.7°C	4C	×	×	-	Stull, D.R. (1947) Vapor pressure of pure substances organic compounds. Ind. Eng. Chem. 39(4), 517-560..	p.114
18		20170 Pa	20170	14298.566	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated from determined data	4C	×	×	20170 (calculated from determined data, Dreisbach 1959) log (P/mmHg) = 6.87776 - 1171.53/(224.366 + t/°C); temp range -10 to 110°C (Antoine eq. for liquid state, Dreisbach 1959)	Dreisbach, R.R. (1959) Physical Properties of Chemical Compounds II. Adv. Chem. Ser. 22, American Chemical Society, Washington DC..	p.114
19		20198 Pa	20198	14318.415	25 °C	-	-	-	-	内挿（補 間）	interpolated- Antoine eq., temp range -25.1 to 92.1°C	4C	×	×	Vapor Pressure (Pa at 25°C or as indicated and reported temperature dependence equations. Additional data at other temperatures designated * are compiled at the end of this section.); 20198* (interpolated- Antoine eq., temp range -25.1 to 92.1°C, Zwolinski	Zwolinski, B.J., Wilhoit, R.C. (1971) Handbook of Vapor Pressures and Heats of Vaporization of Hydrocarbons and Related Compounds. API-44 TRC Publication No. 101, Texas A. & M. University, Evans Press, Fort Worth, Texas..	p.114
20		3120 Pa	3120	14601.411	-0.51 °C	その他,gas saturation, measured range -95.44 to -0.51°C	-	-	-	-	-	4A	×	×	-	Carruth, G.F., Kobayashi, R. (1973) Vapor pressure of normal paraffins ethane through n-decane from their triple points to about 10 mm mercury. J. Chem. Eng. Data 18(2), 115-126..	p.114
21		20130 Pa	20130	14270.21	25 °C	-	-	-	-	-	-	2B	×	×	-	Campbell, A.N., Kartzmark, E.M., Anand. S.C., Cheng, Y., Dzikowski, H.P., Skrynyk, S.M. (1968) Partially miscible liquid systems: the density, change of volume on mixing, vapor pressure, surface tension, and viscosity in the system: aniline-hexane. Can. J. Chem. 46, 2399-2407..	p.114

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
22		20124 Pa	20124	14265.956	25 °C	その他,static method- differential pressure gauge	-	-	-	-		2B	×	×	-	Bissell, T.G., Williamson, A.G. (1975) Vapour pressures and excess Gibbs energies of n-hexane and of n- heptane + carbon tetrachloride and + chloroform at 298.15 K. J. Chem. Thermodyn. 7, 131–136..	p.114
23		20141 Pa	20141	14278.008	25 °C	その他,static method- differential pressure gauge	-	-	-	-		2B	×	×	-	Bissell, T.G., Williamson, A.G. (1975) Vapour pressures and excess Gibbs energies of n-hexane and of n- heptane + carbon tetrachloride and + chloroform at 298.15 K. J. Chem. Thermodyn. 7, 131–136..	p.114
24		20300 Pa	20300	14390.723	25 °C	-	-	-	-	内挿（補 間）	interpolated- Antoine equations II	4C	×	×	20180, 20300, 20165 (interpolated-Antoine equations I, II and IV, Stephenson & Malanowski 1987) log (PL/kPa) = 6.00431 – 1172.04/(–48.747 + T/K); temp range 293–343 K (Antoine eq.- I, Stephenson & Malanowski 1987) log (PL/kPa) = 6.15142 – 1224.492/(–45.358	Stephenson, R.M., Malanowski, S. (1987) Handbook of the Thermodynamic of Organic Compounds. Elsevier Science New York, N.Y..	p.114
25		22090 Pa	22090	13599.176	27.1 °C	-	-	-	-	-		2B	×	×	-	Letcher, T.M., Marsicano, F. (1974) Vapour pressures and densities of some unsaturated C6 acyclic and cyclic hydrocarbons between 300 and 320 K. J. Chem. Thermodyn. 6, 509–514..	p.114

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
26		21809 Pa	21809	13652.169	26.85 °C	-	-	-	-	その他,vapor-liquid equilibrium VLE data, Gutsche & Knapp 1982	-	2B	×	×	Vapor Pressure (Pa at 25°C or as indicated and reported temperature dependence equations. Additional data at other temperatures designated * are compiled at the end of this section.); 21809, 57929, 130189 (26.85, 51.85, 76.85° C, vapor-liquid equilibrium V	Gutsche, B., Knapp, H. (1982) Isothermal measurements of vapor-liquid equilibria for three n-alkane-chloroalkane mixtures. Fluid Phase Equil. 8, 285–300..	p.114
27		20165 Pa	20165	14295.022	25 °C	-	-	-	-	内挿（補間）	interpolated-Antoine equations IV,	4C	×	×	20180, 20300, 20165 (interpolated-Antoine equations I, II and IV, Stephenson & Malanowski 1987) log (PL/kPa) = 6.00431 – 1172.04/(–48.747 + T/K); temp range 293–343 K (Antoine eq.-I, Stephenson & Malanowski 1987) log (PL/kPa) = 6.15142 – 1224.492/(–45.358	Stephenson, R.M., Malanowski, S. (1987) Handbook of the Thermodynamic of Organic Compounds. Elsevier Science New York, N.Y..	p.114
28		10854 Pa	10854	7694.4291	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-UN FAC activity coeff.	4C	×	×	-	Banerjee, S., Howard, P.H., Lande, S.S. (1990) General structure vapor pressure relationship for organics. Chemosphere 21, 1173–1180..	p.114
29	Mackay	20136 Pa	20136	14313.15	24.96 °C	その他,Hg manometer, measured range 9.95–49.97°C	-	-	-	-	-	2B	×	○	-	Gracia, M., Sánchez, Perez, P., Valero, J., Getierrez Losa, C. (1992) Vapour pressures of (butan-1-ol + hexane) at temperatures between 283.10 K and 323.12 K. J. Chem. Thermodyn. 24, 463–471..	p.114

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
30		20180 Pa	20180	14305.655	298.15 K	-	-	-	-	その他, recommended	-	2B	×	×	Vapor Pressure (Pa at 25°C or as indicated and reported temperature dependence equations. Additional data at other temperatures designated * are compiled at the end of this section.); 20180* (recommended, Ruzicka & Majer 1994) $\ln [(P/kPa)/(P_o/kPa)] = [1 -$	Ruzicka, K., Majer, V. (1994) Simultaneous treatment of vapor pressures and related thermal data between the triple and normal boiling temperatures for n-alkanes C5 - C20. J. Phys. Chem. Ref. Data 23, 1-39.. Yaws, C.L. (1994) Handbook of Vapor Pressure, Volume 1: C1 to C4 Compounds, Volume 2: C5 to C7 Compounds, Volume 3: C5 to C28 Compounds. Gulf Publishing Co., Houston, Texas..	p.114
31		24938 Pa	24938	12675.453	30 °C	-	-	-	-	その他,VLE equilibrium data	-	2B	×	×	-	Carmona, F.J., Gonzalez, J A., Garcia de la Fuente, I., Cobos, J.C., Bhethanabotla, V.R., Campbell, S.W. (2000) Thermodynamic properties of n-alkoxyethanols + organic solvent mixtures. XI. Total vapor pressure measurements for n-hexane, cyclohexane or n-heptane + 2-ethoxyethanol at 303.15 and 323.15 K. J. Chem. Eng. Data 45, 699-703..	p.114
32		53982 Pa	53982	8037.5431	50 °C	-	-	-	-	その他,VLE equilibrium data	-	4A	×	×	-	Carmona, F.J., Gonzalez, J A., Garcia de la Fuente, I., Cobos, J.C., Bhethanabotla, V.R., Campbell, S.W. (2000) Thermodynamic properties of n-alkoxyethanols + organic solvent mixtures. XI. Total vapor pressure measurements for n-hexane, cyclohexane or n-heptane + 2-ethoxyethanol at 303.15 and 323.15 K. J. Chem. Eng. Data 45, 699-703..	p.114

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
33		57929 Pa	57929	7758.2343	51.85 °C	-	-	-	-	その他,vapor-liquid equilibrium VLE data, Gutsche & Knapp 1982	-	4A	×	×	Vapor Pressure (Pa at 25°C or as indicated and reported temperature dependence equations. Additional data at other temperatures designated * are compiled at the end of this section.); 21809, 57929, 130189 (26.85, 51.85, 76.85° C, vapor-liquid equilibrium V	Gutsche, B., Knapp, H. (1982) Isothermal measurements of vapor-liquid equilibria for three n-alkane-chloroalkane mixtures. Fluid Phase Equil. 8, 285–300..	p.114
34		130189 Pa	130189	4649.5764	76.85 °C	-	-	-	-	その他,vapor-liquid equilibrium VLE data, Gutsche & Knapp 1982	-	4A	×	×	Vapor Pressure (Pa at 25°C or as indicated and reported temperature dependence equations. Additional data at other temperatures designated * are compiled at the end of this section.); 21809, 57929, 130189 (26.85, 51.85, 76.85° C, vapor-liquid equilibrium V	Gutsche, B., Knapp, H. (1982) Isothermal measurements of vapor-liquid equilibria for three n-alkane-chloroalkane mixtures. Fluid Phase Equil. 8, 285–300..	p.114
35		20160 Pa	20160	14291.477	25 °C	-	-	-	-	内挿（補間）	interpolated-Antoine eq	4C	×	×	20160 (interpolated-Antoine eq., Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 6 01098 – 1176.102/(224.899 + t/°C); temp range 13.033–69.54°C (Antoine eq. from reported exptl. data of Willingham et al. 1945, Boublik et al. 1984) log (P/kPa) = 5.72763 – 1031 938/(208	Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1984) The Vapour Pressures of Pure Substances. (second revised edition), Elsevier, Amsterdam.. Willingham, C.B., Taylor, W J., Pignocco, J M., Rossini, F.D. (1945) Vapor pressure and boiling points of some paraffin, alkylcyclopentane, alkylcyclohexane, and alkylbenzene hydrocarbons. J. Res. Natl. Bur. Std. 34, 219–244.. Letcher, T.M., Marsicano, F. (1974) Vapour pressures and densities of some unsaturated C6 acyclic and cyclic hydrocarbons between 300 and 320 K. J. Chem. Thermodyn. 6, 509–514..	p.114

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

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Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
36		20190 Pa	20190	14312.744	25 °C	-	-	-	-	内挿（補 間）	interpolated- Antoine eq., temp range -25 to 92°C	4C	×		20190 (interpolated-Antoine eq., temp range -25 to 92°C, Dean 1985, 1992) log (P/mmHg) = 6.87601 - 1171.17/(224.41 + t/°C); temp range -25 to 92°C (Antoine eq., Dean 1985, 1992)	Dean, J.D., Ed. (1985) Lange's Handbook of Chemistry. 13th ed. McGraw-Hill, Inc., New York..	p.114
37		20700 Pa	20700	14674.284	25 °C	その他,headspace- GC	-	-	-	-		2B	×	×	20700, 20180, 20160(headspace-GC, correlated, Antoine eq., Hussam & Carr 1985)	Hussam, A., Carr, P.W. (1985) Rapid and precise method for the measurement of vapor/liquid equilibria by headspace gas chromatography. Anal. Chem. 57, 793-801..	p.114
38		20180 Pa	20180	14305.655	25 °C	-	-	-	-	その他,correlat ed	-	2B	×	×	20700, 20180, 20160(headspace-GC, correlated, Antoine eq., Hussam & Carr 1985)	Hussam, A., Carr, P.W. (1985) Rapid and precise method for the measurement of vapor/liquid equilibria by headspace gas chromatography. Anal. Chem. 57, 793-801..	p.114
39		20160 Pa	20160	14291.477	25 °C	-	-	-	-	その他,Antoine eq	-	2B	×	×	20700, 20180, 20160(headspace-GC, correlated, Antoine eq., Hussam & Carr 1985)	Hussam, A., Carr, P.W. (1985) Rapid and precise method for the measurement of vapor/liquid equilibria by headspace gas chromatography. Anal. Chem. 57, 793-801..	p.114
40	MOE初期評 価	13~20.7 kPa	16850	19538.192	15.8~20 ° C	-	-	-	-	-		2B	×	×	-	化学物質安全情報研究会編 (1999) 化 学物質安全性データブック(改訂増補 版), オーム社.	p.1
41	PhysProp	151 mmHg	20131.678	14271.399	25 °C	-	-	-	-	experiment al result	-	2B	×	×	-	BOUBL K,T ET AL. (1984).	p.1
42	ECHA	10 kPa	10000	20949.676	9.8 °C		no data	2: reliable with restrictions	key study	experiment al result		4A	×	×		Lide D (Editor in Chief).Handbook of Chemistry and Physics, 89th edition 2008,CRC Press, Boca Raton.	Exp Key Vapour pressure 001

基本情報

PACS F 等	3000
PACS Name 等	n－ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	[Insoluble]	単位換算不可				-	-	-	-	-		3	×	×	-	Merck.1989. Merck index: An encyclopedia of chemicals, drugs, and biologicals.11 th ed. Budavari S, ed. Rahway NJ: Merck & Co., Inc..	p.149
2	9.5 mg/L	9.5			-	-	-	-	-	-		4A	×	×	-	Chiou et al. 1988.	p.149
3 CCD	[Insoluble]	単位換算不可			-	-	-	-	-	-		3	×	×	-		n-hexane
4 CRC	[Insoluble]	単位換算不可			-	-	-	-	-	-		3	×	×	iH_2_O		Physical Constants of Organic Compounds (Section 3) etc
5	0.00098 mass %	9.80009604	9.14845274	25 °C	-	-	-	-	-	-		2B	×	×	-	Marche, C., Ferronato, C., and Jose, J., J. Chem. Eng. Data 48, 967,2003..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
6	0.0098 g/Kg	9.8	9.14836309	25 °C	-	-	-	-	-	-		2B	×	×	-	Marche, C., Ferronato, C., and Jose, J., J. Chem. Eng. Data 48, 967,2003..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
7	0.00114 mass %	11.40013	7.78905322	50 °C	-	-	-	-	-	-		4A	×	×	-	Marche, C., Ferronato, C., and Jose, J., J. Chem. Eng. Data 48, 967,2003..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
8	0.0114 g/Kg	11.4	7.78896443	50 °C	-	-	-	-	-	-		4A	×	×	-	Marche, C., Ferronato, C., and Jose, J., J. Chem. Eng. Data 48, 967,2003..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
9	0.00167 mass %	16.7002789	8.73418213	75 °C	-	-	-	-	-	-		4A	×	×	-	Marche, C., Ferronato, C., and Jose, J., J. Chem. Eng. Data 48, 967,2003..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
10	0.0167 g/Kg	16.7	8.73403627	75 °C	-	-	-	-	-	-		4A	×	×	-	Marche, C., Ferronato, C., and Jose, J., J. Chem. Eng. Data 48, 967,2003..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
11	0.0291 g/Kg	29.1	12.0744884	100 °C	-	-	-	-	-	-		4A	×	×	-	Marche, C., Ferronato, C., and Jose, J., J. Chem. Eng. Data 48, 967,2003..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
12	0.00291 mass %	29.1008468	12.0748397	100 °C	-	-	-	-	-	-		4A	×	×	-	Marche, C., Ferronato, C., and Jose, J., J. Chem. Eng. Data 48, 967,2003..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)

基本情報

PACS F 等	3000
PACS Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
13 EHC	9.5 mg/L	9.5	8.86831116	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	×	-	MELLAN, I., ed. (1977) Industrial solvents handbook, 2nd ed., Park Ridge, New Jersey, Noyes Data Corporation, p. 14.. IRPTC (1990) IRPTC Legal file, Geneva, International Register of Potentially Toxic Chemicals, United Nations Environment Programme..	2.2. Physical and chemical properties
14 EPI Suite	14.89 mg/L[2B以上の値を用いて推定 (2C) 1]	14.89	13.8999109	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
15 HSDB	9.5~13 mg/L	11.25	11.25	20 °C								2B	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
16	9.5 mg/L	9.5	8.86831116	25 °C								2B	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
17 IUCLID	[of very low solubility]	単位換算不可				その他	no					3	×	×			p.6
20	12.24 mg/L	12.24	11.4261188	25 °C		その他,shake flask-generator column-GC	-	-	-	-		2B	×	×	-	Tewari, Y.B., Martire, D.E., Wasik, S.P., Miller, M.M. (1982a) Aqueous solubilities and octanol-water partition coefficients of binary liquid mixtures of organic compounds at 25°C. J. Solution Chem. 11, 435–445.. Wasik, S.P., Tewari, Y.B., Miller, M.M. (1982) Measurements of octanol/water partition coefficient by chromatographic method. J. Res. Natl. Bur. Std. 87, 311–315.. Miller, M.M., Wasik, S.P., Huang, G.L., Shiu, W.Y., Mackay, D. (1985) Relationships between octanol-water partition coefficient and aqueous solubility. Environ. Sci. Technol. 19, 522–529..	p.114
21	140 mg/L	140	149.247682	15.5 °C		その他,shake flask-cloud point	-	-	-	-		2B	×	×	-	Fuhner, H. (1924) Die wasserlöslichkeit in homologen reihen. Chem. Ber. 57, 510–515..	p.114
22	<262 mg/L	262	244.578687	25 °C		その他,shake flask-residue volume	-	-	-	-		2B	×	×	-	Booth, H.S., Everson, H.E. (1948) Hydrotropic solubilities: solubilities in 40 percent sodium xylenesulfonate. Ind. Eng. Chem. 40(8), 1491–1493..	p.114

基本情報

PACS F 等	3000
PACS Name 等	n－ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
23	36 mg/L	36	33.6062318	25 °C		その他,shake flask-cloud point	-	-	-	-		2B	×	×	-	Durand, R. (1948) Investigations on hydrotropy. The solubility of benzene, hexane and cyclohexane in aqueous solutions of fatty acid salts. Compt. Rend. 226, 409– 410..	p.114
24	16.2 mg/L	16.2	15.1228043	25 °C		その他,vapor saturation-GC	-	-	-	-		2B	×	×	-	Barone, G., Crescenzi, V., Pispisa, B., Quadrioglio, B. (1966) Hydrophobic interactions in polyelectrolytes solutions. II. Solubility of some C3-C6 alkanes in poly(methacrylic acid) aqueous solutions. J. Macromol. Chem. 1, 761 –771..	p.114
25	18.3 mg/L	18.3	17.0831678	25 °C		その他,shake flask-GC, measured range 4–55°C	-	-	-	-		2B	×	×	-	Nelson, H D., De Ligny, C.L. (1968) The determination of the solubilities of some n-alkanes in water at different temperatures by means of gas chromatography. Rec. Trav. Chim. Payus-Bae (Recueil) 87, 528–544..	p.114
26	12.3 mg/L	12.3	11.4821292	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	×	×	-	Leinonen, P.J., Mackay, D. (1973) The multicomponent solubility of hydrocarbons in water. Can. J. Chem. Eng. 51, 230–233..	p.114
27	12.4 mg/L	12.4	11.5754798	25 °C		その他,shake flask-G	-	-	-	-		2B	×	×	-	Polak, J., Lu, B.C.Y. (1973) Mutual solubilities of hydrocarbons and water at 0 and 25°C. Can. J. Chem. 51, 4018–4023..	p.114
28	13 mg/L	13	12.1355837	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	×	×	-	Krasnoshchekova, R.Ya., Gubertitis, M.Ya. (1973) Solubility of paraffin hydrocarbons in fresh and saltwater. Neftekhimiya 13, 885–887..	p.114
29	16.2 mg/L	16.2	15.1228043	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	×	×	-	Mackay, D., Shiu, W.Y., Wolkoff, A.W. (1975) Gas chromatographic determination of low concentrations of hydrocarbons in water by vapor phase extraction. ASTM STP 573, pp. 251–258, Am. Soc. Testing and Materials, Philadelphia, Pennsylvania..	p.114

基本情報

PACS F 等	3000
PACS Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
30	9.47 mg/L	9.47	8 84030597	25 °C		その他,shake flask-GC, measured range 25– 151 8°C	-	-	-	-		2B	×	×	-	Price, L.C. (1976) Aqueous solubility of petroleum as applied to its origin and primary migration. Am. Assoc. Petrol. Geol. Bull. 60, 213–244..	p.114
31	14.1 mg/L	14.1	13.1624408	25 °C		-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-activity coeff. γ and K_OW	4C	×	×	-	Tewari, Y.B., Miller, M.M., Wasik, S.P. (1982b) Calculation of aqueous solubilities of organic compounds. NBS J. Res. 87, 155–158..	p.114
32	12.3 mg/L	12.3	11.4821292	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	×	×	-	Aquan-Yuen, M., Mackay, D., Shiu, W.Y. (1979) Solubility of hexane, phenanthrene, chlorobenzene, and p-dichlorobenzene in aqueous electrolyte solutions. J. Chem. Eng. Data 24, 30–34..	p.114
33	10.09 mg/L	10.09	9.41907996	25 °C		その他,vapor saturation-GC, measured range 15.5–40° C	-	-	-	-		2B	×	×	-	Jonsson, J.A., Vejrosta, J., Novak, J. (1982) Air/water partition coefficients for normal alkanes (n-pentane to n-nonane) Fluid Phase Equil. 9, 279–286..	p.114
34	11.4 mg/L	11.4	9 01591273	37.78 °C		その他,shake flask-GC, measured 37.78–200°C	-	-	-	-		4A	×	×	-	Tsonopoulos, C., Wilson, G.M. (1983) High-temperature mutual solubilities of hydrocarbons and water. Part I: Benzene, cyclohexane and n-hexane. AIChE Journal 29, 990–999..	p.114
35	9.55 mg/L	9.55	8 91498648	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	×	×	-	Coates, M., Connell, D.W., Barron, D.M. (1985) Aqueous solubility and octan-1-ol to water partition coefficients of aliphatic hydrocarbons. Environ. Sci. Technol. 19, 628–632..	p.114
36	14 mg/L	14	13.0690901	25 °C		その他,shake flask-purge and trap-GC	-	-	-	-		2B	×	×	-	Coutant, R.W., Keigley, G.W. (1988) An alternative method for gas chromatographic determination of volatile organic compounds in water. Anal. Chem. 60, 2436–2537..	p.114

基本情報

PACS F 等	3000
PACS Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
37 Mackay	9.8 mg/L	12	9.14836309	20 °C		-	-	-	-	その他, recommended best value, IUPAC Solubility Data Series, temp range 0–140°C	-	2B	×	○	Water Solubility (g/m3 or mg/L at 25°C or as indicated and reported temperature dependence equations. Additional data at other temperatures designated * are compiled at the end of this section.); 9.8* (recommended best value, IUPAC Solubility Data Series,	Shaw, D.G., Ed. (1989a) IUPAC Solubility Data Series Vol. 37: Hydrocarbons (C5-C7) with Water and Seawater. Pergamon Press, Oxford, England.. Shaw, D.G., Ed. (1989b) IUPAC Solubility Data Series Vol. 38: Hydrocarbons (C8-C36) with Water and Seawater. Pergamon Press, Oxford, England.. Tsonopoulos, C. (1999) Thermodynamic analysis of the mutual solubilities of normal alkanes and water. Fluid Phase Equil. 156, 21–33..	p.114
38	11.5 mg/L	11.5	10.735324	25 °C		-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-liquid-liquid equilibrium LLE data, temp range 273.2–425 K	4C	×	×	-	Maćczyński, A., Wioeniewska-Gocłowska, B., Góral, M. (2004) Recommended liquid-liquid equilibrium data. Part 1. Binary alkanewater systems. J. Phys. Chem. Ref. Data 33, 549–577..	p.114
39	120 mg/L	120	112.020773	25 °C		その他, shake flask-cloud point	-	-	-	-	-	2B	×	×	-	McBain, J.W., Lissant, K.J. (1951) The solubilization of four typical hydrocarbons in aqueous solution by three typical detergents. J. Phys. Colloid Chem. 55, 655–662..	p.114
40	9.5 mg/L	9.5	8.86831116	25 °C		その他, shake flask-GC	-	-	-	-	-	2B	×	×	-	McAuliffe, C. (1963) Solubility in water of C1 - C9 hydrocarbons. Nature (London) 200, 1092–1093..	p.114
41 Merck	[Insol in water]	単位換算不可				-	-	-	-	-	-	3	×	×	-		Monograph Number: 0004694
42 MOE初期評価	9.47 mg/L	9.47				-	-	-	-	-	-	4A	×	×	-	Chemfinder (http://Chemfinder.Camsoft.com/)	p.1
43 PhysProp	9.5 mg/L	9.5	8.86831116	25 °C		-	-	-	-	experimental result	-	2B	×	×	-	BOUBL, K.T ET AL. (1984).	p.1
44 ECHA	0.0098 g/L [slightly soluble (0.1–100 mg/L)]	9.8	9.14836309	25 °C	7 [Standard pH conditions assumed]		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result	-	4A	×	×	-	Lide D (Editor in Chief). Handbook of Chemistry and Physics, 89th edition. 2008, CRC Press, Boca Raton.	Exp Key Water solubility.001
45 既存点検事業	<=10 mg/L	10	9.33506438	25±1 °C		OECD TG 105	-	-	-	experimental result	-	1B	○	×	-		K1074

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

logPow

収集データ

	情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1	ATSDR	3.29	3.29			-	-	-	-	-		2B	×	×	-	SRC.1995. Syracuse Research Center. Octanol-Water Partition Coefficient Program (KOWWIN, version 137, serial L0148). Chemical Hazard Assessment Division, Environmental Chemistry Center, Syracuse, NY..	p.149
2	CRC	4	4	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	×	-	Sangster, J., J. Phys. Chem. Ref. Data, 18, 1111, 1989..	Octanol-Water Partition Coefficients (Section 16)
3	EHC	3.6	3.6	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	×	-	MELLAN, I., ed. (1977) Industrial solvents handbook, 2nd ed., Park Ridge, New Jersey, Noyes Data Corporation, p. 14.. RPTC (1990) IRPTC Legal file, Geneva, International Register of Potentially Toxic Chemicals, United Nations Environment Programme..	2.2. Physical and chemical properties
4	EPI Suite	3.29	3.29			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
5	HSDB	3.9	3.9									2B	○	○			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT:
6	Mackay	4.2	4.2			-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-activity coeff. γ	4C	×	×	-	Wasik, S.P., Tewari, Y.B., Miller, M.M., Martire, D.E. (1981) Octanol/Water Partition Coefficients and Aqueous Solubilities of Organic Compounds. NBSIR 81-2406, report prepared for Office of Toxic Substances, Environmental Protection Agency, Washington, DC.. Wasik, S.P., Tewari, Y.B., Miller, M.M. (1982) Measurements of octanol/water partition coefficient by chromatographic method. J. Res. Natl. Bur. Std. 87, 311-315..	p.114

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

logPow

収集データ

	情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
7		3.9	3.9			-	-	-	-	その他, recommended	-	2B	○	×	-	Hansch, C., Leo, A.J., Hoekman, D. (1995) Exploring QSAR, Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. ACS Professional Reference Book, American Chemical Society, Washington, DC..	p.114
8		4.11	4.11			その他, generator column-GC	-	-	-	-	-	2B	×	×	-	Tewari, Y.B., Martire, D.E., Wasik, S.P., Miller, M.M. (1982a) Aqueous solubilities and octanol-water partition coefficients of binary liquid mixtures of organic compounds at 25°C. J. Solution Chem. 11, 435–445.. Tewari, Y.B., Miller, M.M., Wasik, S.P. (1982b) Calculation of aqueous solubilities of organic compounds. NBS J. Res. 87, 155–158..	p.114
9		2.9	2.9			その他, HPLC-k' correlation	-	-	-	-	-	2B	×	×	-	Coates, M., Connell, D.W., Barron, D.M. (1985) Aqueous solubility and octan-1-ol to water partition coefficients of aliphatic hydrocarbons. Environ. Sci. Technol. 19, 628–632..	p.114
10		3	3			-	-	-	-	estimated by calculation	calculated- π constant	4C	×	×	-	Hansch, C., Quinlan, J.E., Lawrance, G.L. (1968) The linear free-energy relationship between partition coefficients and the aqueous solubility of organic liquids. J. Org Chem. 33, 345–350.. Hansch, C., Leo, A. (1979) Substituent Constants for Correlation Analysis in Chemistry and Biology. Wiley, New York..	p.114
11	Mackay	3.9	3.9			その他, shake flask-concn. ratio-GC	-	-	-	-	-	2B	○	○	-	Platford, R.F. (1979) Glyceryl trioleate-water partition coefficients for three simple organic compounds. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 21, 68.. Platford, R.F. (1983) The octanol-water partitioning of some hydrophobic and hydrophilic compounds. Chemosphere 12(7/8), 1107–1111..	p.114

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

logPow

収集データ

	情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
12		4.25	4.25			-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-activity coeff.	4C	×	×	-	Berti, P., Cabani, S. Conti, G., Mollica, V. (1986) The thermodynamic study of organic compounds in octan-1-ol. J. Chem. Soc., Faraday, Trans. 1, 82, 2547..	p.114
13		4.16	4.16			その他,generator column-GC	-	-	-	-		2B	×	×	-	Schantz, M.M., Martire, D.E. (1987) Determination of hydrocarbon-water partition coefficients from chromatographic data and based on solution thermodynamics and theory. J. Chromatogr. 391, 35-51..	p.114
14		4	4			-	-	-	-	その他,recommend ed	-	2B	×	×	-	Sangster, J. (1989) Octanol-water partition coefficients of simple organic compounds. J. Phys. Chem. Ref. Data 18, 1111-1230.. Sangster, J. (1993) LOGKOW A Databank of Evaluated Octanol-Water Partition Coefficients. 1st ed., Montreal, Quebec, Canada..	p.114
15		4.29	4.29			-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-activity coeff.	4C	×	×	-	Tse, G., Sandler, S.I. (1994) Determination of infinite dilution activity coefficients and 1- octanol/water partition coefficients of volatile organic pollutants. J. Chem. Eng. Data 39, 354-357..	p.114
16	Merck	>4100	3.6127839	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	×	Partition coefficient (1- octanol/water) at 25°: >4100		Monograph Number: 0004694
17	MOE初期評 価	3.9~4.11	算出不可			-	-	-	-	-		3	×	×	-	化学物質安全情報研究会編 (1999) 化 学物質安全性データブック(改訂増補 版), オーム社.	p.1
18	PhysProp	3.9	3.9			-	-	-	-	experimental result	-	2B	○	○	-	HANSCH,C ET AL. (1995).	p.1

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

logPow

収集データ

	情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
19	ECHA	4	4	20 ° C[Standar d temperatu re and pressure assumed.]	7[Standar d temperat ure and pressure assumed.]		no data	2: reliable with restriction s	key study	experimental result		4A	×	×		Lide D (Editor in Chief).Handbook of Chemistry and Physics, 89th edition 2008,CRC Press, Boca Raton.	Exp Key Partition coefficient.001

基本情報

PACS F 等	3000
PACS Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディの該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディの該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	logKoc	2.9	794.3282347			-	-	-	-	-	-		2B	○	×	-	Coates M, Connell DW, Barron DM.1985. Aqueous solubility and octanol to water partition coefficients of aliphatic hydrocarbons. Environ Sci Technol 19:628-632..	p.149
2	logKoc	3.1~3.61[est.]	2264.644308			-	-	-	-	-	-		2B	×	×	-	HSDB.1996. Hazardous Substances Database: n-Hexane. National Library of Medicine, National Toxicology Information Program, Bethesda, MD..	p.149
3 EHC	Koc	11 mg/g	0.011			-	-	-	-	-	-		2B	○	×	sorptive capacity of soil for hexane is 11 mg/g (0.0167 ml/g)	CHIOU, C.T., KILE, D.E., & MALCOLM, R.L. (1988) Sorption of vapours of some organic liquids on soil humic acid and its relation to partitioning of organic compounds in soil organic matter. Environ. Sci. Technol., 22: 298-303..	4.1. Transport and Distribution Between Media
4 EPI Suite	Koc	2423 L/kg[2B以上の値を用いて推定(2C)]	2423				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
	EPI Suite	Koc	131.5	132			KOCWIN				(Q)SAR		2C	×	○			
5 HSDB	Koc	130	130								estimated by calculation		4C	×	×			ENVIRONMENTAL FATE:
6 ECHA	Koc	2187.76	2187.76			Not applicable		no	2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR		4C	×	×		Sabljić A and Güsten H.QSARs for soil sorption. In: Overview of Structure-Activity Relationships for Environmental Endpoints. Hermens JLM (ed.).1995,'QSAR for Prediction of Fate and Effects of Chemicals in the Environment', an international project of the Environmental Technologies RTD Programme (DG XI /D-1) of the European Commission under contract number EV5V-CT92-0211..	QSAR Key Adsorption / desorption 001

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

ヘンリー係数

収集データ

	情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1	ATSDR	1.69 atm・m ³ /mol	171239 25			-	-	-		2B	○	×		SRC.1994a. Syracuse Research Center. Henry's Law Constant Program (HENRYW N, version 2.50 serial H0142). Chemical Hazard Assessment Division, Environmental Chemistry Center, Syracuse, NY..	p.149
2	CRC	183 kPa m ³ /mol	183000			-	-	-		2B	×	×		Mackay, D., Shiu, W. Y., and Ma, K. C., Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Vol. III, Lewis Publishers/CRC Press, Boca Raton, FL, 1993..	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
3	EPI Suite	139000 Pa・m ³ /mol	139000					(Q)SAR		2C	×	×			
4	HSDB	1.80 atm・m ³ /mol	182385					estimated by calculation		4C	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
5	Mackay	183690 Pa・m ³ /mol	183690			-	-	その他（推定値）,calculated -1/K_AW, C_W/C_A, reported as exptl	-	4C	×	×	183690 (calculated-1/KAW, CW/CA, reported as exptl., Hine & Mookerjee 1975)	Hine, J., Mookerjee, P.K. (1975) The intrinsic hydrophilic character of organic compounds. Correlations in terms of structural contributions. J. Org. Chem. 40(3), 292-298..	p.114
6		215420 Pa・m ³ /mol	215420	30°C		-	-			4C	×	×	103262, 135400, 172140, 215420, 261420 (15, 20, 25, 30, 35°C, calculated-temp dependence eq. derived from exptl data, Jonsson et al. 1982) ln (1/KAW) = 21493.1/(T/K) + 59.299・ln (T/K) - 414.193; temp range 15-35°C (least-square regression of equilibrium c	Jonsson, J.A., Vejrosta, J., Novak, J. (1982) Air/water partition coefficients for normal alkanes (n-pentane to n-nonane) Fluid Phase Equil. 9, 279-286..	p.114

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

ヘンリー係数

収集データ

	情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
7		261420 Pa・m ³ /mol	261420	35°C		-	-	estimated by calculation		4C	×	×	103262, 135400, 172140, 215420, 261420 (15, 20, 25, 30, 35°C, calculated-temp dependence eq. derived from exptl data, Jonsson et al. 1982) ln (1/KAW) = 21493.1/(T/K) + 59.299 · ln (T/K) – 414.193; temp range 15–35°C (least-square regression of equilibrium c	Jonsson, J.A., Vejrosta, J., Novak, J. (1982) Air/water partition coefficients for normal alkanes (n-pentane to n-nonane) Fluid Phase Equil. 9, 279–286..	p.114
8		77820 Pa・m ³ /mol	77820			-	-	-		2B	×	×	Henry's Law Constant (Pa m ³ /mol at 25°C or as indicated and reported temperature dependence equations. Additional data at other temperatures designated * are compiled at the end of this section.); 77820* (EPICS-GC/FID, measured range 10–30°C, Ashworth et	Ashworth, R.A., Howe, G.B., Mullins, M.E., Rogers, T.N. (1988) Air-water partitioning coefficients of organics in dilute aqueous solutions. J. Hazard. Materials 18, 25–36..	p.114
9		130790 Pa・m ³ /mol	130790			-	-	estimated by calculation	calculated-vapor- liquid equilibrium (VLE) data	4C	×	×	-	Yaws, C.L. (1994) Handbook of Vapor Pressure. Volume 1: C1 to C4 Compounds, Volume 2: C5 to C7 Compounds. Volume 3: C5 to C28 Compounds. Gulf Publishing Co., Houston, Texas..	p.114
10		18600 Pa・m ³ /mol	18600			-	-	-		2B	×	×	Henry's Law Constant (Pa m ³ /mol at 25°C or as indicated and reported temperature dependence equations. Additional data at other temperatures designated * are compiled at the end of this section.); 18600* (40°C, equilibrium headspace-GC, measured range 40–	Kolb, B., Welter, C., Bichler, C. (1992) Determination of partition coefficients by automatic equilibrium headspace gas chromatography by vapor phase calibration. Chromatographia 34, 235–240..	p.114
11		163812 Pa・m ³ /mol	163812			-	-	-		2B	○	×	-	Ryu, S.-A., Park, S.-J. (1999) A rapid determination method of the air/water partition coefficient and its application. Fluid Phase Equil. 161, 295–304..	p.114

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

ヘンリー係数

収集データ

	情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
12		65318 Pa・m ³ /mol	65318			-	-	その他,selected from reported experimental values	-	2B	×	×	65318 (20°C, selected from reported experimental values, Staudinger & Roberts 1996, 2001) log KAW = 12.150 – 3143/(T/K) (summary of literature data, Staudinger & Roberts 2001)	Staudinger, J., Roberts, P.V. (2001) A critical compilation of Henry's law constant temperature dependence relations for organic compounds in dilute aqueous solutions. Chemosphere 44, 561– 576..	p.114
13		160000 Pa・m ³ /mol	160000			-	-	estimated by calculation	calculated-group contribution	4C	×	×	160000, 50590 (calculated-group contribution, calculated-bond contribution, Hine & Mookerjee 1975)	Hine, J., Mookerjee, P.K. (1975) The intrinsic hydrophilic character of organic compounds. Correlations in terms of structural contributions. J. Org. Chem. 40(3), 292–298..	p.114
14		50590 Pa・m ³ /mol	50590			-	-	estimated by calculation	calculated-bond contribution	4C	×	×	160000, 50590 (calculated-group contribution, calculated-bond contribution, Hine & Mookerjee 1975)	Mackay, D., Shiu, W.Y., Wolkoff, A.W. (1975) Gas chromatographic determination of low concentrations of hydrocarbons in water by vapor phase extraction. ASTM STP 573, pp. 251–258, Am. Soc. Testing and Materials, Philadelphia, Pennsylvania.. Mackay, D., Shiu, W.Y. (1981) A critical review of Henry's law constants for chemicals of environmental interest. J. Phys. Chem. Ref. Data 10, 1175–1199.. Bobra, A.M., Shiu, W.Y., Mackay, D. (1979) Distribution of hydrocarbons among oil, water and vapor phases during oil dispersant toxicity tests. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 4, 297–305..	p.114
15		190000 Pa・m ³ /mol	190000			-	-	estimated by calculation	calculated-P/C	4C	×	×	-	Vejrosta, J., Novák, J., Jonsson, J.A. (1982) A method for measuring infinite-dilution partition coefficients of volatile compounds between the gas and liquid phases of aqueous systems. Fluid Phase Equil. 8, 25–35..	p.114

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

ヘンリー係数

収集データ

	情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
16		177060 Pa・m ³ /mol	177060			-	-	-		2B	×	×	-	equilibrium cell-concn ratio-GC, Vejrosta et al. 1982	p.114
17		173340 Pa・m ³ /mol	173340	25°C		-	-	-		2B	×	×	-	Jonsson, J.A., Vejrosta, J., Novak, J. (1982) Air/water partition coefficients for normal alkanes (n-pentane to n-nonane) Fluid Phase Equil. 9, 279–286..	p.114
18		103262 Pa・m ³ /mol	103262	15°C		-	-			4C	×	×	103262, 135400, 172140, 215420, 261420 (15, 20, 25, 30, 35°C, calculated-temp dependence eq. derived from exptl data, Jonsson et al. 1982) ln (1/KAW) = 21493.1/(T/K) + 59.299 · ln (T/K) – 414.193; temp range 15–35°C (least-square regression of equilibrium c	Jonsson, J.A., Vejrosta, J., Novak, J. (1982) Air/water partition coefficients for normal alkanes (n-pentane to n-nonane) Fluid Phase Equil. 9, 279–286..	p.114
19	Mackay	135400 Pa・m ³ /mol	135400	20°C		-	-			4C	×	×	103262, 135400, 172140, 215420, 261420 (15, 20, 25, 30, 35°C, calculated-temp dependence eq. derived from exptl data, Jonsson et al. 1982) ln (1/KAW) = 21493.1/(T/K) + 59.299 · ln (T/K) – 414.193; temp range 15–35°C (least-square regression of equilibrium c	Jonsson, J.A., Vejrosta, J., Novak, J. (1982) Air/water partition coefficients for normal alkanes (n-pentane to n-nonane) Fluid Phase Equil. 9, 279–286..	p.114
20		172140 Pa・m ³ /mol	172140	25°C		-	-			4C	×	×	103262, 135400, 172140, 215420, 261420 (15, 20, 25, 30, 35°C, calculated-temp dependence eq. derived from exptl data, Jonsson et al. 1982) ln (1/KAW) = 21493.1/(T/K) + 59.299 · ln (T/K) – 414.193; temp range 15–35°C (least-square regression of equilibrium c	Jonsson, J.A., Vejrosta, J., Novak, J. (1982) Air/water partition coefficients for normal alkanes (n-pentane to n-nonane) Fluid Phase Equil. 9, 279–286..	p.114
21	PhysProp	1.8 atm・m ³ /mol	182385			-	-	estimated by calculation	-	4C	×	×	-	VP/WSOL.	p.1

基本情報

PACS_F 等	3000
PACS_Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1			BCF		173.9 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C)]	174	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	○	○			

基本情報

PACS F 等	3000
PACS Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA N	Hexane
その他番号	
その他名称	

解離定数

収集データ

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

基本情報

PACS F 等	3000
PACS Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数[1/s]	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期(day)	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	測定条件温度(℃)	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	re liability	情報源における キースタディの 該当	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該当 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
Mackay	大気	OHラジカル	1.9E+12	3.80E+06	5.00E+05	4.2215E-18			305K	32		relative rate method					experimental result		×		Llyod et al 1976	p.116
	大気	OHラジカル	2.95E-06	5.90E-12	5.00E+05	2.7			room temp										×		Atkinson et al 1979	p.116
	大気	OHラジカル	0.00000305	6.10E-12	5.00E+05	2.6			292-303K	19		relative rate method					experimental result		×		Darnall et al 1978	p.116
	大気	OHラジカル	2.86E-06	5.71E-12	5.00E+05	2.8			299K	26		relative rate method					experimental result		×		Atkinson et al 1982	p.116
	大気	OHラジカル	0.00000285	5.70E-12	5.00E+05	2.8			room temp			relative rate method					experimental result		×		Atkinson et al 1984	p.116
	大気	OHラジカル	2.61E-06	5.21E-12	5.00E+05	3.1			room temp			relative rate method					experimental result		×		Atkinson & Aschmann 1984	p.117
	大気	OHラジカル	2.60E-06	5.19E-12	5.00E+05	3.1				25		relative rate method					experimental result		○	measured range 230-400K	DeMore&Bayes 1999	p.117
	大気	OHラジカル	3.10E-06	6.20E-12	5.00E+05	2.6			312K	39							experimental result		×		Nolting et al 1988	p.117
	大気	硝酸ラジカル	2.54E-08	1.06E-16	2.40E+08	315.3			296	23		relative rate method					experimental result		○		Aschman&Atkinson 1995	p.117
HSDB	大気	OHラジカル	2.81E-06	5.61E-12	5.00E+05	2.9													×		Atkinson R, J Phys Chem Ref Data Monograph 1 (1989)	

基本情報

PACS F 等	3000
PACS Name 等	n-ヘキサン
CASRN	110-54-3
CA_IN	Hexane
その他番号	
その他名称	

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	値の詳細	備考	文献	ページ番号等
1 ECHA		83 % [St. dev. 16] end of 10 day window]	O_2 consumption		OECD TG 301F	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	read-across based on grouping of substances (category approach)				Read across Cat Key Biodegradation in water: screening tests.002
2		98 % [St. dev. 12]	O_2 consumption		OECD TG 301F	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	read-across based on grouping of substances (category approach)				Read across Cat Key Biodegradation in water: screening tests.002
3		81 % [inhibition control]	O_2 consumption		OECD TG 301F	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	read-across based on grouping of substances (category approach)				Read across Cat Key Biodegradation in water: screening tests.002
4 既存点検事業		100%	Test mat. analysis		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		-		K1074
5		103%	O_2 consumption		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		-		K1074
6		100%	O_2 consumption		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		-		K1074
7		98%	O_2 consumption		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		-		K1074
8		100%	Test mat. analysis		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		-		K1074
9		100%	Test mat. analysis		OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		-		K1074