既存化学物質安全性(ハザード)評価シート(要約版)

整理番号		99 - 22	官報公示 整理番号	3	- 2376	CAS 番号	108 - 94 - 1
名	称	別名:ケ	コヘキサノン トヘキサメチレ クロヘキシルク		構 造 式		0
分	子 式		$C_6H_{10}O$		分 子 量	·	98.14

市場で流通している商品(代表例)1)

純 度 : 99.5%以上

不純物 : シクロヘキサノール

添加剤又は安定剤:無添加

物理・化学的性状データ

外 観:無色液体^{2, 3)}

融 点:-32.1 3, 4)

沸 点:156 ⁴⁾

引 火 点:33 (c.c.)、54 (o.c.)⁵⁾

発 火 点:420 4)

爆発限界:1.1-9.4%4)

比 重: $d_4^{20}0.9478^{3, 6)}$

蒸 気 密 度: 3.38(空気 = 1)

蒸 気 圧: 0.45 kPa(3.4 mmHg)(20)、1.3 kPa(9.8 mmHg)(40)⁷⁾

分配係数: log Pow; 0.81(実測値)⁸⁾、0.86(計算値)⁸⁾

加水分解性:加水分解を受けやすい化学結合なし

解離定数:解離基なし

スペクトル:主要マススペクトルフラグメント

m/z 55(基準ピーク、1.0)、42(0.85)、98(0.31)⁹⁾

吸 脱 着 性:土壌吸着係数 Koc = 17¹⁰⁾

粒 度 分 布:該当せず

溶解性:シクロヘキサノン/水;23 g/ℓ(20)⁷⁾、50 g/ℓ(30)³⁾

アルコール、エーテル、ベンゼンなどの有機溶媒に可溶。

換算係数:1 ppm = 4.08 mg/m³ (気体, 20) 1 mg/m³ = 0.245 ppm

総合評価

1) 危険有害性の要約

本物質は眼、鼻、喉へ刺激性がある。ヒトでは急性影響として肝臓及び腎臓障害、接触性皮膚炎や中枢神経抑制作用が認められている。慢性影響としても肝臓障害がみられ、実験動物では水晶体の変性等も認められている。変異原性・遺伝毒性については、*in vitro*、*in vivo* 試験とも陽性の結果があるが、実験動物を用いた試験において明らかな発がん性は認められていない。実験動物において生殖・発生毒性は認められていない。

本物質は環境中に放出された場合、大気中での OH ラジカルとの反応による半減期は数日以内と計算され、太陽光による直接光分解による半減期は数日以内と計算される。水圏では主として生分解される。環境庁のモニタリングデータでは環境中から検出されていない。水圏環境生物に対する急性毒性は弱い。

2) 指摘事項

- (1) 眼、鼻、喉へ刺激性がある。
- (2) 肝臓、腎臓障害、接触性皮膚炎や中枢神経抑制作用がある。

参考資料

- 1) (社)日本化学工業協会調査資料(1999).
- 2) 有機合成化学協会編,有機化学物辞典,講談社(1985).
- 3) The Merck Index, 12th. Ed., Merck & Co., Inc. (1996).
- 4) IPCS, International Chemical Safety Cards (1997).
- 5) 後藤稠,池田正之,原一郎編,産業中毒便覧・増補版,医歯薬出版(1991).
- 6) 化学辞典, 東京化学同人(1994).
- 7) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3rd. Ed., Van Nostrand Reinhold Co. (1996).
- 8) 分配係数計算用プログラム " C Log P ", アダムネット(株).
- 9) NIST Library of 54K Compounds.
- 10) Hazardous Substances Data Bank (HSDB), U.S.National Library Medicine (1998).