

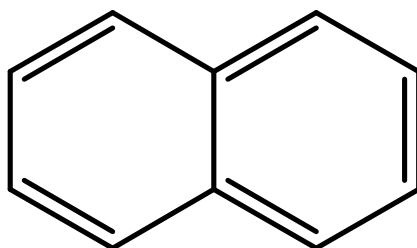
1
2
3
4
5 優先評価化学物質のリスク評価 (一次)

6 生態健康影響に係る評価Ⅱ

7 物理化学的性状等の詳細資料

8
9 ナフタレン

10
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¹⁾

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	°C	<u>80.2</u> ^{5,7,8,9)}	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 ²⁾
沸点	°C	<u>218</u> ^{2,3,5,7,8,9)}	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 ^{2,3)}
蒸気圧	Pa	<u>7.9</u> ⁵⁾	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 ²⁾
水に対する溶解度	mg/L	<u>29.6</u> ^{7,9)}	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 ²⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	<u>3.5</u> ^{3,7)}	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 ³⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	<u>46</u> ^{4,5,10,11)}	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 ^{4,5)}
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	<u>870</u> ^{2,5,7)}	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 ⁵⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	115.13 ⁶⁾	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 ⁶⁾
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	— ¹²⁾

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

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。

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。以下同じ。）より、80.2 °C (Merck, MOE, HSDB)、80.2 °C~80.3 °C (EU 2003)、80.26 °C (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 (80.2 °C)を用いる。

②沸点

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 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、その 2 つのデータの算術平均値 (218.1 °C)を用いた。

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 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。

③蒸気圧

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、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 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 24.27 °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。

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 (Mackay 2006), 8.533 Pa (Mackay 2006)、8.64 Pa (Mackay 2006)、48.37 Pa (Mackay 2006)が得られた。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 3 つのデータの算術平均値(7.9 Pa)を用いる。

④水に対する溶解度

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 (2006), EHC も同じ文献を引用していた。

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 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 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

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, 31.5 mg/L, 33.5 mg/L, 31.1 mg/L (全て測定温度は 25℃である)。評価Ⅱではこれら 8 つの値を 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。

⑤logPow

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均値 (3.34) を用いた。

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 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 つのデータを合わせた 4 つのデータの算術平均値 (3.5) を用いる。

⑥ヘンリー係数

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・m³/mol) を用いた。

他の信頼性の定まった情報源より、48.1 Pa・m³/mol (Mackay 2006)、44.6 Pa・m³/mol (Mackay 2006, PhysProp, HSDB)、43 Pa・m³/mol (CRC) 等得られた。

評価Ⅱでは評価Ⅰのデータ及びこの 2 つのデータを含めた 5 つのデータの算術平均値 (46 Pa・m³/mol) を用いる。

⑦Koc

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 のデータであった。

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 %), 1288 L/kg (OC 0.76 %), 1445 L/kg (OC 1.11 %) (Mackay 2006, EU 2003), 589 L/kg (OC 1.4 %), 1950 L/kg (OC 0.74 %), 302 L/kg (OC 1.4 %), 288 L/kg (OC 3.2 %), 339 L/kg (OC 1.4 %), 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 L/kg (OC 1.8 %), 589 L/kg (OC 1.49 %), 575 L/kg (OC 1.08 %), 537 L/kg (OC 10.4 %), 1000 L/kg (OC 0.11 %), 398 L/kg (OC 1.2 %) (Mackay 2006), 664 L/kg (OC 1.1 %) (ECHA), 989 L/kg (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 %) 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 (OC 1.6 %) (Mackay 2006) を用いる。

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。

⑧BCF

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用いる。

⑨BMF

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。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。

1-2 分解性

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。

表 1-2 分解に係るデータのまとめ¹⁾

項目			半減期 (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期		NA	
	機序別の半減期	OH ラジカルとの反応	0.66	21℃での反応速度定数の測定値 ^{2,3,4)} から OH ラジカル濃度 5×10^5 molecule/cm ³ として算出
		オゾンとの反応	-	反応はとても遅く、無視して良い ⁵⁾
		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 ⁴⁾ から硝酸ラジカル濃度 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	24	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 ³⁾
		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 ^{2,3)}
		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 ²⁾
土壌	土壌における総括分解半減期		50	信頼性のある文献に基づく半減期 ³⁾
	機序別の半減期	生分解	18	¹⁴ C ラベルでの実験で、実験温度 10 °Cでのデータ ⁵⁾
		加水分解	-	水中加水分解の項参照 ^{2,3)}
底質	底質における総括分解半減期		88	汚染されていない底質でのデータ ³⁾
	機序別の半減期	生分解	72	微生物を含む汚染されていない底質でのデータ ³⁾
		加水分解	-	水中加水分解の項参照 ^{2,3)}

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) EU(2003)

3) Mackay(2006)

4) NIST

5) HSDB

NA:情報が得られなかったことを示す

-:無視できると考えられることを示す

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

①大気

大気中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、機序別の半減期に関する情報が得られた。

①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

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 °C

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 (2.42×10^{-11} cm³/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 5×10^5 molecule/cm³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 $\times 10^{-19}$ cm³/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 7×10^{11}
13 molecule/cm³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 2.0×10^{-11} cm³/molecule/s (25 °C)、HSDB には 6.4×10^{-15}
17 cm³/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 2.4×10^8
19 molecule/cm³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。

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
24 る情報が得られた。

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。

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 (¹⁴C 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。

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

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
して 88 日を用いる。

④-1 生分解の半減期

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
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
一番長い 72 日を用いる。

なお好気性生分解のデータは、16.8-30.8 日（ ^{14}C ラベルでの実験で、好気性分解条件下で、
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
られた。嫌気性生分解のデータは、「 ^{14}C ラベルでの実験で、嫌気性の細菌（活性種のみ）が
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
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と
考えられる。

④-2 加水分解の半減期

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。

2 【付属資料】

2-1 物理化学的性状等一覽

収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

出典)

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

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

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

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

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

ECHA: ECHA. Information on Chemicals – Registered substances.

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

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

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

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

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

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

HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank.

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

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

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.

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 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 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/PHYSICA L 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 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
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 情報	融点	80.3 ° C[pure naphthalen el	80.3	OECD TG 102	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	×	Naphthalene pure	その他(2008)	Exp Key Melting point/freezing point.001
19		融点	78.9 °C	78.9	OECD TG 102	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	×			Exp Key Melting point/freezing point.001
20	SIDS	融点	80.2~80.3 °C	80.25				key study			2A	○	Naphthalene pure	McCullough et al.(1957), Zwolinski(1986)	p.8, 13
21	既存点検事 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 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	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 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
17		130.2 °C	130.2	164.0786	60 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×	-		Monograph Number: 0006370
18		119.3 °C	119.3	153.2049	40 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×	-		Monograph Number: 0006370
19		101.7 °C	101.7	134.9839	20 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×	-		Monograph Number: 0006370
20		85.8 °C	85.8	118.1028	10 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×	-		Monograph Number: 0006370
21	MOE初期評 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	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	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 情報	218.1 ° C[Naphthal ene (pure)]	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[Naphthal ene (techn.)]	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~ 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 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 ディー	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℃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
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			experiment al 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			experiment al result		4A	×			p.15
21	0.108 hPa	10.8	7.656148	25 °C	その他	no data			experiment al result		4A	×			p.15
22	0.109 hPa	10.9	7.727039	25 °C	その他	no data			experiment al result		4A	×			p.15
23	0.111 hPa	11.1	7.868819	25 °C	その他	no data			experiment al result		4A	×			p.15
24	0.111 hPa	11.1	7.868819	25 °C	その他	no data			experiment al result		4A	×			p.15
25	Mackay	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) ln (PS/Pa) = 22.8929 – 4025.35/(T/K – 102.243); 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

29

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20℃における蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
	11.27 Pa	11.27	7.989333	25 °C	-	-	-	-	内挿（補 間）	interpolated- Antoine eq.,	4C	×	11.27 (interpolated-Antoine eq., Stephenson & Malanowski 1987) log (P _S /kPa) = 8.70592 – 2619.91/(–52.499 + T/K); temp range 310–353 K (Antoine eq-I., Stephenson & Malanowski 1987) log (P _S /kPa) = 9.45562 – 3069.145/(–29.892 + T/K); temp range 263–353 K (Antoine eq- II ., Stephenson & Malanowski 1987) log (P _S /kPa) =11.9681 – 4577.47/(30.694 + T/K); temp range not specified (Antoine eq- III ., Stephenson & Malanowski 1987) log (P _L /kPa) = 6.19487 – 1782.509/(–65.637 + T/K); temp range 352–500 K (Antoine eq-IV., Stephenson & Malanowski 1987) log (P _L /kPa) = 6.14835 – 1751.644/(–68.319 + T/K); temp range 491–565 K (Antoine eq- V ., Stephenson & Malanowski 1987) log (P _L /kPa) = 6.53231 – 2162.182/(–12.108 + T/K); temp range 563–665 K (Antoine eq- VI ., Stephenson & Malanowski 1987) log (P _L /kPa) = 7.74783 – 4042.567/(227.985 + T/K); 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℃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
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 ディー	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 Kruif 1980) log (P/Pa) = 14.187 – 3907/(T/K); temp range 253– 273 K (torsion effusion, regression, de Kruif 1980) log (P/Pa) = 14.053 – 3860/(T/K); temp range 253– 273 K (weighing effusion, regression, de Kruif 1980) log (P/Pa) =14.107- 3886/(T/K); temp range 253- 273 K (effusion, mean regression, de Kruif 1980)	De Kruif, 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）,quote d 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℃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
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,convert ed 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 ^{–1} (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℃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
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) Mackayの表4.1.1.2.2より20℃において8.533と記されていたのでこの値を採用値とする	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 Kruif et al. 1981)	De Kruif, 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℃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
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) log (P_S/mmHg) = 9.58102 – 2692.92/(t/°C + 220.651); 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) log (PL/mmHg) = 7.03382 – 1756.91/(t/°C + 204.931); 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) log (P/mmHg) = 7.01065 – 1733.71/(201.859 + t/°C); 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) log (P/mmHg) = [–0.2185 × 17065.2/(T/K)] + 11.450; temp range 0–80.0°C (Antoine eq., Weast 1972–73) log (P/mmHg) = [–0.2185 × 12311.6/(T/K)] + 8.413089; temp range 52.6–217.9°C (Antoine eq., Weast 1972–73) 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℃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
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 & Kitagorodskii 1974) log (P/mmHg) = 11.7041 – 3796.574/(T/K); temp range 9.0–23.91°C (Antoine eq., Knudsen effusion, Radchenko & Kitagorodskii 1974) Mackayの表4.1.1.2.2より20℃ 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。	Radchenko, L.G., Kitagorodskii, A.I. (1974) Vapor pressure and heat of sublimation of naphthalene, biphenyl, octafluoronaphthalene, decafluorobiph enyl, acenaphthene and α- 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) T·log (P/Pa) = ½·a0 + Σ aiEi(x); a0 = 310.6247, a1 = 791.4937, a2 = –82536, a3 = 0.4043; temp range: 230–344 K, (Chebyshev polynomial, diaphragm pressure gauge, Ambrose et al. 1975) log (P/Pa)13.70 – 3773/(T/K) (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) 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., Turrior, 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℃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
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 Kruij, 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℃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℃)]	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	-	-	-	-	experiment al 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	experiment al result		1B	×	SIDSと同じ引用	その他(2003)、 DeKruif CG, Kuipers T, Van Milttenburg 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			1B	×		2003	Exp Key Vapour pressure.001
73	SIDS	7.29 Pa	7.29	6.94714	20.69 °C				key study	experiment al result (corrected)		2A	×		DeKruif CG, Kuipers T, Van Milttenburg 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	experiment al result (corrected)		2A	×			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 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 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				(Q)SAR		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 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
12	31.69 mg/L[of low solubility]	31.69	29.582819	25 °C		その他,DCCLC = dynamic coupled column liquid chromatographi c method with saturated solution, analysis by UV spectrophotom etry	no data					4A	×	Commercial naphthalene, min. 97 % pure		p.21
13	31.69 mg/L[of low solubility]	31.69	29.582819	25 °C		その他,DCCLC = dynamic coupled column liquid chromatographi c method with saturated solution, analysis by UV spectrophotom etry	no data					4A	×	Commercial naphthalene, min. 97 % pure		p.21
14	31.69 mg/L[of low solubility]	31.69	29.582819	25 °C		その他,DCCLC = dynamic coupled column liquid chromatographi c method with saturated solution, analysis by UV spectrophotom etry	no data					4A	×	Commercial naphthalene, min. 97 % pure		p.22
15	31.7 mg/L[of low solubility]	31.7	29.5921541	25 °C		no data	no data					4A	×			p.22
16	33 mg/L[of low solubility]	33	30.8057124	25 °C		no data	no data					4A	×			p.22
17	33 mg/L[of low solubility]	33	30.8057124	25 °C		no data	no data					4A	×			p.22
18	33 mg/L[of low 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 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
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 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキース タディー	備考	文献	ページ番号等
29	31.3 mg/L[of low solubility]	31.3	29.2187515	25 °C		その他,Extraction method with hexane, analysis by gas chromatograph y	no data					4A	×	Naphthalene, analytical grade		p.21
30	IUPAC 0.00286 g(1)/100g sin	28.6	28.6601376	293 K		-	-	-	-	内挿（補 間）	-	4C	×	Sol. Power : 3	Bohon, R.L.; Claussen, W.F., J. Am. Chem. Soc. 1951, 73, 1571-8..	Table 2. Recommended (R) and Tentative Values of the Solubility of Naphthalene (1) in Water (2)
31	0.0028 g(1)/100g sin	28	28.058876	293 K		-	-	-	-	内挿（補 間）	-	4C	×	Sol. Power : 3	Wauchope, R.D.; Getzen, F.W., J. Chem. Eng. Data 1972, 17(1), 38- 41..	Table 2. Recommended (R) and Tentative Values of the Solubility of Naphthalene (1) in Water (2)
32	0.00262 g(1)/100g sin	26.2	26.2550911	293 K		-	-	-	-	内挿（補 間）	-	4C	×	Sol. Power : 3	Schwarz, F.P., J. Chem. Eng. Data. 1977, 22, 273-7..	Table 2. Recommended (R) and Tentative Values of the Solubility of Naphthalene (1) in Water (2)
33	Mackay 20.4 mg/L	20.4	19.0435313	25 °C		その他,shake flask	-	-	-	-		2B	×	-	Sahyun, M.R.V. (1966) Binding of aromatic compounds to bovine serum albumin. Nature 209, 613- 614..	p.623
34	30.25 mg/L	30.25	28.2385697	25 °C		その他,25°C, shake flask- fluorescence, measured range 8.4- 31.8°C	-	-	-	-		2B	×	-	Schwarz, F.P. (1977) Determination of temperature dependence of solubilities of polycyclic aromatic hydrocarbons in aqueous solutions by a fluorescence method. J. Chem. Eng. Data 22, 273-277..	p.623
35	31.69 mg/L	31.69	29.582819	25 °C		その他,generator column- HPLC/UV, measured temp range 5-30°C	-	-	-	-		2B	×	31.69 (generator column-HPLC/UV, measured temp range 5- 30°C, May et al. 1978) S/(mg/kg) = 13.66 + 0.2499 · (t/°C) + 0.0189 · (t/°C) ² ; temp range 5- 30°C (generator column- HPLC/UV, May et al. 1978)	May, W.E., Wasik, S.P., Freeman, D.H. (1978a) Determination of aqueous solubility of polynuclear aromatic hydrocarbons by coupled column liquid chromatographic technique. Anal. Chem. 50, 175- 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 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ 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) $R \cdot \ln x = -80.55/(\theta/K) + 28.7/[1/(\theta/K) - 1/(T/K)] + 0.31 \cdot \{(\theta/K)/(T/K) - 1 - \ln [(\theta/K)/(T/K)]\}$, $\theta = 298.15$ 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/fluoresce nce	-	-	-	-		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) $\ln x = -1767.4601/R \cdot (T/K) + (17.95209/R) \cdot \ln (T/K) + 1$; 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 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
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	×	Pearlman 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,recomm ended, 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) log [S/(mol/dm3)] = – 31.24 – 143.5/(T/K) + 4.772·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 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディ	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 tubing equilibration- GC	-	-	-	-		2B	×	-	Etzweiler, F., Senn, E., Schmidt, H.W.H. (1995) Method for measuring aqueous solubilities of organic compounds. Anal. Chem. 67,655–658..	p.623
50	34.8 mg/L	34.8	32.486024	25 °C		その他,generator column- HPLC/fluoresce nce	-	-	-	-		2B	×	34.8 (generator column- HPLC/fluorescence, 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. En.	p.623
51	30 mg/L	30	28.0051931	25 °C		その他,shake flask- gravimetric, measured range 0–25°C	-	-	-	-		2B	×	30.0* (shake flask- gravimetric, measured range 0–25°C, Hilpert 1916) SIDSと同じ引用	Hilpert, S. (1916) The solubility of naphthalene in ammonia. A possible cause for naphthalene stoppages. Angew. Chem. 29, 57–59..	p.623
52	31.5 mg/L	31.5	29.4054528	25 °C		その他,shake flask-UV	-	-	-	-		2B	×	-	Andrews, L.J., Keefer, R.M. (1949) Cation complexes of compounds containing carbon-carbon double bonds. IV. The argentation of aromatic hydrocarbons. J. Am. Chem. Soc. 71, 3644–3647..	p.623
53	12.5 mg/L	12.5	11.6688305	25 °C		その他,shake flask-UV	-	-	-	-		2B	×	外れ値 Pearlman et al. (1984) より	Klevens, H.B. (1950) Solubilization of polycyclic hydrocarbons. J. Phys. Colloid Chem. 54, 283–298..	p.623
54	34.4 mg/L	34.4	32.1126215	25 °C		その他,shake flask-UV, measured range 2–42°C,	-	-	-	-		2B	×	34.4* (shake flask-UV, measured range 2–42°C, Bohon & Claussen 1951)	Bohon, R.L., Claussen, W.F. (1951) The solubility of aromatic hydrocarbons in water. J. Am. Chem. Soc. 73, 1571–1578..	p.623
55	38.4 mg/L	38.4	38.4	20 °C		その他,20°C, shake flask-UV	-	-	-	-		2B	×	外れ値 Pearlman et al. (1984) より	Eisenbrand, J., Baumann, K. (1970) Über die bestimmung der wasserlöslichkeit von coronen, fluoranthen, perylen, picen, tetracen und triphenylen und über die bildung wasserlöslicher komplexe dieser kohlenwasserstoffe mit coffein. Zeitschrift für Lebensmitt.	p.623
56	30.6 mg/L	30.6	28.565297	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	Stephen, H., Stephen, D., Editors (1963) Solubility of Inorganic and Organic Compounds. Macmillan Co., 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 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ 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 flask-UV, measured range 29–73.4° C	-	-	-	-	外挿(補外)?	2B	×	31.2* (shake flask-UV, measured range 29– 73.4°C, Wauchope & Getzen 1972) $R \cdot \ln x = -8690/(T/K) +$ $(0.000408)[(T/K) -$ $291.15]^2 - 13.4 +$ $0.0139 \cdot (T/K)$; temp range 29.2–73.4°C (shake flask-UV, Wauchope & Getzen 1972)	Wauchope, R.D., Getzen, F.W. (1972) Temperature dependence of solubilities in water and heats of fusion of solid aromatic hydrocarbons. J. Chem. Eng. Data 17, 38–41..	p.623
58	32.17 mg/L	32.17	30.0309021	25 °C		その他,shake flask-UV	-	-	-	-		2B	×	-	Vesala, A. (1974) Thermodynamics of transfer of nonelectrolytes from light to heavy water. I. Linear free energy correlations of free energy of transfer with solubility and heat of melting of a nonelectrolyte. Acta Chemica Scand. A28, 839–845..	p.623
59	31.3 mg/L	31.3	29.2187515	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-		2B	×	-	Eganhouse, R.P., Calder, J.A. (1976) The solubility of medium molecular weight aromatic hydrocarbons and the effects of hydrocarbon co- solutes and salinity. Geochim. Cosmochim. Acta 40, 555–561..	p.623
60	22 mg/L	22	20.5371416	25 °C		その 他,fluorescence ,	-	-	-	-		2B	×	-	Schwarz, F.P., Wasik, S.P. (1976) Fluorescence measurements of benzene, naphthalene, anthracene, pyrene, fluoranthene, and benzo[a]pyrene in water. Anal. Chem. 48, 524–528..	p.623
61	31.7 mg/L	31.7	29.5921541	25 °C		その他,shake flask- fluorescence	-	-	-	-		2B	×	Pearlman et al. (1984) の採用値の一つ	Mackay, D., Shiu, W.Y. (1977) Aqueous solubility of polynuclear aromatic hydrocarbons. J. Chem. Eng. Data 22, 399–402..	p.623
62	30 mg/L	30	28.0051931	25 °C		その他,25°C, shake flask- fluorescence, measured range 8–31°C	-	-	-	-		2B	×	Pearlman et al. (1984) の採用値の一つ	Schwarz, F.P., Wasik, S.P. (1977) A fluorescence method for the measurement of the partition coefficients of naphthalene, 1- methylnaphthalene, and 1- ethylnaphthalene in water. J. Chem. Eng. Data 22, 270–273..	p.623
63	Merck [Insol in water]	単位換算不 可				-	-	-	-	-		3	×	-		Monograph Number: 0006370
64	MOE初期評 価	31	28.9386996	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	Yalkowsky, S.H. and R.M. Dannenfleiser (1994): Aquasol Database of Aqueous Solubility. Version 5. College of Pharmacy, 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 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディ	備考	文献	ページ番号等
65	31.6 mg/1000 g	31.6	29.4988034	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	Hide, 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 mg/L	32.5	30.3389592	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	-	Verschuieren, 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	31 mg/L	31	28.9386996	25 °C	-	-	-	-	experiment al result	-	2B	×	Mackayと同じ引用	PEARLMAN,RS ET AL. (1984)	p.1
69	REACH登録 情報	30.8~34.4 mg/L	32.6	30.4323099	25 °C	7~7.5	OECD TG 105	no	2: reliable with restrictions	key study	experiment al 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	experiment al 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	0.03 g/L[Practical ly insoluble]	30	28.0051931	25 °C					key study		4A	○		Hilpert, 1916	p.10, 13
72	既存点検事 業	[不溶]	単位換算不 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 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1	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 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 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における ギースタディ 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 けるギースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
15	3.28	3.28			その他,calculated according to ionization potential	no data			estimated by calculation		4C	×			p.16
16	3.28	3.28			その他,calculated according to ionization potential	no data			estimated by calculation		4C	×			p.16
17	3.28	3.28			その他,calculated according to ionization potential	no data			estimated by calculation		4C	×			p.17
18	3.3	3.3	20 °C		OECD TG 107	no data					1B	×			p.17
19	3.31	3.31	20 °C		OECD TG 107	no data					1B	○			p.17
20	3.35	3.35			HPLC- Method	no data			experimental result		4A	×			p.17
21	3.35	3.35	25°C		HPLC- Method	no data			experimental result		4A	×			p.17
22	3.36	3.36				no data					4A	×	No further data available		p.18
23	Mackay	3.43	25 °C		その他,HPLC- RT correlation	-	-	-	-		2B	×	3.43 (HPLC-RT correlation, Edsforth 1986)	Eadsforth, C.V. (1986) Application of reverse-phase HPLC for the determination of partition coefficients. Pestic. Sci. 17, 311– 325.	p.623
24		3.29	25 °C		その他,HPLC- RT correlation	-	-	-	-		2B	×	-	Wang, L., Wang, X., Xu, O., Tian, L. (1986) Determination of the n- octanol/water partition coefficients of polycyclic aromatic hydrocarbons by HPLC and estimation of their aqueous solubilities. Huanjing Kexue Xuebao 6, 491–497..	p.623
25		3.29	25 °C		その他,HPLC- RT correlation	-	-	-	-		2B	×	-	De Kock, A.C., Lord, D.A. (1987) A simple procedure for determining octanol-water partition coefficients using reverse phase high performance liquid chromatography (RPHPLC) . Chemosphere 16, 133– 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 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における ギースタディ 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 けるギースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
26	3.3	3.3	25 °C		その他,HPLC- RT correlation,	-	-	-	その他,average	-	2B	×	3.30 (average, HPLC-RT correlation, Ge et al. 1987)	Ge, J., Liu, W., Dong, S. (1987) Determination of partition coefficient with chemically bonded omega- hydroxysilica as HPLC column packing. Sepu 5, 182-185.	p.623
27	3.37	3.37	25 °C		-	-	-	-	-	-	2B	×	3.37, 3.01, 3.45 (Leo et al. 1971)	Leo, A., Hansch, C., Elkins, D. (1971) Partition coefficients and their uses. Chemical Reviews 71, 525- 616.	p.623
28	3.35	3.35	25 °C		その他,shake flask-GC	-	-	-	-	-	2B	×	-	Oppehuizen, A. (1987) Relationships between octan-1- ol/water partition coefficients, aqueous activity coefficients and reversed phaseHPLC capacity factors of alkylbenzenes, chlorobenzenes, chloronaphthalenes and chlorobiphenyls. Toxicol. Environ. Chem.15.	p.623
29	3.23	3.23	25 °C		その他,HPLC- RT correlation	-	-	-	-	-	2B	×	-	Minick, D.J., Frenz, J.H., Patrick, M.A., Brent, D.A. (1988) A comprehensive method for determining hydrophobicity constants by reversed-phase high- performance liquid chromatography. J. Med. Chem. 31, 1923-1933..	p.623
30	3.29	3.29	25 °C		その他,RP- HPLC-RT correlation,O DS column with masking agent	-	-	-	-	-	2B	×	-	Bechalany, A., Rothlisberger, T., El Tayler, N., Testa, B. (1989) Comparison of various non-polar stationary phases used for assessing lipophilicity. J. Chromatog. 473, 115- 124..	p.623
31	3.35	3.35	25 °C		-	-	-	-	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..	p.623
32	3.49	3.49	25 °C		その他,centrifugal partition chromatograp hy	-	-	-	-	-	2B	×	-	Menges, R.A., Bertrand, G.L., Armstrong, D.W. (1990) Direct measurement of octanol-water partition coefficients using centrifugal partition chromatography with a back-flushing technique. J. Liq. 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 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
33		3.36	3.36	25 °C		その他,shake flask- HPLC/UV	-	-	-	-		2B	×	-	Menges, R.A., Armstrong, D.W. (1991) Use of a three-phase model with hydroxypropyl-β-cyclodextrin for the direct determination of large octanol-water and cyclodextrin-water partition coefficients. Anal. Chim. Acta 255, 157–162..	p.623
34		3.3	3.3	25 °C		その他,TLC- RT correlation	-	-	-	-		2B	×	-	De Voogt, P., Van Zijl, G.A., Govers, H., Brinkman, U.A.T. (1990) Reversed-phase TLC and structure- activity relationships of polycyclic (hetero) aromatic hydrocarbons. J. Planar Chromatog.-Mod. TLC 3, 24– 33..	p.623
35		3.7	3.7	25 °C		その他,centrifugal partition chromatograp hy	-	-	-	-		2B	×	SIDSと同じ引用	Berthod, A., Menges, R.A., Armstrong, D.W. (1992) Direct octanol-water partition coefficient determination using co-current chromatography. J. Liq. Chromatogr. 15, 2769–2785..	p.623
36		3.37	3.37	25 °C	7.4	その他,shake flask-UV	-	-	-	-		2B	×	3.37 (shake flask-UV, pH 7.4, Alcorn et al. 1993)	Alcorn, C.J., Simpson, R.J., Leahy, D.E., Peters, T.J. (1993) Partition and distribution coefficients of solutes and drugs in brush border membrane vesicles. Biochem Pharmacol. 45, 1775–1782..	p.623
37		3.3	3.3	25 °C		-	-	-	-	その他,recommend ed	-	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.623
38		3.45	3.45	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	3.37, 3.01, 3.45 (Leo et al. 1971)	Leo, A., Hansch, C., Elkins, D. (1971) Partition coefficients and their uses. Chemical Reviews 71, 525– 616.	p.623
39		3.44	3.44	26 °C		-	-	-	-	その他,quoted	-	2B	×	3.44; 3.68 (26°C; 4°C, quoted, 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

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 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における ギースタディ 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 けるギースタ 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, quoted, 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
41		3.47	3.47	25 °C		その他,HPLC- k' correlation: ODS column	-	-	-	-	-	2B	×	3.47, 3.58; 3.40 (HPLC-k' correlation: ODS column; Diol column; quoted lit. average, Helweg et al. 1997)	Helweg, C., Nielson, T., Hansen, P.E. (1997) Determination of octanol- water partition coefficients of polar polycyclic aromatic (NPAC) by high performance liquid chromatography. Chemosphere 34, 1673-1684..	p.623
42		3.58	3.58	25 °C		その他,HPLC- k' correlation:: Diol column;	-	-	-	-	-	2B	×	3.47, 3.58; 3.40 (HPLC-k' correlation: ODS column; Diol column; quoted lit. average, Helweg et al. 1997)	Helweg, C., Nielson, T., Hansen, P.E. (1997) Determination of octanol- water partition coefficients of polar polycyclic aromatic (NPAC) by high performance liquid chromatography. Chemosphere 34, 1673-1684..	p.623
43		3.4	3.4	25 °C		-	-	-	-	その他,quoted lit. average	-	2B	×	3.47, 3.58; 3.40 (HPLC-k' correlation: ODS column; Diol column; quoted lit. average, Helweg et al. 1997)	Helweg, C., Nielson, T., Hansen, P.E. (1997) Determination of octanol- water partition coefficients of polar polycyclic aromatic (NPAC) by high performance liquid chromatography. Chemosphere 34, 1673-1684..	p.623
44		3.33[3.33 (range 3.24- 3.40)]	3.33	25 °C		その他,slow stirring method- HPLC/fluo.	-	-	-	-	-	2B	×	3.33 (range 3.24-3.40) (slow stirring method- HPLC/fluo., De Maagd et al. 1998)	De Maagd, P.G.-J., ten Hulscher, T.E.M., Van den Heuvel, H., Oppenhuizen, 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. En.	p.623
45		3.4	3.4	25 °C		その他,shake flask-dialysis tubing- HPLC/UV, both phases	-	-	-	-	-	2B	×	-	Andersson, J.T., Schröder, W. (1999) A method for measuring 1- octanol-water partition coefficients. 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 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における ギースタディ 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 けるギースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
46		3.77	3.77	25 °C		その他,RP- HPLC-RT correlation, short ODP 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 calculation	calculated- 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 flask- 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 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 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価Ⅱにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
55		3.17	3.17	25 °C		その他,HPLC- RT 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 flask-UV, 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- 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- 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/liqu.	p.623
60		3.35	3.35	25 °C		その他,RP- TLC-k' 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- RT 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 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における ギースタディ 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 けるギースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
62		3.31	3.31	25 °C		その他,shake flask;	-	-	-	-		2B	×	3.31; 3.35 (shake flask; HPLC correlation, Eadsforth & Moser 1983)	Eadsforth, C.V., Moser, P. (1983) Assessment of reverse phase chromatographic methods for determining partition coefficients. Chemosphere 12, 1459– 1475..	p.623
63		3.01	3.01	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×	3.37, 3.01, 3.45 (Leo et al. 1971)	Leo, A., Hansch, C., Elkins, D. (1971) Partition coefficients and their uses. Chemical Reviews 71, 525– 616.	p.623
64		3.35	3.35	25 °C		その他,HPLC correlation	-	-	-	-		2B	×	3.31; 3.35 (shake flask; HPLC correlation, Eadsforth & Moser 1983)	Eadsforth, C.V., Moser, P. (1983) Assessment of reverse phase chromatographic methods for determining partition coefficients. Chemosphere 12, 1459– 1475..	p.623
65		3.36	3.36	25 °C		その他,HPLC- k' correlation	-	-	-	-		2B	×	-	Hafkenscheid, T.L., Tomlinson, E. (1983) Correlations between alkane/water and octan-1-ol/water distribution coefficients and isocratic reversed-phase liquid chromatographic capacity factors of acids, bases and neutrals. Int'l J. Pharmaceutics 16, 225–239.	p.623
66		3.35	3.35	25 °C		その他,shake flask	-	-	-	-		2B	×	3.35; 3.42 (shake flask; ALPM, Garst & Wilson 1984)	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
67		3.42	3.42	25 °C		その他,ALPM	-	-	-	-		2B	×	3.35; 3.42 (shake flask; ALPM, Garst & Wilson 1984)	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

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 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における ギースタディ 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 けるギースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
68		3.57	3.57	25 °C		その他,HPLC- RV 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- HPLC 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 価	3.3	3.3			-	-	-	-	experimental 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	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	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	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	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 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における ギースタディ 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 けるギースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
75		3.45	3.45			-	-	-	-	-		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
76	PhysProp	3.3	3.3			-	-	-	-	experimental result	-	2B	×	Mackayと同じ引用	HANSCH,C ET AL. (1995).	p.1
77	REACH登録 情報	3.4	3.4	25 °C	7.75	OECD TG 107	no data	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	×	SIDSと同じ引用	Sanemasa I and Shi WJ and Toshio D A method for determining the octanol/water partition coefficients of volatile hydrocarbons. Anal. Sci. 10(4), 655-657 (1994) (cited from HSE/UK 2003)	Exp Key Partition coefficient.001
78	SIDS	3.7	3.7			その他,co- current chromatograp hy			key study	experimental result		2A	○		Berthod et al., 1992	p.10, 13
79		3.4	3.4			OECD TG 107 (REACH登録 情報より)			key study	experimental 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 [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 の誌非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 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 以上の値を用 いて推定 (2C)]	791.4				KOCWIN				(Q)SAR		2C	x			
3 HSDB	Koc	1300	1300			sediment samples in soils							2B	x		Karickhoff SW et al; Wat Res 13: 241-248 (1979)	ENVIRONMENTAL FATE:
4	Koc	440~830[in 5 different soils]	635								experimental 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- 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., Guzzi, 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
6	logKoc	2.63	426.5795188			Elliot soil foc=0.029 0	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, Choiu 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
7	logKoc	2.68	478.6300923			Marlette soil foc=0.018 0	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, Choiu 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
8	logKoc	2.77	588.8436554			Piketon soil foc=0.014 9	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, Choiu 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
9	logKoc	2.76	575.4399373			Anoka soil foc=0.010 8	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, Choiu 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

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 [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 の誌非	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
10	logKoc	2.69± 0.073[mean 2.69 ± 0.073]	489.7788194			-	その他.batch equilibrium- sorption isotherms- HPLC- fluorescence,	-	-	-	-		2B	x	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, Choiu 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
11	logKoc	2.91	812.8305162			-	その他.batch equilibrium- sorption isotherms- HPLC- fluorescence	-	-	-	-		2B	x	2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89, 2.95, 3.07; mean 2.88 ± 0.22 (sediments: Lake Michigan, Mississippi River, Massachusetts Bay, Spectacle Island, Peddocks Island, Port Point Channel, batch equilibrium-sorption isotherms-HPLC- fluorescence, Choiu 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
12	logKoc	2.86	724.4359601			-	その他.batch equilibrium- sorption isotherms- HPLC- fluorescence	-	-	-	-		2B	x	2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89, 2.95, 3.07; mean 2.88 ± 0.22 (sediments: Lake Michigan, Mississippi River, Massachusetts Bay, Spectacle Island, Peddocks Island, Port Point Channel, batch equilibrium-sorption isotherms-HPLC- fluorescence, Choiu 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
13	logKoc	2.88	758.577575			-	その他.batch equilibrium- sorption isotherms- HPLC- fluorescence	-	-	-	-		2B	x	2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89, 2.95, 3.07; mean 2.88 ± 0.22 (sediments: Lake Michigan, Mississippi River, Massachusetts Bay, Spectacle Island, Peddocks Island, Port Point Channel, batch equilibrium-sorption isotherms-HPLC- fluorescence, Choiu 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
14	logKoc	2.87	741.3102413			-	その他.batch equilibrium- sorption isotherms- HPLC- fluorescence	-	-	-	-		2B	x	2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89, 2.95, 3.07; mean 2.88 ± 0.22 (sediments: Lake Michigan, Mississippi River, Massachusetts Bay, Spectacle Island, Peddocks Island, Port Point Channel, batch equilibrium-sorption isotherms-HPLC- fluorescence, Choiu 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

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 [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 の誌非	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
15	logKoc	2.89	776.2471166			-	その他.batch equilibrium- sorption isotherms- HPLC- fluorescence	-	-	-	-		2B	x	2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89, 2.95, 3.07; mean 2.88 ± 0.22 (sediments: Lake Michigan, Mississippi River, Massachusetts Bay, Spectacle Island, Peddocks Island, Port Point Channel, batch equilibrium-sorption isotherms-HPLC- fluorescence, Choiu 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
16	logKoc	2.75	562.3413252			-	その他.HPLC- screening method;	-	-	-	-		2B	x	-	Muller, M., Kordel, W. (1996) Comparison of screening methods for the estimation of adsorption coefficients on soil. Chemosphere 32, 2493-2504..	p.623
17	logKoc	2.95	891.2509381			-	その他.batch equilibrium- sorption isotherms- HPLC- fluorescence	-	-	-	-		2B	x	2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89, 2.95, 3.07; mean 2.88 ± 0.22 (sediments: Lake Michigan, Mississippi River, Massachusetts Bay, Spectacle Island, Peddocks Island, Port Point Channel, batch equilibrium-sorption isotherms-HPLC- fluorescence, Choiu 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
18	logKoc	3.07	1174.897555			-	その他.batch equilibrium- sorption isotherms- HPLC- fluorescence	-	-	-	-		2B	x	2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89, 2.95, 3.07; mean 2.88 ± 0.22 (sediments: Lake Michigan, Mississippi River, Massachusetts Bay, Spectacle Island, Peddocks Island, Port Point Channel, batch equilibrium-sorption isotherms-HPLC- fluorescence, Choiu 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
19	logKoc	2.88± 0.22[mean 2.88 ± 0.22]	758.577575			-	その他.batch equilibrium- sorption isotherms- HPLC- fluorescence	-	-	-	-		2B	x	2.91, 2.86, 2.88, 2.87, 2.89, 2.95, 3.07; mean 2.88 ± 0.22 (sediments: Lake Michigan, Mississippi River, Massachusetts Bay, Spectacle Island, Peddocks Island, Port Point Channel, batch equilibrium-sorption isotherms-HPLC- fluorescence, Choiu 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

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 [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 の誌非	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
20		logKoc	3.11[3.11 (3.00 ~3.19)]	1288.249552			sediments: Lake Oostvaard ersplassen	その他,shake flask- HPLC/UV	-	-	-	-		2B	×	3.11 (3.00~3.19), 2.80 (sediments: Lake Oostvaardersplassen, Lake Ketelmeer, shake flask- HPLC/UV, 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. En.	p.623
21		logKoc	2.8	630.9573445			sediments: Lake Ketelmeer	その他,shake flask- HPLC/UV	-	-	-	-		2B	×	3.11 (3.00~3.19), 2.80 (sediments: Lake Oostvaardersplassen, Lake Ketelmeer, shake flask- HPLC/UV, 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. En.	p.623
22		logKoc	3.6	3981.071706			soil	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated- universal solvation model	4C	×	3.60; 3.10 (soil, calculated- universal solvation model; quoted exptl., Winget et al. 2000)	Winget, P., Cramer, C.J., Truhlar, D.G. (2000) Prediction of soil sorption coefficients using a universal solvation model. Environ. Sci. Technol. 34, 4733~4740..	p.623
23		logKoc	3.1	1258.925412			soil	-	-	-	-	estimated by calculation	quoted exptl.	4C	×	3.60; 3.10 (soil, calculated- universal solvation model; quoted exptl., Winget et al. 2000)	Winget, P., Cramer, C.J., Truhlar, D.G. (2000) Prediction of soil sorption coefficients using a universal solvation model. Environ. Sci. Technol. 34, 4733~4740..	p.623
24		logKoc	3.09~5.51	19952.62315			11 urban soils	-	-	-	-	estimated by calculation	range, calculated from sequential desorption of 11 urban soils	4C	×	3.09~5.51; 2.60~5.0 (range, calculated from sequential desorption of 11 urban soils; lit. range, 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
25		logKoc	2.6~5	6309.573445			-	-	-	-	-	estimated by calculation	lit. range	4C	×	3.09~5.51; 2.60~5.0 (range, calculated from sequential desorption of 11 urban soils; lit. range, 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
26		logKoc	3.11	1288.249552			natural sediment	その他,average sorption isotherms by batch equilibrium technique-UV spec.	-	-	-	-		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

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 [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 の誌非	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
27	logKoc	4.06[4.06 (range 3.95– 4.15);]	11481.53621	4°C		low organic carbon sediment f_OC = 0.0002	その他, batch equilibrium	-	-	-	-		2B	x	4.06 (range 3.95–4.15); 2.08 (range 2.08–2.11) (4° 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
28	logKoc	2.38	239.8832919	22°C		suspended particulate s	-	-	-	-	-		2B	x	2.38 (22°C, suspended particulates, Herbes et al. 1980)	Herbes, S.E., Southworth, G.R., Shaeffer, D.L., Griest, W.H., Maskarinec, M.P. (1980) Critical pathways of polycyclic aromatic hydrocarbons in aquatic environments. In: The Scientific Basis of Toxicity Assessment. Witschi, H. Editor, pp. 113–128, Elsevier/.	p.623
29	logKoc	2.94	870.96359			sediment/s oil	その他, sediment/s oil, sorption isotherm by batch equilibrium	-	-	-	-		2B	x	-	Karickhoff, S.W. (1981) Semi- empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments and soils. Chemosphere 10, 833–846..	p.623
30	logKoc	3.62	4168.693835		4.5～5.5	soil I-very strongly acid sandy soil pH 4.5 –5.5	その他, OECD 1981	-	-	-	-		2B	x	Sorption Partition Coefficient, log KOC at 25° C or as indicated; 3.62, 3.87, 4.23 (soil I-very strongly acid sandy soil pH 4.5–5.5, soil II-moderately or slightly acid loamy soil pH 5.6–6.5, soil III- slightly alkaline loamy soil pH 7.1–8.0, OECD 1981)	OECD (1981) OECD Guidelines for Testing of Chemicals. Section 1: Physical- Chemical Properties. Organization for Economic Cooperation and Development, Paris..	p.623
31	logKoc	3.87	7413.102413		5.6～6.5	soil II- moderately or slightly acid loamy soil pH 5.6–6.5	その他, OECD 1981	-	-	-	-		2B	x	Sorption Partition Coefficient, log KOC at 25° C or as indicated; 3.62, 3.87, 4.23 (soil I-very strongly acid sandy soil pH 4.5–5.5, soil II-moderately or slightly acid loamy soil pH 5.6–6.5, soil III- slightly alkaline loamy soil pH 7.1–8.0, OECD 1981)	OECD (1981) OECD Guidelines for Testing of Chemicals. Section 1: Physical- Chemical Properties. Organization for Economic Cooperation and Development, Paris..	p.623
32	logKoc	4.23	16982.43652		7.1～8	soil III- slightly alkaline loamy soil	その他, OECD 1981	-	-	-	-		2B	x	Sorption Partition Coefficient, log KOC at 25° C or as indicated; 3.62, 3.87, 4.23 (soil I-very strongly acid sandy soil pH 4.5–5.5, soil II-moderately or slightly acid loamy soil pH 5.6–6.5, soil III- slightly alkaline loamy soil pH 7.1–8.0, OECD 1981)	OECD (1981) OECD Guidelines for Testing of Chemicals. Section 1: Physical- Chemical Properties. Organization for Economic Cooperation and 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 [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 の誌非	値の種類	値の詳細	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
33		logKoc	3.5	3162.27766		7	Speyer soils	OECD TG 106 "Adsorption/D esorption" (SIDSの記載 による)	-	-	-	-		2B	○	Sorption Partition Coefficient, log KOC at 25° C or as indicated:3.50; 4.43; 3.21 (Speyer soils: pH 7.0, 0.69% OC; pH 5.8, 2.24% OC; pH 7.1, 1.12% OC at 0.15–0.5 mm, batch equilibrium-sorption isotherm, Rippen et al. 1982)	Rippen, G., Ilgenstein, M., Klopper, W., Poreniski, H.J. (1982) Screening of the adsorption behavior of new chemicals: natural soils and model adsorbents. Ecotox. Environ. Saf. 6, 236–245..	p.623
34		logKoc	4.43	26915.34804		5.8	Speyer soils	OECD TG 106 "Adsorption/D esorption" (SIDSの記載に よる)	-	-	-	-		2B	×	Sorption Partition Coefficient, log KOC at 25° C or as indicated:3.50; 4.43; 3.21 (Speyer soils: pH 7.0, 0.69% OC; pH 5.8, 2.24% OC; pH 7.1, 1.12% OC at 0.15–0.5 mm, batch equilibrium-sorption isotherm, Rippen et al. 1982) 外れ値より除外	Rippen, G., Ilgenstein, M., Klopper, W., Poreniski, H.J. (1982) Screening of the adsorption behavior of new chemicals: natural soils and model adsorbents. Ecotox. Environ. Saf. 6, 236–245..	p.623
35		logKoc	3.21	1621.810097		7.1	Speyer soils	OECD TG 106 "Adsorption/D esorption" (SIDSの記載に よる)	-	-	-	-		2B	○	Sorption Partition Coefficient, log KOC at 25° C or as indicated:3.50; 4.43; 3.21 (Speyer soils: pH 7.0, 0.69% OC; pH 5.8, 2.24% OC; pH 7.1, 1.12% OC at 0.15–0.5 mm, batch equilibrium-sorption isotherm, Rippen et al. 1982)	Rippen, G., Ilgenstein, M., Klopper, W., Poreniski, H.J. (1982) Screening of the adsorption behavior of new chemicals: natural soils and model adsorbents. Ecotox. Environ. Saf. 6, 236–245..	p.623
36		logKoc	3.11	1288.249552		7.5	soils: Alfisol 0.76% OC at pH 7.5	OECD TG 106 "Adsorption/D esorption" (SIDSの記載に よる)	-	-	-	-		2B	○	Sorption Partition Coefficient, log KOC at 25° C or as indicated:3.11; 3.16 (soils: Alfisol 0.76% OC at pH 7.5, Entisol 1.11% OC at pH 7.9, batch equilibrium- sorption isotherm, Rippen et al. 1982)	Rippen, G., Ilgenstein, M., Klopper, W., Poreniski, H.J. (1982) Screening of the adsorption behavior of new chemicals: natural soils and model adsorbents. Ecotox. Environ. Saf. 6, 236–245..	p.623
37		logKoc	3.16	1445.439771		7.9	soils: Entisol 1.11% OC at pH 7.9	OECD TG 106 "Adsorption/D esorption" (SIDSの記載に よる)	-	-	-	-		2B	○	Sorption Partition Coefficient, log KOC at 25° C or as indicated:3.11; 3.16 (soils: Alfisol 0.76% OC at pH 7.5, Entisol 1.11% OC at pH 7.9, batch equilibrium- sorption isotherm, Rippen et al. 1982)	Rippen, G., Ilgenstein, M., Klopper, W., Poreniski, H.J. (1982) Screening of the adsorption behavior of new chemicals: natural soils and model adsorbents. Ecotox. Environ. Saf. 6, 236–245..	p.623
38		logKoc	2.08[2.08 (range 2.08– 2.11)]	120.2264435			low organic carbon sediment f_OC = 0.0002	その他, column exptl.	-	-	-	-		2B	×	4.06 (range 3.95–4.15); 2.08 (range 2.08–2.11) (4° 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

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 [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 の誌非	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
39	logKoc	3.3	1995.262315			Offshore Grand Haven sediment	その他.batch equilibrium- sorption isotherm	-	-	-	-		2B	×		Voice, T.C., Weber Jr., W.J. (1985) Sorbent concentration effects in liquid/solid partitioning. Environ. Sci. Technol. 19(9), 789-796..	p.623
40	logKoc	2.67	467.7351413			Lula aquifer 0.032% OC	その他.batch equilibrium- sorption isotherm	-	-	-	-		2B	×	2.67, 2.77 (Lula aquifer 0.032% OC, Apalachee soil 1.4% OC, batch equilibrium- sorption isotherm, Stauffer & MacIntyre 1986)	Stauffer, T.B., MacIntyre, W.G. (1986) Sorption of low-polarity organic compounds on oxide minerals and aquifer material. Environ.Toxicol. Chem. 5, 949- 955..	p.623
41	logKoc	2.77	588.8436554			Apalachee soil 1.4% OC	その他.batch equilibrium- sorption isotherm	-	-	-	-		2B	○	2.67, 2.77 (Lula aquifer 0.032% OC, Apalachee soil 1.4% OC, batch equilibrium- sorption isotherm, Stauffer & MacIntyre 1986)	Stauffer, T.B., MacIntyre, W.G. (1986) Sorption of low-polarity organic compounds on oxide minerals and aquifer material. Environ.Toxicol. Chem. 5, 949- 955..	p.623
42	logKoc	2.95	891.2509381			sediment	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated,	4C	×		Paviou, S.P. (1987) The use of equilibrium partition approach in determining safe levels of contaminants in marine sediments, p.388-412. In: Fate and Effects of Sediments- Bound Chemicals in Aquatic Systems. Dickson, K.L., Maki, A.W., Brungs, W.A., Editors.	p.623
43	logKoc	2.93	851.1380382			sediment 4.02% OC from Tamar estuary	その他.batch equilibrium- GC	-	-	-	-		2B	×		Vowles, P.D., Mantoura, R.F.C. (1987) Sediment-water partition coefficients and HPLC retention factors of aromatic hydrocarbons.Chemosphere 16, 109-116..	p.623
44	logKoc	3.27	1862.087137			-	-	-	-	-	estimated by calculation	calculated-MCI χ	4C	×		Bahnick, D.A., Doucette, W.J. (1988) Use of molecular indices to estimate soil sorption coefficients for organic chemicals. Chemosphere 17(9), 1703-1715..	p.623
45	logKoc	3.02	1047.128548			-	-	-	-	-	その他,observed	-	2B	×	3.02; 2.89 (Aldrich and Fluka humic acid, observed; predicted, Chin et al. 1989)	Chin, Y.-P., Weber, Jr., W.J. (1989) Estimating the effects of dispersed organic polymers on the sorption contaminants by natural solid, 1. A predictive thermodynamic humic substance-organic solute interaction model. Environ. Sci. Technol. 23, 978-984..	p.623
46	logKoc	2.89	776.2471166			-	-	-	-	-	その他(推定 値),predicted	-	4C	×	3.02; 2.89 (Aldrich and Fluka humic acid, observed; predicted, Chin et al. 1989)	Chin, Y.-P., Weber, Jr., W.J. (1989) Estimating the effects of dispersed organic polymers on the sorption contaminants by natural solid, 1. A predictive thermodynamic humic substance-organic solute interaction model. Environ. Sci. 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 [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 の誌非	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
47	logKoc	2.73~3.91	2089.296131			aquifer 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℃	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℃	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℃	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℃	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 [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 の誌非	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
56	logKoc	2.97	933.2543008			modified EPA-6 sediments	その他.batch equilibrium- sorption isotherm	-	-	-	-		2B	×	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	×	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	×	-	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	×	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	×	-	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	×	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	×	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 [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 の誌非	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
64		logKoc	2.98	954.992586			sediment	-	-	-	-	その他,areal- based coeff. of flux studies of sediment/water boundary layer	-	2B	×	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	×	-	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	×	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	×	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	×	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	×	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 [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 の誌非	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
70	logKoc	4.12	13182.56739	20℃		-	-	-	-	-	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℃		-	-	-	-	-	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) この論文が引用したデータの 一部を採用する	Delle Site, A. (2001) Factors affecting sorption of organic compounds in natural sorbsent/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) 同上	Delle Site, A. (2001) Factors affecting sorption of organic compounds in natural sorbsent/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) 同上	Delle Site, A. (2001) Factors affecting sorption of organic compounds in natural sorbsent/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℃	4.89	Soil OC=10.4 %								○	Delle Site(2001)に記載され ているデータ 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 OC=0.11 %								○	Delle Site(2001)に記載され ているデータ 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 OC=1.2%								○	Delle Site(2001)に記載され ているデータ 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 [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 の誌非	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
76	logKoc	3.06	1148.153621			sediments OC ≥ 0.5%	その他,average values for sediments OC ≥ 0.5%	-	-	-	-		2B	×	3.06 (average values for sediments OC ≥ 0.5%, Delle Site 2001)	Delle Site, A. (2001) Factors affecting sorption of organic compounds in natural sorber/water systems and sorption coefficients for selected pollutants. A review. J. Phys. Chem. Ref. Data 30, 187-439..	p.623
77	logKoc	4.43	26915.34804			soil humic acid	その他,shake flask- HPLC/UV	-	-	-	-		2B	×	4.43 (soil humic acid, shake flask-HPLC/UV, Cho et al. 2002)	Cho, H.-H., Park, J.-W., Liu, C.K. (2002) Effect of molecular structures on the solubility enhancement of hydrophobic organic compounds by environmental amphiphiles. Environ. Toxicol. Chem. 21, 999-1003..	p.623
78	logKoc	2.48	301.995172	20℃	5.8	CSAC OC: 1.4%	その他,batch equilibrium- sorption isotherm measured by HPLC/UV	-	-	-	-		2B	○	元文献より	Bayard, R., Barna, L., Mahjoub, B., Gourdon, R. (1998) Investigation of naphthalene sorption in soils and soil fractions using batch and column assays. Environ. Toxicol. Chem. 17, 2383- 2390..	p.623
	logKoc	2.46	288.4031503	20℃	6.9	CSAP OC: 3.2%	その他,batch equilibrium- sorption isotherm measured by HPLC/UV						2B	○	元文献より	Bayard, R., Barna, L., Mahjoub, B., Gourdon, R. (1998) Investigation of naphthalene sorption in soils and soil fractions using batch and column assays. Environ. Toxicol. Chem. 17, 2383- 2390..	
	logKoc	2.53	338.8441561	20℃	5.2	Pequest OC: 1.4%	その他,batch equilibrium- sorption isotherm measured by HPLC/UV						2B	○	元文献より	Bayard, R., Barna, L., Mahjoub, B., Gourdon, R. (1998) Investigation of naphthalene sorption in soils and soil fractions using batch and column assays. Environ. Toxicol. Chem. 17, 2383- 2390..	
	logKoc	2.5	316.227766	20℃	5.3	Eurosoil III OC: 3.4%	その他,batch equilibrium- sorption isotherm measured by HPLC/UV						2B	○	元文献より	Bayard, R., Barna, L., Mahjoub, B., Gourdon, R. (1998) Investigation of naphthalene sorption in soils and soil fractions using batch and column assays. Environ. Toxicol. Chem. 17, 2383- 2390..	
	logKoc	2.52	331.1311215	20℃	7	Eurosoil IV OC: 1.5%	その他,batch equilibrium- sorption isotherm measured by HPLC/UV						2B	○	元文献より	Bayard, R., Barna, L., Mahjoub, B., Gourdon, R. (1998) Investigation of naphthalene sorption in soils and soil fractions using batch and column assays. Environ. Toxicol. Chem. 17, 2383- 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 [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 の誌非	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
79	logKoc	2.61	407.3802778			Woodburn soil foc=0.012 6	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, Choiu 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 cm³3/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 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 [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IIにおける キースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	0.00046 atm・ m ³ /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. EPA440/481014..	p.161
2 CRC	0.043 kPa・m ³ /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 ³ /mol	31					(Q)SAR		2C	×			
5 HSDB	4.4E-4 atm・m ³ /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 ³ /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 ³ /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 ³ /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 ³ /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 ³ /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 [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IIにおけ るキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
11	45 Pa・m ³ /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 ³ /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 ³ /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 ³ /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 ³ /mol	36.5			-	-	-		2B	×	-	Yuteri, C., Ryan, D.F., Callow, J.J., Gurol, 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 ³ /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 ³ /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. November</i> , 179-185.	p.623
18	47.1 Pa・m ³ /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 [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IIにお けるキースタ ディー	備考	文献	ページ番号等
19		42.6 Pa・m ³ /mol	42.6			-	-	-		2B	×	42.6* (gas stripping-GC, measured range 3.7–35.5°C, Alaee et al. 1996) In KAW = 13.95 – 5364.45/(T/K), temp range: 3.7–35.5°C (gas stripping-GC, Alaee et al. 1996)	Alaee, 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
20		26.2 Pa・m ³ /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, Alaee et al. 1996)	Alaee, 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
21		35.5 Pa・m ³ /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, Alaee et al. 1996)	Alaee, 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
22		48.1 Pa・m ³ /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, Alaee et al. 1996)	Alaee, 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
23	PhysProp	0.00044 atm・m ³ /mol	44.583			-	-	experimental result	-	2B	×	Mackayと同じ引用	SHIU,WY & MACKAY,D (1997).	p.1
24	SIDS	26.75 Pa・m ³ /mol	26.75	16.6°C				experimental result	naphthalene as 90	2B	×		Schwartz and Wasik (1977)	p.55
25		46.8 Pa・m ³ /mol	46.8	25.3°C				experimental 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 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
------	----	---	------	------------	----	-------	-----	-------------	--------------------------	------	---------	----	----	--------

基本情報

優先評価化学物質通し番号	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 ギースタディ の該当	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク	評価IIにおけ るギースタ ディー	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 concentratio ns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 (<i>Oncorhynchus kisutch</i>) and starry flounder (<i>Platichthys stellatus</i>).	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	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 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	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	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
19		-	2	0.15 ppm w/v	3 週	Rawデータ	-	36.5	36.5	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0058
20		-	2	0.15 ppm w/v	3 週	Rawデータ	-	45.1	45.1	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0058
21		-	2	0.15 ppm w/v	4 週	Rawデータ	-	70.9	70.9	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0058
22		-	2	0.15 ppm w/v	4 週	Rawデータ	-	61	61	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0058
23		-	2	0.15 ppm w/v	6 週	Rawデータ	-	79.8	79.8	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0058
24		-	2	0.15 ppm w/v	6 週	Rawデータ	-	103	103	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0058
25		-	2	0.15 ppm w/v	8 週	Rawデータ	-	168	168	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0058
26		-	2	0.15 ppm w/v	8 週	Rawデータ	-	111	111	化審法TG	-	-	-	experimental result	-	1A	×	-		K0058