

1 (案)

2  
3  
4 優先評価化学物質のリスク評価 (一次)

5 人健康影響及び生態影響に係る評価 II

6 物理化学的性状等の詳細資料

7  
8 二硫化炭素

9  
10 優先評価化学物質通し番号 1



15  
16 平成 30 年 9 月

17  
18 経済産業省

19  
20  
21

22

23

## 目 次

24 1 評価対象物質の性状 ..... 3

25 1-1 評価対象物質の設定 ..... 3

26 1-2 物理化学的性状及び濃縮性 ..... 3

27 1-3 分解性 ..... 7

28 2 【付属資料】 ..... 12

29 2-1 物理化学的性状等一覧 ..... 12

30 2-2 出典 ..... 12

31

## 32 1 評価対象物質の性状

33 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  
34 ータを示す。

35

### 36 1-1 評価対象物質の設定

37 評価対象物質は、二硫化炭素(以下「CS<sub>2</sub>」という。)とする。

38

39 表 1-1 評価対象物質の構造等

評価対象物質構造	S ≡ C ≡ S
評価対象物質名称	二硫化炭素
分子式	CS <sub>2</sub>
優先評価化学物質通し番号	1
CAS 登録番号	75-15-0

40

### 41 1-2 物理化学的性状及び濃縮性

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

44

45 表 1-2 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	—	76.15	—	76.15
融点	°C	-111.6 <sup>1, 2)</sup>	平均値	-111.6
沸点	°C	42.2 <sup>3)</sup>	101.325 kPa に換算した測定値	42.2
蒸気圧	Pa	19,400 <sup>3)</sup>	25 °Cでの測定値を 20 °Cに換算	19,424
水に対する溶解度	mg/L	2,900 <sup>3)</sup>	20 °Cでの測定値	2,900
1-オクタールと水との間の分配係数(logPow)	—	<u>2.11</u> <sup>4)</sup>	23±2 °Cでの測定値	2.7 <sup>3)</sup>
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	1,460 <sup>2, 5)</sup>	測定値	1,460
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	34 <sup>3)</sup>	測定値	34
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	60 <sup>2, 4, 6, 7)</sup>	コイでの測定値	60
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 <sup>8)</sup>	1
解離定数(pKa)	—	—	解離基なし	— <sup>9)</sup>

46 1) Merck (2013)

47 2) NITE (2005)

48 3) ECHA

49 4) MITI (1987)

50 5) PhysProp

51

6) HSDB

7) MOE (2005)

8) MHLW, METI, MOE (2014)

9) 評価Ⅰでは、解離定数は考慮しない

52 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

53

54 ①融点

55 評価Ⅰで採用した値 (-111.6 °C)は、信頼性の定まった情報源<sup>1</sup>である Merck (2013)、  
56 NITE (2005)に記載された値である。その他 Aldrich (2013)、ATSDR (1996)、CRC、EHC  
57 (1979)、HSDB、Mackay (2006)、MOE (2005)、PhysProp において示されている融点は、  
58 -112.1~-110.8 °Cの非常に狭い範囲にあり、その算術平均値も-111.6 °Cである。

59 よって、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、-111.6 °Cを採用する。

60

61 ②沸点

62 評価Ⅰで採用した値 (42.2 °C)は、REACH 登録情報 (ECHA)の key study として記載さ  
63 れている。これは、997~998 hPa にて OECD TG 103 に従って測定(GLP)された結果を  
64 101.325 kPa に換算した値である。その他標準圧力における値として、46.5 °C (NITE  
65 (2005))など 45.9~46.5 °Cの範囲にあるが、当該情報のみ測定値との記載がある。

66 よって、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、明確な試験方法で測定された 42.2 °Cを採用  
67 する。

68

69 ③蒸気圧

70 評価Ⅰで採用した値 (19,424 Pa)は、REACH 登録情報 (ECHA)の key study として記載  
71 されている。これは、25 °Cにて OECD TG 104 に従って測定(GLP)された結果を 20 °Cに  
72 換算した値である。その他、Mackay (2006)には試験方法の記載はないものの測定値として  
73 34,537 Pa (測定条件 24.582 °Cで 47,359 Pa を 20 °Cに換算した値)がある。

74 よって、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、明確な試験方法で測定された 19,424 Pa の  
75 有効桁数を考慮し、19,400 Pa として採用する。

76

77 ④水に対する溶解度

78 評価Ⅰで採用した値 (2,900 mg/L)は、REACH 登録情報 (ECHA)の key study として記  
79 載されている。これは、20 °Cにて OECD TG 105 に従って測定(GLP)された結果である。  
80 その他、PhysProp には試験方法の記載はないものの測定値として 2,160 mg/L (測定条件  
81 20 °C)がある。また、既存点検事業 (MITI (1988a))で OECD TG 105 に従って測定された  
82 結果は、1.78 g/L (測定条件 25±1 °C)であった。

83 よって、REACH 登録情報 (ECHA)及び既存点検事業 (MITI (1988a))の結果は共に  
84 OECD TG 105 に従っているが、ここでは、20~25 °Cで測定された試験であることを考慮  
85 し、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、2,900 mg/L を採用する。

---

<sup>1</sup> 「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のこと。

86

87 ⑤log Pow

88 評価Ⅰで採用した値 (2.7)は、REACH 登録情報 (ECHA)の key study として記載されて  
89 いる。これは、25 °Cにて OECD TG 117 (HPLC 法)に従って測定(GLP)された結果である。  
90 その他、NITE (2005)、PhysProp には測定条件等に関する記載はないが測定値として 1.94  
91 がある。なお、NITE (2005)は、EPI Suite (2012)の KowWin ver.1.66 の測定値を参照して  
92 いるが、その値は PhysProp のデータである。また、既存点検事業で微生物の分解度試験  
93 (MITI (1987))を行う際の参考として行われた OECD TG 107 (フラスコ振とう法)に従った  
94 測定結果(GLP)は、23±2 °Cで 2.11 であった。

95 よって、REACH 登録情報 (ECHA)及び既存点検事業 (MITI (1987))の結果は、OECD TG  
96 (117 及び 107)に従っているが、試験方法を考慮し、評価Ⅱにおいては、フラスコ振とう法  
97 で行われた既存点検事業 (MITI (1987))の 2.11 を採用する。

98

99 ⑥ヘンリー係数

100 評価Ⅰで採用した値 (1460 Pa・m<sup>3</sup>/mol)は、NITE (2005)、PhysProp、HSDB に記載さ  
101 れた測定値である。なお、NITE(2005)は EPI Suite (2012)の HenryWin ver.3.10 の測定値  
102 を採用しているが、その値は PhysProp のデータである。また、PhysProp 及び HSDB は、  
103 共に同じ文献 (Elliott S (1989)) を引用している。その他、Mackay (2006)では、1577 Pa・  
104 m<sup>3</sup>/mol (測定値)と記載されている。

105 よって、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、複数の情報源で採用されている 1460 Pa・  
106 m<sup>3</sup>/mol を採用する。

107

108 ⑦Koc

109 評価Ⅰで採用した値 (34 L/kg)は、REACH 登録情報 (ECHA)の key study として記載さ  
110 れている。この値は、OECD TG 121 に従って行われた測定値(GLP)である。その他、  
111 ATSDR(1996)及び CICAD (2002)では、log Koc として 1.8 (Koc = 63.1 L/kg)、1.79 (Koc =  
112 61.7 L/kg)との記載がある。また、EPI Suite (2012)の KocWin ver.2.00 による推定値では、  
113 前述の log Pow = 2.70 を用いた場合、MCI 法では 21.7 L/kg、log Pow 法では 67.7 L/kg と  
114 なる。

115 よって、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、明確な試験方法で測定された 34 L/kg を採用  
116 する。

117

118 ⑧BCF

119 評価Ⅰで採用した値 (60 L/kg)は、既存点検事業で調査された化審法に基づく試験 (MITI  
120 (1988b)) (GLP)の結果である。これは、コイを用いた 6 週間の化審法における濃縮度試験で、  
121 水中濃度が 0.05 mg/L 及び 0.005 mg/L における濃縮倍率はそれぞれ 6.1 未満及び 60 未満

122 であることから設定されている。その他、HSDB、MOE (2005)、NITE (2005)に情報があるが、全て既存点検事業の結果を採用している。

124 よって、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同様に、60 L/kg を採用する。

125

126 ⑨BMF

127 評価Ⅰで採用した値は、logPow (2.7)及び BCF (60 L/kg) 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。MHLW, METI, MOE(2014))に従って設定したものである。

130 よって、BMF の測定値が得られなかったことから、評価Ⅱにおいては、logPow (2.11) 及び BCF (60 L/kg)の値から、技術ガイダンス (MHLW, METI, MOE(2014))に従って 1 を用いる。

133

134 ⑩pKa

135 当該物質に解離基はない。

136

137 1-3 分解性

138 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

139

140

表 1-3 分解に係るデータのまとめ

項目		半減期 (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期		9 対流圏における総合的反応機序による推定値 <sup>1~3)</sup>
	機序別の半減期	OH ラジカルとの反応	5.5 反応速度定数(測定値) <sup>3~7)</sup> から、OH ラジカル濃度を $5 \times 10^5$ molecule/cm <sup>3</sup> として算出
		オゾンとの反応	NA
		硝酸ラジカルとの反応	41.8 反応速度定数(測定値) <sup>8)</sup> から、硝酸ラジカル濃度を $2.4 \times 10^8$ molecule/cm <sup>3</sup> として算出
水中	水中における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	5 OECD TG 301D の結果からガイダンスに従い半減期に変換 <sup>9)</sup>
		加水分解	365 加水分解反応を受ける化学結合はない <sup>5)</sup> が、pH13 における測定値を外挿 <sup>1~6, 10)</sup> し、OECD TG 111 <sup>11)</sup> を参考に修正
		光分解	NA
土壌	土壌における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	5 OECD TG 301D の結果からガイダンスに従い半減期に変換 <sup>9)</sup>
		加水分解	— 加水分解反応を受ける化学結合はない <sup>5)</sup> ことから、設定しない
底質	底質における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	20 土壌中の生分解半減期の4倍値 <sup>9)</sup>
		加水分解	— 加水分解反応を受ける化学結合はない <sup>5)</sup> ことから、設定しない

141 1) Mackay (2006)

142 2) Howard FATE (1989)

143 3) HSDB

144 4) CICAD (2002)

145 5) MOE (2003)

146 6) NITE (2005)

147

7) PhysProp

8) NIST

9) ECHA

10) MOE (2005)

11) OECD

NA:情報が得られなかったことを示す

148 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  
149 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。

150

151 ①大気

152 大気中での総括分解半減期に関し、Howard FATE (1989)、HSDB、Mackay (2006)に情  
153 報があった。Howard FATE (1989)及びHSDBでは、共に同じ文献を引用しており、光に  
154 よる直接的な分解減少はほぼ無視できるが、酸素存在下においては、一酸化炭素、硫化カ  
155 ルボニル、二酸化硫黄、ポリマーを形成し減少するとしている。また、対流圏における寿

156 命は、高高度にて濃度が急激に減少することが観測されており、これらの理由及び発生源  
157 の推計から、対流圏半減期は 8.9 日であるとしている。さらには、大気中で光化学的に生成  
158 された原子酸素及び OH ラジカルと CS<sub>2</sub> が反応することでの半減期が約 8.9 (= 9) 日と前  
159 述の値と同じであるとしている。Mackay (2006)では、Howard FATE を引用して 9 日とし  
160 ている。

161 よって、大気中における総括分解半減期は、対流圏における種々の反応等の機序を総合  
162 的に考慮して推定された(9 日)を採用する。

163

164 大気中における総括分解半減期に対する補足情報として、機序別の半減期に関する情報  
165 を以下に示す。

166

#### 167 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

168 大気中における OH ラジカルとの反応速度定数に関しては、 $4.3 \times 10^{-13}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s (測  
169 定法等不明) (ATSDR (1996))、 $1.1 \times 10^{-12} \sim 2.9 \times 10^{-12}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s (室温、相対法)  
170 (CICAD (2002)、MOE (2003))、 $2.9 \times 10^{-12}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s (24 °C、相対法) (HSDB、NITE  
171 (2005)、PhysProp)、 $8.0 \times 10^{-12}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s (-23 ~ 27 °C、引用文献推奨値)  
172 (MOE(2005))、 $2.0 \times 10^{-15} \sim 8.0 \times 10^{-12}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s (複数の測定結果、NIST)が得られ  
173 た。これらの反応速度定数の中で、最も多くの情報源で採用されている  $2.9 \times 10^{-12}$   
174 cm<sup>3</sup>/molecule/s とした場合、大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンス (MHLW, METI,  
175 MOE(2014))に従い  $5 \times 10^5$  molecule/cm<sup>3</sup> として半減期を算出すると 5.5 日となる。

176

#### 177 ①-2 オゾンとの反応の半減期

178 大気中におけるオゾンとの反応速度定数に関しては、情報が得られなかった。

179

#### 180 ①-3 硝酸ラジカルとの反応の半減期

181 大気中における硝酸ラジカルとの反応速度定数に関しては、測定値として  $4.00 \times 10^{-16}$   
182 cm<sup>3</sup>/molecule/s (絶対法、NIST)、各種文献レビュー及び推定値として  $8.00 \times 10^{-16} \sim 1.89$   
183  $\times 10^{-15}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s (NIST)が記載されている。測定値である反応速度定数  $4.00 \times 10^{-16}$   
184 cm<sup>3</sup>/molecule/s とした場合、大気中硝酸ラジカル濃度を技術ガイダンス (MHLW, METI,  
185 MOE(2014))に従い  $2.4 \times 10^8$  molecule/cm<sup>3</sup> として半減期を算出すると、41.8 日となる。

186

#### 187 ②水中

188 水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、生分解及び加水分解の各機  
189 序に関する情報が得られた。

190 なお、CS<sub>2</sub> が環境水中へ排出された場合、そのヘンリー係数及び蒸気圧を考慮すると、水  
191 面から CS<sub>2</sub> は揮発すると考えられ、水中での半減期は 11 分、モデル河川(水深 1 m、流速



192 1 m/sec、風速 3 m/sec)での半減期が 2.6 時間、モデル湖沼 (水深 1 m、流速 0.05 m/sec、  
193 風速 0.5 m/sec)での半減期が 3.5 日と推定されている(ATSDR (1996)、CICAD (2002)、  
194 Howard FATE (1989)、HSDB、NITE (2005))。

195

#### 196 ②-1 生分解の半減期

197 水中における生分解について、既存点検試験 (MITI (1975))の環保業第 5 号・薬発第 615  
198 号・49 基局 392 号の微生物等による化学物質の分解度試験 (GLP)では、分解度が酸素消費  
199 量による結果が 59.1 %、TOC 計では 0 %、吸光光度計では 39.0 %であるとの記載がある。  
200 この試験においては、水系での試料残留が極端に少なく 2 週間の試験期間中に揮発したと  
201 考察されている。また、既存点検試験 (1987) では、前述と同じく環保業第 5 号・薬発第  
202 615 号・49 基局 392 号の微生物等による化学物質の分解度試験 (GLP)において、28 日間の  
203 GC 法で 0 ~ 5 %であるとの記載がある。この試験においては、CS<sub>2</sub> と炭酸ガス吸収剤で  
204 あるソーダライムとの反応及び CS<sub>2</sub> の揮発が予想されたため、密閉びんを用いたソーダラ  
205 イム有り及び無し系の水 + 被験物質系の保持試験を実施し、GC 分析により被験物質を定  
206 量している。この結果、CS<sub>2</sub> はソーダライム存在下で残留が低く、ソーダライムと反応する  
207 ものと考えられ、ソーダライムを用いる閉鎖系酸素消費量測定装置による生物化学的酸素  
208 要求量 BOD の測定は不可能であると判断し、GC 分析による直接定量法により分解度を算  
209 出したと考察されている。この既存点検試験 (MITI (1987))の結果を基に、分解度は  
210 2 % (HSDB、NITE (2005)、MOE (2005))又は 0 % (MOE (2003))であるとの記載がある。一  
211 方で、REACH 登録情報 (ECHA)では、OECD TG 301 D (GLP)に基づき、80 %以上 (DOC  
212 removal)との記載がある。

213 以上の情報から、水中の生分解半減期については、試験条件等を考慮し、OECD TG 301  
214 D の試験結果である分解度 80 %以上を採用し、これをガイダンスに従い生分解半減期へ換  
215 算した (5 日)を採用する。ただし、前述のように、生分解半減期と水中での揮発による半減  
216 期を比較すると、揮発による半減期は、最も期間が長いモデル湖沼においても 3.5 日であ  
217 るため、水中の生分解半減期 5 日と比較すると短いことに留意する必要がある。

218

#### 219 ②-2 加水分解の半減期

220 水中における加水分解について、CS<sub>2</sub> には加水分解されやすい化学結合がないとの記載が  
221 ある (MOE (2003))。一方で、25 °C、pH 13 の環境において加水分解による半減期は 1 時  
222 間であり (測定値)、これを 25 °C、pH 9 の環境に外挿すると半減期が 1.1 年となるとの記  
223 載がある (ATSDR (1996))。また、この加水分解による半減期 1.1 年 (測定値の外挿、約 402 日)  
224 については、複数の情報源で採用されている (CICAD (2002)、Howard FATE (1989)、HSDB、  
225 Mackay (2006)、MOE (2003 及び 2005)、NITE (2005))。

226 よって、水中における加水分解の半減期については、測定値である 25 °C、pH 13 での半  
227 減期 1 時間を採用し、これを pH 7 の環境に外挿すると半減期が 41,667 日となる。ただし、

228 OECD TG 111 において、加水分解半減期が 1 年以上となる場合、加水分解的には安定である  
229 ることからこれ以上の追加の試験を求めている。そのため、半減期 41,667 日は 1 年以上  
230 であることから、加水分解半減期を (365 日)とする。

231

#### 232 ②-3 光分解の半減期

233 水中における光分解の半減期に関しては、情報が得られなかった。

234

#### 235 ③土壌

236 土壌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、生分解の機序別の半減期  
237 に関する情報が得られた。

238

#### 239 ③-1 生分解の半減期

240 土壌中における生分解については、情報が得られなかったが、CS<sub>2</sub>は土壌消毒剤としてバ  
241 クテリアに対して毒性を示すため、微生物分解は期待できないとの記載があり(NITE  
242 (2005))、また、蒸気圧及び土壌吸着性に基づき土壌からは速やかに揮発するとの記載があ  
243 る(HSDB、CICAD (2002)、Howard FATE (1989))。

244 よって、土壌中における生分解については、情報が得られていないことから水中におけ  
245 る生分解と同様に(5 日)とする。

246 ただし、前述のように、土壌からCS<sub>2</sub>は速やかに揮発するものと考えられることから、生  
247 分解半減期5 日を迎える前に大気中へ揮発してしまう可能性があることに留意する必要が  
248 ある。

249

#### 250 ③-2 加水分解の半減期

251 土壌中における加水分解については、情報が得られなかった。ただし、CS<sub>2</sub>は加水分解反  
252 応を受ける化学結合はない(MOE (2003))との記載もあることから、評価Ⅱでは土壌中にお  
253 ける加水分解の半減期は設定しない。

254

#### 255 ④底質

256 底質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、生分解の機序別の半減期  
257 に関する情報が得られた。

258

#### 259 ④-1 生分解の半減期

260 生分解については、情報が得られなかった。

261 よって、底質中における生分解半減期については、情報が得られていないことから土壌  
262 中の生分解と同様の値を採用することとし、ガイダンスに従い、土壌中における生分解半  
263 減期の4倍の値 (20 日)とする。

264       ただし、CS<sub>2</sub>は有機物質への吸着に対する親和性は低いと考えられることから、底質に分  
265 配及び残留する可能性は非常に低い(CICAD (2002))。また、前述のように CS<sub>2</sub>は揮発性が  
266 高いことから、ほとんどの場合、種々の分解過程を経る前の段階で大気中に揮発する可能  
267 性があることに留意する必要がある。

268

269       ③-2 加水分解の半減期

270       底質中の加水分解については、情報が得られなかった。ただし、CS<sub>2</sub>は加水分解反応を受  
271 ける化学結合はない(MOE (2003))との記載もあることから、評価Ⅱでは底質中における加  
272 水分解の半減期は設定しない。

273

274 **2 【付属資料】**

275 **2-1 物理化学的性状等一覧**

276 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

277

278 **2-2 出典**

279

280 Aldrich (2013): Sigma-Aldrich 試薬カタログ, 2013.

281 ATSDR (1996): U.S. DEPARTMENT OF HEALTH AND HUMAN SERVICES, Public Health  
282 Service, Agency for Toxic Substances and Disease Registry. Toxicological Profiles For Carbon  
283 Disulfide, 1996.

284 CICAD (2002): Concise International Chemical Assessment Document 46, Carbon Disulfide, 2002

285 CRC: Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 96th ed., CRC Press,  
286 2015-2016.

287 ECHA: European Chemicals Agency. Information on Chemicals - Registered substances.

288 <http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>,  
289 (2017-10-05 閲覧).

290 EHC (1979): World Health Organization. International Programme on Chemical Safety,  
291 Environmental Health Criteria 10, Carbon Disulfide, 1979.

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

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

295 HSDB: US National Institutes of Health. Hazardous Substances Data Bank (HSDB).

296 <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, (2017-10-05 閲覧).

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

299 Merck (2013): The Merck Index, 15th Edition. Merck & Co. Inc.

300 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ド  
301 ンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

- 302 MITI (1975): 二硫化炭素 (試料 No.K-53) の分解度試験. 昭和 49 年度特定化学品安全対策  
303 費補助金事業, 1975.
- 304 MITI (1987): 二硫化炭素 (被験物質番号 No.K-53) の微生物による分解度試験. 既存化学物  
305 質点検, 1987.
- 306 MITI (1988a): 二硫化炭素 (被験物質番号 No.K-53) の物理化学性状の測定. 既存化学物質  
307 点検, 1988.
- 308 MITI (1988b): 二硫化炭素 (被験物質番号 No.K-53) のコイにおける濃縮度試験. 既存化学物  
309 質点検, 1988.
- 310 MOE (2003): 環境省. 化学物質の生態リスク初期評価 第 2 巻, 二硫化炭素. 2003.
- 311 MOE (2005): 環境省. 化学物質の環境リスク初期評価 第 4 巻, 二硫化炭素. 2005.
- 312 NIST: The National Institute of Standards and Technology (NIST). NIST Chemistry WebBook.  
313 <http://webbook.nist.gov/chemistry/>, (2017-10-05 閲覧).
- 314 NITE (2005): NITE. 化学物質の初期リスク評価書, 二硫化炭素. Ver. 1.0, No. 10, 2005.
- 315 PhysProp: Syracuse Research Corporation (SRC). SRC PhysProp Database. (2017-10-05 閲覧).
- 316

情報源略称	詳細等
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
CCD	Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, Version 2013, CRC-Press
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
IUCLID	IUCLID
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」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
REACH登録情報	REACH登録情報
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

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
2 Aldrich	融点	-112~-111 °C	-111.5					-		2B	×				p.619
5 ATSDR	融点	-110.8 °C	-110.8	-	-	-	-	-		2B	×			Weast RC. 1989. CRC Handbook of chemistry and physics. 70th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Incorporated, B-82	p.117
6 ATSDR	融点	-111.5 °C	-111.5	-	-	-	-	-		2B	×			HSDB. 1995. Hazardous Substances Data Bank. Bethesda, MD: National Institutes of Health, National Library of Medicine.	p.117
8 CCD	凝固点	-111 °C	-111					-		2B	×				
12 CRC	融点	-111.7 °C[- 111.7(0.3)]	-111.7					-		2B	×				Physical Constants of Organic Compounds
13 CRC	融点	-112.1 °C	-112.1					-		2B	×				Physical Constants of Inorganic Compounds
14 CRC	融点	-112.1 °C	-112.1					-		2B	×				Enthalpy of Fusion
15 CRC	融点	-111.7 °C	-111.7					-		2B	×				Laboratory Solvents and Other Liquid Reagents
17 EHC	融点	-111.53 °C	-111.53	-	-	-	-	-		2B	×			WEAST, R. C. (1974) Handbook of Chemistry and Physics, 55th ed., Cleveland, CRC Press, pp. C-234-235; D-85; D-163.. FAITH, W. L., KEYES, D. B., & CLARK, R. L. (1965) Industrial Chemicals, 3rd ed., New York, John Wiley & Sons, pp. 226-227	2.1 Chemical and Physical Properties
19 EPI Suite	融点	-77.02 °C	-77.02	MPBPWIN				(Q)SAR	Mean Value	2C	×				
21 HSDB	融点	-112.1 °C	-112.1					-		2B	×			Lide, D.R. CRC Handbook of Chemistry and Physics 86TH Edition 2005-2006. CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, FL 2005. p. 3-88	Chemical/Physical Properties: > Melting Point:
22 IUCLID	融点	-122 °C	-122							4A	×				p.17
23 IUCLID	融点	-111.6 °C	-111.6							4A	×	○			p.17
24 IUCLID	融点	-111.6 °C	-111.6							4A	×	○			p.17
25 IUCLID	融点	-111.6 °C	-111.6							4A	×	○			p.17
26 IUCLID	融点	-111.6 °C	-111.6							4A	×	○			p.17
27 IUCLID	融点	-111.6 °C	-111.6							4A	×	○			p.17
28 IUCLID	融点	-111.6 °C	-111.6							4A	×	○			p.17
29 IUCLID	融点	-111.5 °C	-111.5							4A	×				p.17
30 IUCLID	融点	-111.5 ° C[Decomp osition: ambiguous 1]	-111.5							4A	×				p.17
32 Mackay	融点	-112.1 °C	-112.1					-		2B	×			Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, CRC Press, LLC, Boca Raton, FL.	p.3383

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
34 Merck	融点	-111.6 °C	-111.6	-	-	-	-	-		2B	○	○			
38 MOE初期評 価	融点	-111.5 °C	-111.5					-		2B	×			Lide, D.R. (ed.) (1995-1996): CRC Handbook of Chemistry and Physics. 76th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., p. 3-110	p.1
39 MOE初期評 価	融点	-111.5 °C	-111.5					-		2B	×			Lide, D.R. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 76th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 1995-1996.,p. 3-110. [Hazardous Substances Data Bank (以下 HSDB)]	p.1
40 MOE初期評 価	融点	-111.5 °C	-111.5					-		2B	×			Lide, D.R. ed. (2002-2003): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 83rd ed., Boca Raton, London, New York, Washington D.C. CRC Press: 3-110	p.1
42 NITE初期リ スク評価書	融点	-111.6 °C	-111.6					-		2B	○	○		Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.	p.2
44 PhysProp	融点	-111.5 °C	-111.5					-		2B	×				Melting Pt
47 REACH登録 情報	凝固点	<-76 °C	-76	OECD TG 102	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×			study report, 2010, 2010-09-22	Exp Key Melting point/freezing point.001
48 REACH登録 情報	融点	-112.1 °C	-112.1	no data	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×			secondary source, 2005	Exp Key Melting point/freezing point.001
52 既存点検事 業	融点	-111 °C[162K(-111°C)]	-111					-		4A	×			化学大辞典 (共立出版株式会社) .	K0053
53 既存点検事 業	融点	-111 °C	-111					-		4A	×			化学大辞典 (共立出版)	K0053
54 既存点検事 業	融点	-111 °C	-111					-		4A	×			化学大辞典 (共立出版)	K0053



PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲ 沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
2 Aldrich	46 °C	46	46	760 mmHg					-		2B	×				p.619
4 ATSDR	46.5 °C	46.5	46.5	760 Torr	-	-	-	-	-		2B	×			Windholz M, ed. 1983. The Merck Index. 10th ed. Rahway, NJ: Merck and Co., Inc., 251..	p.117
6 CCD	46.3 °C	46.3	46.3	760 mmHg					-		2B	×				
11 CRC	46.2 ° C[46.2(0.1 )]	46.2	46.2	101.325 kPa[760 mmHg (101.325 kPa)]					-		2B	×				Physical Constants of Organic Compounds
12 CRC	46 °C	46	46	101.325 kPa[101.3 25 kPa or 760 mmHg]					-		2B	×				Physical Constants of Inorganic Compounds
13 CRC	319 K	45.85	319	101.325 kPa[101.3 25 kPa (1 atmospher e)]					-		2B	×		Ambrose, D ., "Vapor-Liquid Constants of Fluids," in Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds, Stevenson, R . M ., and Malanowski, S ., Eds ., Elsevier, New York 1987	Critical Constants of Inorganic Compounds	
14 CRC	46 °C	46	46	101.325 kPa[101 .325 kPa (760 mmHg)]					-		2B	×				Enthalpy of Vaporization
15 CRC	46.2 °C	46.2	46.2	101.325 kPa					-		2B	×				DEPENDENCE OF BOILING POINT ON PRESSURE
16 CRC	46.2 °C	46.2	46.2	760 mmHg[Nor mal boiling pointの為 760 mmHg とした。]					-		2B	×				Laboratory Solvents and Other Liquid Reagents
17 CRC	46.2 °C	46.2	46.2	101.325 kPa					-		2B	×				Flammability of Chemical Substances
19 EHC	46.3 °C	46.3			-	-	-	-	-		4A	×			WEAST, R. C. (1974) Handbook of Chemistry and Physics, 55th ed., Cleveland, CRC Press, pp. C-234-235; D-85; D-163.. FAITH, W. L., KEYES, D. B., & CLARK, R. L. (1965) Industrial Chemicals, 3rd ed., New York, John Wiley & Sons, pp. 226-227	2.1 Chemical and Physical Properties
21 EPI Suite	34.75 °C	34.75			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method	2C	×				

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
23 HSDB	46 °C	46	46	760 mmHg					-		2B	×			Lide, D.R. CRC Handbook of Chemistry and Physics 86TH Edition 2005-2006. CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, FL 2005. p. 3-88	Chemical/Physical Properties: > Boiling Point:
24 IUCLID	46~47 °C	46.5	46.50719	1013 hPa							4A	×				p.17
25 IUCLID	46 °C	46	46.00718	1013 hPa							4A	×				p.17
26 IUCLID	46 °C	46	46.00718	1013 hPa							4A	×				p.18
27 IUCLID	46 °C	46	46.00718	1013 hPa							4A	×				p.18
28 IUCLID	46 °C	46	46.00718	1013 hPa							4A	×				p.18
29 IUCLID	46 °C	46	46.00718	1013 hPa							4A	×				p.18
30 IUCLID	46.2 °C [Decomposition: ambiguous]	46.2	46.58082	1000 hPa							4A	×				p.18
31 IUCLID	46.3 °C	46.3	46.30719	1013 hPa							4A	×				p.18
32 IUCLID	46.5 °C	46.5									4A	×				p.18
34 Mackay	46 °C	46							-		4A	×			Lide, D.R., Editor (2003) Handbook of Chemistry and Physics. 84th Edition, CRC Press, LLC, Boca Raton, FL.	p.3383
42 Merck	-73.8 °C	-73.8	-55.6447	1 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×				
43 Merck	-44.7 °C	-44.7	-24.14119	10 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×				
44 Merck	-5.1 °C	-5.1	16.12781	100 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×				
45 Merck	28 °C	28	41.00861	400 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×				
46 Merck	46.5 °C	46.5	46.5	760 mmHg	-	-	-	-	-		2B	×				
47 Merck	69.1 °C	69.1	37.88937	2 atm	-	-	-	-	-		2B	×				
48 Merck	104.8 °C	104.8	-33.06482	5 atm	-	-	-	-	-		2B	×				
52 MOE初期評価	46 °C	46							-		4A	×			Lide, D.R. (ed.) (1995-1996): CRC Handbook of Chemistry and Physics. 76th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc. p. 3-110.	p.1
53 MOE初期評価	46 °C	46	46	760 mmHg					-		2B	×			Lide, D.R. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 76th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 1995-1996..p. 3-110. [Hazardous Substances Data Bank (以下、HSDB)]	p.1
54 MOE初期評価	46 °C	46	46	760 mmHg					-		2B	×			Lide, D.R. ed. (2002-2003): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 83rd ed., Boca Raton, London, New York, Washington D.C., CRC Press: 3-110.	p.1
56 NITE初期リスク評価書	46.5 °C	46.5	46.50719	1.013E+05 Pa					-		2B	×			Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.	p.2
58 PhysProp	46 °C	46							-		4A	×				Boiling Pt

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

沸点

収集データ

	情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
61	REACH登録 情報	42.2 °C	42.2	42.64701	997~998 hPa[> 997 < 998 hPa]	OECD TG 103	yes (incl. certificat e)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	○		study report, 2010, 2010-09-22	Exp Key Boiling point.001
62	REACH登録 情報	46 °C	46	46.00718	1013 hPa	no data	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×			secondary source, 2005	Exp Key Boiling point.001
66	既存点検事 業	46.3 ° C[319.5K(- 46.3°C)]	46.3							-		4A	×			化学大辞典（共立出版株式会社）	K0053
67	既存点検事 業	46.3 °C	46.3							-		4A	×			化学大辞典（共立出版）	K0053
68	既存点検事 業	46.3 °C	46.3							-		4A	×			化学大辞典（共立出版）	K0053

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価 I)	キースタディ該非 (評価 I)	キースタディ該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	5.83 psi[anhydrous, >=99%]	40196.45	40196.45	20 °C							2B	×				p.619
2 Aldrich	19.48 psi[CHROMASOLV, for HPLC, >=99.9%]	134309.9	15060.23	55 °C							4A	×				p.619
9 ATSDR	127 mmHg	16931.94	34943.31	10 °C	-	-	-	-	-		2B	×		Flick EW. 1985. Industrial solvents handbook. 3rd ed. Park Ridge, NJ: Noves Publications. 173..	p.118	
10 ATSDR	200 mmHg	26664.47	55028.84	10 °C	-	-	-	-	-		2B	×		Verschuere K. 1983. Handbook of environmental data on organic chemicals. 2nd ed. New York, NY: Van Nostrand Reinhold Co., 340-341	p.118	
11 ATSDR	260 mmHg	34663.82	34663.82	20 °C	-	-	-	-	-		2B	×		Verschuere K. 1983. Handbook of environmental data on organic chemicals. 2nd ed. New York, NY: Van Nostrand Reinhold Co., 340-341	p.118	
12 ATSDR	297.5 mmHg	39663.4	39663.4	20 °C	-	-	-	-	-		2B	×		Timmerman RW. 1978. Carbon disulfide. In: Grayson M, ed. Kirk-Othmer encyclopedia of chemical technology. Vol. 4, 3rd ed. New York, NY: John Wiley. 743	p.118	
13 ATSDR	352.6 mmHg	47009.47	33325.13	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×		Worthing CR, ed. 1987. The pesticide manual: A world compendium. 8th ed. Suffolk, Great Britain: The Lavenham Press Ltd, 2030..	p.118	
14 ATSDR	430 mmHg	57328.62	29138.91	30 °C	-	-	-	-	-		2B	×		Verschuere K. 1983. Handbook of environmental data on organic chemicals. 2nd ed. New York, NY: Van Nostrand Reinhold Co., 340-341	p.118	
16 CICAD	48.21 kPa	48210	34176.2	25 °C	-	-	-	-	-		2B	×		-	2. IDENTITY AND PHYSICAL/CHEMICAL PROPERTIES	
18 CRC	10 Pa	10	6824401	-96 °C						外挿 (補外)	4C	×		Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994.	Vapor Pressure	
19 CRC	100 Pa	100	2179679	-76 °C						外挿 (補外)	4C	×		Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994.	Vapor Pressure	

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価 I)	キースタディ該非 (評価 I)	キースタディ該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
20	CRC	1 kPa	1000	552859	-49 °C					外挿 (補外)	4C	×			Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994.	Vapor Pressure
21	CRC	10 kPa	10000	112144.5	-10.9 °C				-		4A	×			Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994.	Vapor Pressure
22	CRC	100 kPa	100000	18912.04	45.9 °C				-		4A	×			Lide, D.R., and Kehiaian, H.V., CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 1994.	Vapor Pressure
23	CRC	48.2 kPa	48200	34169.11	25 °C				-		2B	×				Laboratory Solvents and Other Liquid Reagents
25	EHC	53.3 kPa[53.3 kPa (400 mmHg)]	53300	30906.32	28 °C	-	-	-	-		2B	×		53.3 kPa (400 mmHg)	WEAST, R. C. (1974) Handbook of Chemistry and Physics, 55th ed., Cleveland, CRC Press, pp. C-234-235; D-85; D-163.. FAITH, W. L., KEYES, D. B., & CLARK, R. L. (1965) Industrial Chemicals, 3rd ed., New York, John Wiley & Sons, pp. 226-227.	2.1 Chemical and Physical Properties
26	EPI Suite	45300 Pa[2B以上の値を用いて推定 (2C) 1]	45300	32113.29	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR	2C	×				
28	HSDB	359 mmHg	47862.73	33930.02	25 °C				-		2B	×			Yaws CL; Handbook of Vapor Pressure, Vol 1, Houston, TX: Gulf Pub Co. (1994)	Chemical/Physical Properties: > Vapor Pressure:
29	IUCLID	169.7 hPa	16970	76214.15	0 °C						4A	×				p.19
30	IUCLID	397.6 hPa	39760	39760	20 °C						4A	×				p.20
31	IUCLID	397.6 hPa	39760	39760	20 °C						4A	×				p.20
32	IUCLID	400 hPa	40000	40000	20 °C						4A	×				p.20
33	IUCLID	400 hPa	40000	40000	20 °C						4A	×				p.20
34	IUCLID	400 hPa	40000	40000	20 °C						4A	×				p.20
35	IUCLID	3900 hPa	390000	390000	20 °C						4A	×				p.20
36	IUCLID	580.3 hPa	58030	29495.41	30 °C						4A	×				p.20
37	IUCLID	580.3 hPa	58030	29495.41	30 °C						4A	×				p.21
38	IUCLID	580.3 hPa	58030	29495.41	30 °C						4A	×				p.21
39	IUCLID	580.3 hPa	58030	29495.41	30 °C						4A	×				p.21
40	IUCLID	264.1 hPa	26410	54503.67	10 °C						4A	×				p.19
41	IUCLID	264.1 hPa	26410	54503.67	10 °C						4A	×				p.19
42	IUCLID	264.1 hPa	26410	54503.67	10 °C						4A	×				p.19
43	IUCLID	264.1 hPa	26410	54503.67	10 °C						4A	×				p.20
44	IUCLID	396.6 hPa	39660	39660	20 °C						4A	×				p.20
45	IUCLID	397 hPa	39700	39700	20 °C						4A	×				p.20
46	IUCLID	397.6 hPa	39760	39760	20 °C						4A	×				p.20
47	IUCLID	397.6 hPa	39760	39760	20 °C						4A	×				p.20

PACS_F等	1000
PACS_Name等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ)	キースタディ該非 (評価Ⅰ)	キースタディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
53 Mackay	53329 Pa	53329	30923.13	28 °C					-		2B	×			Stull, D.R. (1947) Vapor pressure of pure substances: Organic compounds. Ind. Eng. Chem. 39(4), 517-560.	p.3383
54 Mackay	47359 Pa	47359	34537.26	24.582 °C	その他, comparative ebulliometry				experimental result		2B	×			Waddington, G., Smith, J.C., Williamson, K.D., Scott, D.W. (1962) Carbon disulfide as a reference substance for vapor-flow calorimetry; the chemical thermodynamic properties. J. Am. Chem. Soc. 66, 1074-1077.	p.3383
55 Mackay	49704 Pa	49704	33090.92	25.931 °C					-		2B	×			Boublik, T., Aim, K.I. (1972) Collection Czech. Chem. Comm. 37, 3513.—reference from Boublik et al. 1984. Boublik, T., Fried, V., Hala, E. (1984) The Vapour Pressures of Pure Substances. Second Edition, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands.	p.3383
56 Mackay	48210 Pa	48210	34176.2	25 °C					-		2B	×			Riddick, J.A., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents. 4th Edition. John Wiley and Sons, New York.	p.3383
57 Mackay	39597 Pa	39597	39597	20 °C					-		2B	×			Howard, P.H., Editor (1990) Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. Vol. II, Solvents. Lewis Publishers, Chelsea, MI.	p.3384
61 MOE初期評価	359 mmHg	47862.73	33930.02	25 °C					-		2B	×			Yaws, C.L. (1994): Handbook of Vapor Pressure, Vol. 1, Houston, TX: Gulf Pub Co.	p.1
62 MOE初期評価	359 mmHg	47862.73	33930.02	25 °C					-		2B	×			Yaws CL; Handbook of Vapor Pressure, Vol 1, Houston, TX: Gulf Pub Co. (1994). [HSDB]	p.1
63 MOE初期評価	4.77E+04 Pa[358 mmHg (= 4.77×10 <sup>4</sup> Pa) (25°C)]	47700	33814.66	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: 54.	p.1
67 NITE初期リスク評価書	26.4 kPa	26400	54483.03	10 °C					-		2B	×			Verschueren, K (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, NY. Wakatsuki, T. and Higashikawa, H. (1959) Experimental studies on CS2 and H2S poisoning the histological changes in hemopoietic organs and other main internal organs. Shikoku Igaku Zasshi 14, 540-554.	p.2

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
68 NITE初期リス ク評価書	39.8 kPa	39800	39800	20 °C					-		2B	×			Verschuere, K (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, NY. Wakatsuki, T. and Higashikawa, H. (1959) Experimental studies on CS2 and H2S poisoning the histological changes in hemopoietic organs and other main internal organs. Shikoku Jyaku Zasshi 14, 540-554.	p.2
69 NITE初期リス ク評価書	58.0 kPa	58000	29480.16	30 °C					-		2B	×			Verschuere, K (2001) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 4th ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, NY. Wakatsuki, T. and Higashikawa, H. (1959) Experimental studies on CS2 and H2S poisoning the histological changes in hemopoietic organs and other main internal organs. Shikoku Jyaku Zasshi 14, 540-554.	p.2
71 PhysProp	359 mmHg	47862.73	33930.02	25 °C					experiment al result		2B	×			YAWS,CL (1994)	Vapor Pressure
74 REACH登録 情報	27400 Pa	27400	19423.93	25 °C	OECD TG 104	yes (incl. certificat e)	1: reliable without restriction	key study	experiment al result		1A	○	○		study report, 2010, 2010-09-22	Exp Key Vapour pressure.001
75 REACH登録 情報	479 hPa	47900	33956.44	25 °C	no data	no data	2: reliable with restrictions	key study	experiment al result		4A	×			secondary source, 1994	Exp Key Vapour pressure.001
78 既存点検事業	400 mmHg	53328.95	30923.1	28 °C					-		4A	×			化学便覧 (日本化学会編)	K0053
79 既存点検事業	400 mmHg	53328.95	30923.1	28.0 °C					-		4A	×			化学便覧 (日本化学会編)	K0053

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

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Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
3 ATSDR	2940 mg/L	2940	2940	20 °C		-	-	-	-	-		2B	×			Windholz M, ed. 1983. The Merck Index. 10th ed. Rahway, NJ: Merck and Co., Inc., 251..	p.117
4 ATSDR	2300 mg/L	2300	2236.9345	22 °C		-	-	-	-	-		2B	×			Verschueren K. 1983. Handbook of environmental data on organic chemicals. 2nd ed. New York, NY: Van Nostrand Reinhold Co., 340-341..	p.117
6 CCD	[slightly soluble]	単位換算不可								-		3	×				
8 CICAD	2100 mg/L	2100	2100	20 °C		-	-	-	-	-		2B	×		-	-	2. IDENTITY AND PHYSICAL/CHEMICAL PROPERTIES
12 CRC	[soluble]	単位換算不可								-		3	×				Physical Constants of Organic Compounds
13 CRC	[insoluble]	単位換算不可								-		3	×				Physical Constants of Inorganic Compounds
14 CRC	2.10 g/kg	2100	2100	20 °C						-		2B	×			Riddick, J. A., Bunger, W. B., and Sakano, T. K., Organic Solvents, Fourth Edition, John Wiley & Sons, New York, 1986.	Aqueous Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds
16 EHC	0.2 g/100 ml	2000	2000	20 °C		-	-	-	-	-		2B	×		0.2 g/100 ml at 20° C	WEAST, R. C. (1974) Handbook of Chemistry and Physics, 55th ed., Cleveland, CRC Press, pp. C-234-235; D-85; D-163.. FAITH, W. L., KEYES, D. B., & CLARK, R. L. (1965) Industrial Chemicals, 3rd ed., New York, John Wiley & Sons, pp. 226-227	2.1 Chemical and Physical Properties
17 EPI Suite	554 mg/L[2B以上の値を用いて推定(2C)]	554	517.162566	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×				
19 HSDB	2160 mg/L	2160	2016.37391	25 °C						-		2B	×			Yalkowsky, S.H., He, Yan., Handbook of Aqueous Solubility Data: An Extensive Compilation of Aqueous Solubility Data for Organic Compounds Extracted from the AQUASOL dATABASE. CRC Press LLC, Boca Raton, FL, 2003.. p. 19	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
20 IUCLID	2 g/L	2000	2000	20 °C								4A	×				p.21
21 IUCLID	2 g/L[of very low solubility]	2000	2000	20 °C								4A	×				p.21
22 IUCLID	2.1 g/L	2100	2100	20 °C								4A	×				p.22
23 IUCLID	2.1 g/L	2100	2100	20 °C								4A	×				p.22
24 IUCLID	2.1 g/L	2100	2100	20 °C								4A	×				p.22
25 IUCLID	2.1 g/L	2100	2100	20 °C								4A	×				p.22
26 IUCLID	2.11 g/L[of very low solubility]	2110	2110	20 °C								4A	×				p.22
27 IUCLID	29 g/L	29000	29000	20 °C								4A	×				p.22
28 IUCLID	2.2 g/L	2200	2139.67648	22 °C								4A	×				p.22



PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

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Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
30 Mackay	2100 mg/L	2100	2100	20 °C						-		2B	×			Riddick, J.A., Bunger, W.B., Sakano, T.K. (1986) Organic Solvents. 4th Edition. John Wiley and Sons, New York.	3383
32 Merck	0.294 %[Soly in water at 20°: 0.294%]	2940	2940	20 °C						-		2B	×				
37 MOE初期評 価	2860 mg/L	2860	2669.82841	25 °C						-		2B	×			Yalkowsky, S.H. and R.M. Dannenfelser (1992): Aquasol Database of Aqueous Solubility. Version 5. College of Pharmacy, Univ of Ariz - Tucson, AZ. PC Version.	p.1
38 MOE初期評 価	2860 mg/L	2860	2669.82841	25 °C						-		2B	×			Yalkowsky SH, Dannenfelser RM; Aquasol Database of Aqueous Solubility. Version 5. College of Pharmacy, Univ of Ariz - Tucson, AZ. PC Version (1992). IHSDBI	p.1
39 MOE初期評 価	2300 mg/L	2300	2236.9345	22 °C						-		2B	×			Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd Ed., Van Nostrand Reinhold Co. (1983). [財団法人化学物質評価研究機構(1997) : 化学物質安全性(ハザード)評価シート1]	p.1
40 MOE初期評 価	1.19E+03 mg/L	1190	1110.87266	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: 54.	p.1
42 NITE初期リ スク評価書	2860 mg/L	2860	2669.82841	25 °C						-		2B	×			Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.	p.2
44 PhysProp	2160 mg/L	2160	2160	20 °C						experiment al result		2B	×			YALKOWSKY,SH & HE,Y (2003)	Water Solubility
47 REACH登録 情報	2.9 g/L	2900	2900	20 °C	5.9	OECD TG 105	yes (incl. certificat e)	1: reliable without restriction	key study	experiment al result		1A	○	○		study report, 2010, 2010-09-22	Exp Key Water solubility.001
48 REACH登録 情報	2.16 g/L	2160	2016.37391	25 °C	[No data available for pH.]	no data	no data	2: reliable with restrictions	key study	experiment al result		4A	×			secondary source, 2003	Exp Key Water solubility.001
52 既存点検事 業	1.78 g/L	1780	1967.93244	25~1 °C		OECD TG 105				experiment al result		1B	×				K0053
53 既存点検事 業	0.174 ml/100ml	単位換算不 可		22 °C						-		3	×			化学大辞典（共立出版）	K0053
54 既存点検事 業	1.7 g/L	1700								-		4A	×				K0053

PACS_F等	1000
PACS_Name等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

logPow

収集データ

	情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
2	ATSDR	1.84~ 2.16[caluc ulated]	2			-	-	-	-	estimated by calculation		4C	×			Verschueren 1978. (REFERENCES リストになし)	p.118
4	CICAD	2.14	2.14	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×		The log octanol/water partition coefficient (log Kow) is 2.14	Environment Canada, Health Canada (2000) Canadian Environmental Protection Act – Priority Substances List assessment report – Carbon disulfide. Ottawa, Ontario, Health Canada; and Hull, Quebec, Environment Canada..	2. IDENTITY AND PHYSICAL/CHEMICAL PROPERTIES
6	EPI Suite	1.94	1.94			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×				
8	HSDB	1.94	1.94							-		2B	×			Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society, 1995. p. 3	Chemical/Physical Properties: > Octanol/Water Partition Coefficient:
9	IUCLID	1.94	1.94			その他				estimated by calculation		4C	×				p.21
10	IUCLID	1.94	1.94							-		4A	×				p.21
14	Mackay	1.70~4.60	3.15							-		2B	×			Hansch, C., Leo, A. (1985) Medchem Project. Pomona College, Claremont, CA.	p.3384
15	Mackay	2.14	2.14							-		2B	×			Sangster, J. (1993) LOGKOW Database, Sangster Research Lab., Montreal, Canada.	p.3384
16	Mackay	1.94	1.94							-		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.3384
20	MOE初期評 価	1.94	1.94							-		2B	×			Hansch, C., A. Leo and D. Hoekman (1995): Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society	p.1
21	MOE初期評 価	1.94	1.94							-		2B	×			Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society, 1995. 3 [HSDB]	p.1
22	MOE初期評 価	2.14	2.14							-		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: 54	p.1
25	NITE初期リ スク評価書	1.94	1.94							experimental result		2B	×			SR, Syracuse Research Corporation (2002) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.	p.2

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

logPow

収集データ

	情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
26	NITE初期リ スク評価書	1.94	1.94							estimated by calculation		4C	×			SRC, Syracuse Research Corporation (2002) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.	p.2
28	PhysProp	1.94	1.94							experimental result		2B	×			HANSCH,C ET AL. (1995)	Log P (octanol-water)
31	REACH登録 情報	2.7	2.7	25 °C	6.6	OECD TG 107 →117の間違 いではないか	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○			study report, 2010, 2010-09-22	Exp Key Partition coefficient.001
32	REACH登録 情報	1.94	1.94	[No data available for temperatu re and pH]	[No data available for temperat ure and pH]	no data	no data	2: reliable with restriction s	key study	experimental result		4A	×			secondary source, 1995, 2007-12-13	Exp Key Partition coefficient.001
35	既存点検事業	2.11	2.11			OECD TG 107				experimental result		1B	×	○		参考資料	K0053
36	既存点検事業	2.11	2.11							-		4A	×			分解度試験報告書	K0053

PACS_F等	1000
PACS_Name等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲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 <sup>3</sup> /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
2 ATSDR	0.0122 atm・m <sup>3</sup> /mol	1236.165			-	-	-	-	2B	×			EPA. 1981. Treatability manual. I. Treatability data. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency. EPA-600/2-82/001A, 646.	p.118
4 CICAD	1748 Pa・m <sup>3</sup> /mol	1748			-	-	-	-	2B	×		the Henry's law constant is 1748 Pa・m <sup>3</sup> /mol at 25 ° C	Environment Canada, Health Canada (2000) Canadian Environmental Protection Act – Priority Substances List assessment report – Carbon disulfide. Ottawa, Ontario, Health Canada; and Hull, Quebec, Environment Canada.	2. IDENTITY AND PHYSICAL/CHEMICAL PROPERTIES
6 EPI Suite	1.21E+003 Pa・m <sup>3</sup> /mol	1210					その他, Experimental Data from PhysProp Database (Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	×				
7 EPI Suite	3.06E+003 Pa・m <sup>3</sup> /mol	3060							2C	×				
9 HSDB	1.44E-2 atm・m <sup>3</sup> /mol	1459.08					-	-	2B	○			Elliot S; Atmos Environ 23: 1977-80 (1989)	Environmental Fate & Exposure: > Volatilization from Water/Soil: (and Other Chemical/Physical Properties.) p.31
10 IUCLID	0.544 Pa・m <sup>3</sup> /mol	0.544					estimated by calculation		4C	×				
14 Mackay	142 Pa・m <sup>3</sup> /mol	142					estimated by calculation	calculated-P/C	4C	×			Howard, P.H., Editor (1990) Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. Vol. II, Solvents. Lewis Publishers, Chelsea, MI.	p.3384
15 Mackay	1946 Pa・m <sup>3</sup> /mol	1946					estimated by calculation	calculated-vapor-liquid equilibrium VLE data	4C	×			Yaws, C., Yang, H.C., Pan, X. (1991) Henry's law constants for 362 organic compounds in water. Chem. Eng. 98(11), 179–185.	p.3384
16 Mackay	1577 Pa・m <sup>3</sup> /mol	1577					experimental result	selected from literature experimentally measured data	2B	×			Staudinger, J., Roberts, P.V. (2001) A critical compilation of Henry's law constant temperature dependence relations for organic compounds in dilute aqueous solutions. Chemosphere 44, 561–576.	p.3384
18 NITE初期リスク評価書	1.46E+03 Pa・m <sup>3</sup> /mol[1.46×10 <sup>3</sup> Pa・m <sup>3</sup> /mol (1.44×10 <sup>-2</sup> atm・m <sup>3</sup> /mol)]	1460					experimental result		2B	○	○		SRC, Syracuse Research Corporation (2002) HenryWin Estimation Software, ver. 3.10, North Syracuse, NY.	p.2
20 PhysProp	0.0144 atm・m <sup>3</sup> /mol	1459.08					experimental result		2B	○			ELLIOT, S (1989)	Henry's Law Constant
22 REACH登録情報	1748 Pa・m <sup>3</sup> /mol[情報源ではatm・m <sup>3</sup> /molと記載されていたが、情報源の間違いと考えられるためPa・m <sup>3</sup> /molに修正]	1748			4: not assignable	supporting study	experimental result		4A	×			review article or handbook, 2002	Exp Supporting Henry's Law constant.001

PACS F 等	1000
PACS Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
2 ATSDR	logKoc	1.8	63.09573445				-	-	-	-	-		2B	×			HSDB. 1995. Hazardous Substances Data Bank. Bethesda, MD: National Institutes of Health, National Library of Medicine..	p.118
4 CICAD	logKoc	1.79	61.65950019			-	-	-	-	-	-		2B	×			-	5.3 Sediment and soil
5 EPI Suite	Koc	220.3 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定 (2C) ]	220.3				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×				
7 HSDB	Koc	270	270								estimated by calculation	determined from a log Kow of 1.94 and a regression- derived equation	4C	×			SRC	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility:
9 Mackay	logKoc	1.8	63.09573445				-				estimated by calculation	calculated- solubility	4C	×			Howard, P.H., Editor (1990) Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. Vol. II, Solvents. Lewis Publishers, Chelsea, MI.	p.3384
11 MOE初期評価	Koc	1	1				KOCWIN				estimated by calculation		4C	×			U.S. Environmental Protection Agency, PCKOCWINTM	p.2
13 NITE初期リス ク評価書	Koc	270	270								estimated by calculation		4C	×			U.S. NLM, National Library of Medicine (2002) HSDB, Hazardous Substances Data Bank, Bethesda, MD (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi- bin/sis/htmlgen?HSDB から引 用).	p.2
15 REACH登録情 報	Koc	34	34			N.A.	OECD TG 121	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	○		study report, 2010, 2010-09-22	Exp Key Adsorption / desorption.001

PACS_F等	1000
PACS_Name等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

蓄積性 (2)

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR		1			BCF		6.8	6.8					estimated by calculation	calculated from solubility	4C	×			EPA 1986b	p.134
2 ATSDR		1			BCF		25.8	25.8					estimated by calculation	calculated from Kow	4C	×			EPA 1986b	p.134
3 EPI Suite		1			BCF		28.08 L/kg (wet)[2B以上の値を用いて推定(2C)]	28.08	BCFBFWIN				(Q)SAR		2C	×				
4 HSDB		1			BCF	-	<6.1	6.1					experimental result		2B	×			Chemicals Inspection and Testing Institute; Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology-Toxicology and Information Center. ISBN #4-89074-101-1 p. 1-1 (1992)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Bioconcentration:
5 HSDB		1			BCF	-	<60	60					experimental result		2B	×	○		Chemicals Inspection and Testing Institute; Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology-Toxicology and Information Center. ISBN #4-89074-101-1 p. 1-1 (1992)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Bioconcentration:
6 Mackay		1			その他		0.9	0.9					estimated by calculation	calculated-solubility	4C	×			Howard, P.H., Editor (1990) Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. Vol. II, Solvents. Lewis Publishers, Chelsea, MI.	
7 MOE初期評価		2	5 µg/L	6週	BCF		<60	60					experimental result		2B	×	○		通産省化学品安全課監修, 化学品検査協会編, 化審法の既存化学物質安全性点検データ集, 日本化学物質安全・情報センター(1992).	p.1
8 MOE初期評価		2	5 µg/L	6週	BCF		<60	60					experimental result		2B	×	○		独立行政法人製品評価技術基盤機構: 既存化学物質安全性点検データ (http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html, 2005.6.01 現在)	p.2
9 MOE初期評価		1	50 µg/L	6週	BCF		<6.1	6.1					experimental result		2B	×			通産省化学品安全課監修, 化学品検査協会編, 化審法の既存化学物質安全性点検データ集, 日本化学物質安全・情報センター(1992).	p.1
10 MOE初期評価		1	50 µg/L	6週	BCF		<6.1	6.1					experimental result		2B	×			独立行政法人製品評価技術基盤機構: 既存化学物質安全性点検データ (http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_start.html, 2005.6.01 現在)	p.2
12 NITE初期リスク評価書	低濃縮性	1	0.005 mg/L		その他		<60	60	化審法TG				experimental result		1B	×	○		経済産業省, 1988.	p.6
14 NITE初期リスク評価書	低濃縮性	1	0.05 mg/L		その他		<6.1	6.1	化審法TG				experimental result		1B	×			経済産業省, 1988.	p.6
15 REACH登録情報		1			BCF	定常状態	<4~8 (g/g organism)/(g/L)]> 4 < 8 other: (g/g organism)/(g/L)]	単位換算不可	no data	no data	2: reliable with restrictions	weight of evidence	experimental result		3	×			review article or handbook, 1993	Exp WoE Bioaccumulation: aquatic / sediment.002

PACS_F等	1000
PACS_Name等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

蓄積性 (2)

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価I)	キースタ ディー該非 (評価I)	キースタ ディー該非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
16 REACH登録情報		1	5 µg/L		BCF		<60 (mg/kg fish)/(mg/L water)	単位換算不可	化審法TG	no data	4: not assignable	supporting study	experimental result		3	×			Japan Chemical Industry Ecology-Toxicology and Information Centre, 1992, Biodegradation and Bioaccumulation data of existing chemicals, CSCL Japan, ISBN 4-89074-101-1	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
17 REACH登録情報		1	50 µg/L		BCF		<6.1 (mg/kg fish)/(mg/L water)	単位換算不可	化審法TG	no data	4: not assignable	supporting study	experimental result		3	×			Japan Chemical Industry Ecology-Toxicology and Information Centre, 1992, Biodegradation and Bioaccumulation data of existing chemicals, CSCL Japan, ISBN 4-89074-101-1	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
20 既存点検事業		2	5 µg/L	2週	BCF	上限	<=60	60	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	○			K0053
21 既存点検事業		2	5 µg/L	2週	BCF	上限	<=60	60	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	○	○			K0053
24 既存点検事業		2	5 µg/L	3週	BCF	上限	<=60	60	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	○			K0053
25 既存点検事業		2	5 µg/L	3週	BCF	上限	<=60	60	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	○			K0053
28 既存点検事業		2	5 µg/L	4週	BCF	上限	<=60	60	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	○			K0053
29 既存点検事業		2	5 µg/L	4週	BCF	上限	<=60	60	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	○			K0053
32 既存点検事業		2	5 µg/L	6週	BCF	上限	<=60	60	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	○			K0053
33 既存点検事業		2	5 µg/L	6週	BCF	上限	<=60	60	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×	○			K0053
36 既存点検事業		1	50 µg/L	2週	BCF	上限	<=6.1	6.1	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×				K0053
37 既存点検事業		1	50 µg/L	2週	BCF	上限	<=6.1	6.1	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×				K0053
40 既存点検事業		1	50 µg/L	3週	BCF	上限	<=6.1	6.1	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×				K0053
41 既存点検事業		1	50 µg/L	3週	BCF	上限	<=6.1	6.1	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×				K0053
44 既存点検事業		1	50 µg/L	4週	BCF	上限	<=6.1	6.1	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×				K0053
45 既存点検事業		1	50 µg/L	4週	BCF	上限	<=6.1	6.1	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×				K0053
48 既存点検事業		1	50 µg/L	6週	BCF	上限	<=6.1	6.1	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×				K0053
49 既存点検事業		1	50 µg/L	6週	BCF	上限	<=6.1	6.1	化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1A	×				K0053

PACS_F等	1000
PACS_Name等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

解離定数 (2)

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ-該非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
1 MOE初期評価	その他	[解離基なし]	算出不可			-	-	-	-	-		-		既存化学物質安全性(ハザード)評価シート	p.1
	その他	[解離基なし]	算出不可			-	-	-	-	-		-		既存化学物質安全性(ハザード)評価シート	p.1
3 NITE初期リスク評価書	その他	[解離基なし]	算出不可			-	-	-	-	-		-			p.2
	その他	[解離基なし]	算出不可			-	-	-	-	-		-			p.2



PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 ATSDR	大気	OHラジカルとの反応		4.3E-13 cm <sup>3</sup> molecule- 3[The lifetime of carbon disulfide in the troposphere , assuming a reaction rate constant of 4.3x10 <sup>-13</sup> cm <sup>3</sup> molecule <sup>-3</sup> , is =73 days (uncertain)]																Cox RA, Sheppard D. 1980. Reactions of OH radicals with gaseous sulfur compounds. Nature 284:330-331. EPA. 1978a. Carbon disulfide, carbonyl sulfide: Literature review and environmental assessment. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency. EPA-600/9-78/009. Wine PH, Chameides WL, Ravishankara AR. 1981. Potential role of carbon disulfide photooxidation in tropospheric sulfur chemistry. Geophys Res Lett 8:543-546.	p.135
2 ATSDR	大気	その他,atmospheric oxidation				12 日[For the atmospheric oxidation of carbon disulfide to sulfur dioxide, carbonyl sulfide, and carbon monoxide, the half-life was estimated to be about 12 days.]														EPA. 1978a. Carbon disulfide, carbonyl sulfide: Literature review and environmental assessment. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency. EPA-600/9-78/009.	p.135
3 ATSDR	水域	加水分解				1 時間			25 °C	13										EPA. 1978a. Carbon disulfide, carbonyl sulfide: Literature review and environmental assessment. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency. EPA-600/9-78/009.	p.136
4 ATSDR	水域	加水分解				1.1 年			25 °C	9						外挿(補外)				EPA. 1978a. Carbon disulfide, carbonyl sulfide: Literature review and environmental assessment. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency. EPA-600/9-78/009.	p.136
5 CICAD	大気	OHラジカルとの反応		1.1E-12~ 2.9E-12 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec	5E5 molecule/c m <sup>3</sup>	5.5~15 日		8.02253681												BUA (1993) Carbon disulfide. German Chemical Society, GDCh Advisory Committee on Existing Chemicals of Environmental Relevance (Beratergremium für Umweltrelevante Alstoffe). Stuttgart, S. Hirzel Verlag (Report No. 83).	5. ENVIRONMENTAL TRANSPORT, DISTRIBUTION, AND TRANSFORMATION
6 CICAD	大気	その他,photo-oxidation				7~14 日														Wine PH, Chameides WL, Ravishankara AR (1981) Potential role of CS photooxidation in tropospheric sulfur chemistry. Geophysical Research Letters, 8(5):543-546.	5. ENVIRONMENTAL TRANSPORT, DISTRIBUTION, AND TRANSFORMATION

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
7	CICAD	大気				7.7 日[12 h of sunlight]														Peyton TO, Steele RV, Mabey WR (1976) Carbon disulfide, carbonyl sulfide: literature review and environmental assessment. Washington, DC, US Environmental Protection Agency (EPA-600/9-78-009).	5. ENVIRONMENTAL TRANSPORT, DISTRIBUTION, AND TRANSFORMATION
8	CICAD	大気				1 週					その他, ChemCAN4 steady-state fugacity modelling					estimated by calculation				DMER, AEL (1996) Pathways analysis using fugacity modeling of carbon disulfide for the second Priority Substances List. Peterborough, Ontario, Don Mackay Environmental Research; and Don Mills, Ontario, Angus Environmental Limited.	5. ENVIRONMENTAL TRANSPORT, DISTRIBUTION, AND TRANSFORMATION
9	CICAD	水域	加水分解			1.1 年				9						外挿(補外)		○		Peyton TO, Steele RV, Mabey WR (1976) Carbon disulfide, carbonyl sulfide: literature review and environmental assessment. Washington, DC, US Environmental Protection Agency (EPA-600/9-78-009).	5. ENVIRONMENTAL TRANSPORT, DISTRIBUTION, AND TRANSFORMATION
10	CICAD	水域	生分解			5500 時間 [The mean degradation half-life assumed for fugacity modelling by DMER & AEL (1996) (section 5.5) of 5500 h (7.4 months) was based on the estimate of biodegradation half-life by Abrams et al. (1975).]												○		DMER, AEL (1996) Pathways analysis using fugacity modeling of carbon disulfide for the second Priority Substances List. Peterborough, Ontario, Don Mackay Environmental Research; and Don Mills, Ontario, Angus Environmental Limited.	5. ENVIRONMENTAL TRANSPORT, DISTRIBUTION, AND TRANSFORMATION
11	CICAD	土壌	生分解			5500 時間 [The mean degradation half-life assumed for fugacity modelling by DMER & AEL (1996) (section 5.5) of 5500 h (7.4 months) was based on the estimate of biodegradation half-life by Abrams et al. (1975).]												○		DMER, AEL (1996) Pathways analysis using fugacity modeling of carbon disulfide for the second Priority Substances List. Peterborough, Ontario, Don Mackay Environmental Research; and Don Mills, Ontario, Angus Environmental Limited.	5. ENVIRONMENTAL TRANSPORT, DISTRIBUTION, AND TRANSFORMATION

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
12 EPI Suite	大気	OHラジカルとの反応		0.00000E-12 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec					25 °C		AOPWIN					(Q)SAR					
13 EPI Suite	水域	生分解									BIOWIN	Weeks				(Q)SAR	Biowin3 Ultimate Biodegradation				
14 Howard FATE	大気	総括分解				8.9 日					記載なし					-		○		Khalil MAK, Rasmusseen RA; Atmos Environ 18: 1805-31 (1984)	II p.79
15 Howard FATE	大気	その他、オゾンとの反応			2.5E+5 molecule/c m <sup>3</sup>	9 日					記載なし					-				Baulch DL et al; J Phys Chem Ref Data 13: 1259-1380 (1984) Hampson RF; Chemical, kinetic and photochemical data sheets for atmospheric reactions FAA-EE-80-17 (1980)	II p.79
16 Howard FATE	大気	OHラジカルとの反応			5E+5 molecule/c m <sup>3</sup>	9 日					記載なし					-				Baulch DL et al; J Phys Chem Ref Data 13: 1259-1380 (1984) Hampson RF; Chemical, kinetic and photochemical data sheets for atmospheric reactions FAA-EE-80-17 (1980)	II p.79
17 Howard FATE	水域	加水分解				1.1 年				9	記載なし					外挿(補外)		○		Peyton TO et al; Carbon Disulfide, Carbonyl Sulfide Literature Review And Environmental Assessment USEPA-600/9-78-O09 p. 163 (1976)	II p.79
18 Howard FATE	水域	生分解														-				Abrams EF et al; Identification of Organic Compounds in Effluents from Industrial Sources USEPA-560-3-75-002 (1975)	II p.78
19 HSDB	大気	OHラジカルとの反応		2.9E-12 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec	5E+5 molecule/c m <sup>3</sup>	5.5 日		5.53278401	24 °C							-		○		Arnts RR et al; J Air Pollut Control Assoc 39: 453-60 (1989) (反応速度定数) SRC (半減期)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Fate: (and Other Chemical/Physical Properties.)
20 HSDB	水域	その他、OHラジカルとの反応		8.0E+9 L/mol/sec	1E-17 mol/L	100 日				7.6						-				Buxton GV et al; J Phys Chem Ref Data 17: 513-882 (1988) (反応速度定数) SRC (半減期) Mill T et al; Science 207: 886-7 (1980) (ラジカル濃度)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:
21 HSDB	大気	総括分解				8.9 日[The tropospheric half-life determined from estimates of sources and global burdens of the chemical is 8.9 days]										-		○		Khalil MAK, Rasmussen RA; Atmos Environ 18: 1805-31 (1984)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:
22 HSDB	大気	総括分解				[a photochemical lifetime of a month or less in the troposphere]										-				Carroll MA; J Geophys Res 90: 10483-6 (1985)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
23 HSDB	水域	生分解 (好氣的)					2%[present at 100 mg/L, reached 2% of its theoretical BOD in 4 weeks using an activated sludge inoculum at 30 mg/L and the Japanese MITI test]				化審法TG					experimetal result				Chemicals Inspection and Testing Institute; Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology-Toxicology and Information Center. ISBN #4-89074-101-1 p. 1-1 (1992)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Biodegradation:
24 HSDB	水域	加水分解				1.1 年				9						外挿 (補外)		○		Peyton TO et al; Carbon Disulfide, Carbonyl Sulfide Literature Review And Environmental Assessment USEPA-600/9-78-009 p. 163 (1976)	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation:
25 Mackay	水域	加水分解				1.1 年				9						-		○		Howard, P.H., Editor (1990) Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. Vol. II, Solvents. Lewis Publishers, Chelsea, MI.	p.3384
26 Mackay	大気	総括分解				9 日[Air: t½ = 9 d degraded by reacting with atomic oxygen and photochemically produced OH radicals]										-				Howard, P.H., Editor (1990) Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. Vol. II, Solvents. Lewis Publishers, Chelsea, MI.	p.3384
27 MOE初期評価	大気	OHラジカルとの反応		1.1E-12~2.9E-12 cm^3/molec ule/sec	5.0E+05 molecule/c m^3	5.5~15 日		8.02253681								-				BUA Report 83 (1993). [財団法人化学物質評価研究機構(1997): 化学物質安全性(ハザード)評価シート] (反応速度定数) 既存化学物質安全性(ハザード)評価シート (半減期)	p.1
28 MOE初期評価	水域	生分解 (好氣的)					0%[BOD から算出した分解度]									experimetal result				通産省化学品安全課監修, 化学品検査協会編, 化審法の既存化学物質安全性点検データ集, 日本化学物質安全・情報センター(1992).	p.1
29 MOE初期評価	土壌	生分解 (嫌氣的)														-				ATSDR, Draft Toxicological Profile for Carbon disulfide (1994). [財団法人化学物質評価研究機構(1997): 化学物質安全性(ハザード)評価シート]	p.1
30 MOE初期評価	水域	加水分解														-				既存化学物質安全性(ハザード)評価シート	p.1
31 MOE初期評価	水域	加水分解														-				Peyton TO et al; Carbon Disulfide, Carbonyl Sulfide Literature Review And Environmental Assessment USEPA-600/9-78-009 p. 163 (1976). [HSDB]	p.1
32 MOE初期評価	水域	加水分解				1.1 年				9						-		○		Peyton TO et al; Carbon Disulfide, Carbonyl Sulfide Literature Review And Environmental Assessment USEPA-600/9-78-009 p. 163 (1976). [HSDB]	p.1
33 MOE初期評価	水域	加水分解														-				Lovelock JE; Nature 248: 625-6 (1974). [HSDB]	p.1

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
34 MOE初期評価	大気	OHラジカルとの反応		8E-12 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec[8x 10 <sup>-12</sup> cm <sup>3</sup> /(分子・ sec)(- 23-27°C、 推奨値)]	3E+05~ 3E+06 molec/c m <sup>3</sup>	8.0~80 時 間		0.60776794	-23~27 °C											Atkinson, R. et al. (1992): Evaluated Kinetic and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry. Supplement IV, IUPAC Subcommittee on Gas Kinetic Data Evaluation for Atmospheric Chemistry, Journal of Physical and Chemical Reference Data, 21(6): 1125-1568 (反応速度定数) Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., and Michalenko, E.M. ed. (1991): Handbook of Environmental Degradation Rates, Boca Raton, London, New York, Washington D.C., Lewis Publishers: xiv. (OH ラジカル濃度)	p.1
35 MOE初期評価	水域	加水分解				1.1 年				9								○		Peyton, T., Steele, R., and Mabey, W. (1978): Carbon Disulfide, Carbonyl Sulfide Literature Review And Environmental Assessment USEPA-600/9-78-009: 163. [Hazardous Substances Data Bank ( <a href="http://toxnet.nlm.nih.gov/">http://toxnet.nlm.nih.gov/</a> , 2005.5.12 現在)]	p.1
36 MOE初期評価	水域	生分解 (好氣的)														experimen tal result				独立行政法人製品評価技術基盤機構 : 既存化学物質安全性点検データ ( <a href="http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_s tart.html">http://www.safe.nite.go.jp/japan/Haz_s tart.html</a> , 2005.6.01 現在)	p.1
37 NIST	大気	硝酸ラジカルとの反応		<=4.00E-16 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec				2.87E-02	298 K										○	Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry: Volume I - gas phase reactions of Ox, HOx, NOx and SOx species, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Crowley, J.N.; Hampson, R.F.; Hynes, R.G.; Jenkin, M.E.; Rossi, M.J.; Troe, J. Atmos. Chem. Phys. 4, 1461 (2004).	CS2 + NO3 → Products
38 NIST	大気	OHラジカルとの反応		<=2.01E-15 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec				7982.62369	298 K											Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry: supplement VI. IUPAC subcommittee on gas kinetic data evaluation for atmospheric chemistry, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Hampson, R.F., Jr.; Kerr, J.A.; Rossi, M.J.; Troe, J. J. Phys. Chem. Ref. Data 26, 1329 (1997).	CS2 + ·OH → COS + SH
39 NIST	大気	OHラジカルとの反応		<=2.01E-15 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec				7982.62369	298 K											Evaluated Kinetic and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry. Supplement IV, IUPAC Subcommittee on Gas Kinetic Data Evaluation for Atmospheric Chemistry, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Hampson Jr., R.F.; Kerr, J.A.; Troe, J. J. Phys. Chem. Ref. Data 21, 1125 (1992).	CS2 + ·OH → COS + SH
40 NIST	大気	硝酸ラジカルとの反応		<=4.00E-16 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec				2.87E-02	298 K										○	Summary of Evaluated Kinetic and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Crowley, J.N.; Hampson, R.F., Jr.; Kerr, J.A.; Rossi, M.J.; Troe, J. Not in System 0, 1 (2001).	CS2 + NO3 → Products

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
41 NIST	大気	OHラジカルとの反応		<=3.01E-15 cm^3/molec ule/sec[Pre ssure: 6.67E-3 bar Bath gas: Hel				5330.58924	340 K		その他,Absolute value measured directly					experimen tal result				Oxidation of CS2 by reaction with OH. 2. Yields of HO2 and SO2 in oxygen, Lovejoy, E.R.; Murrells, T.P.; Ravishankara, A.R.; Howard, C.J. J. Phys. Chem. 94, 2386 (1990).	CS2 + ·OH → COS + SH
42 NIST	大気	OHラジカルとの反応		[Rate expression: 9.61x10^- 16 [cm3/molec ule s] e^(4914 [J/mole]/RT )] Pressure: 2.93E-3 - 7.73E-3 bar Bath gas: Hel					298~520 K		その他,Absolute value measured directly					experimen tal result				Rate Constant for the Reaction between OH and CS2 at 298 and 520 K, Leu, M-T.; Smith, R.H. J. Phys. Chem. 86, 958 (1982).	CS2 + ·OH → COS + SH
43 NIST	大気	OHラジカルとの反応		<=3.01E-15 cm^3/molec ule/sec[Pre ssure: 8.00E-2 - 0.11 bar Bath gas: CS2]				5330.58924	298 K		その他,Absolute value measured directly					experimen tal result				A Significant Upper Limit for the Rate of Formation of OCS from the Reaction of OH with CS2, Iyer, R.S.; Rowland, F.S. Geophys. Res. Lett. 7, 797 (1980).	CS2 + ·OH → COS + SH
44 NIST	大気	OHラジカルとの反応		4.30E-13± 1.59E-13 cm^3/molec ule/sec[Ref erence reaction: C2H4 + · OH → Products Pr essure: 1.01 bar Bath gas: N2]				37.3141247	297 K		その他,Derived from fitting to a complex mechanism					experimen tal result				Reactions of OH Radicals with Gaseous Sulphur Compounds, Cox, R.A.; Sheppard, D. Nature (London) 284, 330 (1980).	CS2 + ·OH → COS + SH
45 NIST	大気	OHラジカルとの反応		[Relative rate value: 6.0x10^-2± 2.0x10^-2 , Reference reaction: C2H4 + · OH → Products Pr essure: 1.01 bar Bath gas: N2]					297 K		その他,Relative rate value measured					experimen tal result				Reactions of OH Radicals with Gaseous Sulphur Compounds, Cox, R.A.; Sheppard, D. Nature (London) 284, 330 (1980).	CS2 + ·OH → COS + SH
46 NIST	大気	OHラジカルとの反応		1.20E-12 cm^3/molec ule/sec[Unc ertainty: 1.5]				13.3708947	298 K							-				Chemical Kinetic and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling: Evaluation No. 11 of the NASA Panel for Data Evaluation, DeMore, W.B.; Sander, S.P.; Golden, D.M.; Hampson, R.F.; Kurylo, M.J.; Howard, C.J.; Ravishankara, A.R.; Kolb, C.J.; Molina, M.J., JPL Publication 94-26, 1 (1994)	CS2 + ·OH → Products

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
47 NIST	大気	OHラジカルとの反応		[Rate expression: 8.8x10 <sup>-16</sup> [cm <sup>3</sup> /mole s] e <sup>-(19123 ± 4207 J/mole)/RT</sup>  Uncertainty : 2.0 Bath gas: N <sub>2</sub>  Pressure: 1.01 bar]					260~300 K											Evaluated Kinetic and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry: Supplement III, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Hampson Jr., R.F.; Kerr, J.A.; Troe, J. J. Phys. Chem. Ref. Data 18, 881 (1989).	CS2 + ·OH → Products
48 NIST	大気	硝酸ラジカルとの反応		<=8.00E-16 cm <sup>3</sup> /mole/sec Reference reaction: CH <sub>3</sub> CH=C H <sub>2</sub> + NO <sub>3</sub> → Products  Pressure: 1.01 bar Bath gas: N <sub>2</sub>				1.43E-02	297 K		その他,Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result				Kinetics and mechanisms of the gas phase reactions of the NO <sub>3</sub> radical with a series of reduced sulfur compounds, MacLeod, H.; Aschmann, S.M.; Atkinson, R.; Tuazon, E.C.; Sweetman, J.A.; Winer, A.M.; Pitts, J.N., Jr. J. Geophys. Res. 91, 5338 (1986).	CS2 + NO <sub>3</sub> → Products
49 NIST	大気	OHラジカルとの反応		<=2.01E-15 cm <sup>3</sup> /mole/sec Bath gas: He Pressure: 6.40E-2 - 6.80E-2 bar]				7982.62369	249~299 K		その他,Absolute value measured directly					experimental result				Oxidation of CS <sub>2</sub> by reaction with OH. 1. Equilibrium constant for the reaction OH + CS <sub>2</sub> = CS <sub>2</sub> OH and the kinetics of the CS <sub>2</sub> OH + O <sub>2</sub> reaction, Murrells, T.P.; Lovejoy, E.R.; Ravishankara, A.R. J. Phys. Chem. 94, 2381 (1990).	CS2 + ·OH → Products
50 NIST	大気	OHラジカルとの反応		2.79E-12 cm <sup>3</sup> /mole/sec Pressure: 1.00 bar Bath gas: O <sub>2</sub>				5.75092245	295 K		その他,Absolute value measured directly					experimental result				A new mechanism for the reaction CS <sub>2</sub> +OH, Becker, K.H.; Nelson, W.; Su, Y.; Wirtz, K. Chem. Phys. Lett. 168, 559 (1990).	CS2 + ·OH → Products
51 NIST	大気	OHラジカルとの反応		2.91E-12± 6.14E-13 cm <sup>3</sup> /mole/sec Reference reaction: C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> + ·OH → ·C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> + H <sub>2</sub> O Pressure: 1.01 bar Bath gas: N <sub>2</sub>				5.513771	297 K		その他,Derived from fitting to a complex mechanism					experimental result				Determination of room temperature OH rate constants for acetylene, ethylene dichloride, ethylene dibromide, p-dichlorobenzene and carbon disulfide, Arnsts, R.R.; Seila, R.L.; Bufalini, J.J. J. Air Pollut. Control Assoc. 39, 453 (1989).	CS2 + ·OH → Products
52 NIST	大気	硝酸ラジカルとの反応		<=4.00E-16 cm <sup>3</sup> /mole/sec				2.87E-02	298 K											Chemical kinetics and photochemical data for use in stratospheric modeling. Evaluation number 12, DeMore, W.B.; Sander, S.P.; Golden, D.M.; Hampson, R.F.; Kurylo, M.J.; Howard, C.J.; Ravishankara, A.R.; Kolb, C.E.; Molina, M.J. JPL Publication 97-4 0. 1 (1997).	CS2 + NO <sub>3</sub> → Products

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
53 NIST	大気	OHラジカルとの反応		1.91E-12± 4.98E-13 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec[Pre ssure: 0.20 bar[Bath gas: Ar]				8.40056211	298 K		その他,Derived from fitting to a complex mechanism					experimen tal result				Reaction of OH radicals with CS <sub>2</sub> , Bulatov, V.P.; Cheskis, S.G.; Iogansen, A.A.; Kulakov, P.Y.; Sarkisov, O.M. Chem. Phys. Lett. 153, 258 (1988).	CS <sub>2</sub> + ·OH → Products
54 NIST	大気	OHラジカルとの反応		2.01E-12± 9.96E-13 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec[Pre ssure: 1.01 bar[Bath gas: N <sub>2</sub> ]				7.98262369	300 K		その他,Absolute value measured directly					experimen tal result				Atmospheric chemistry of carbon disulphide, Jones, B.M.R.; Cox, R.A.; Penkett, S.A. J. Atmos. Chem. 1, 65 (1983).	CS <sub>2</sub> + ·OH → Products
55 NIST	大気	OHラジカルとの反応		2.71E-12± 5.98E-13 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec[Ref erence reaction: n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> + ·OH → Other Products + H <sub>2</sub> O[Pressu re: 1.01 bar[Bath gas: N <sub>2</sub> ]				5.92069137	293 K		その他,Derived from fitting to a complex mechanism					experimen tal result				Rate constants and products of the reaction CS <sub>2</sub> + OH in the presence of O <sub>2</sub> , Barnes, I.; Becker, K.H.; Fink, E.H.; Reimer, A.; Zabel, F. Int. J. Chem. Kinet. 15, 631 (1983).	CS <sub>2</sub> + ·OH → Products
56 NIST	大気	OHラジカルとの反応		1.69E-12± 8.47E-13 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec[Pre ssure: 1.01 bar[Bath gas: N <sub>2</sub> ]				9.4941264	295 K		その他,Absolute value measured directly					experimen tal result				OCS Formation in the Reaction of OH with CS <sub>2</sub> , Jones, B.M.R.; Burrows, J.P.; Cox, R.A.; Penkett, S.A. Chem. Phys. Lett. 88, 372 (1982).	CS <sub>2</sub> + ·OH → Products
57 NIST	大気	OHラジカルとの反応		<=5.00E-14 ±8.47E-13 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec[Pre ssure: 2.67E-3 bar[Bath gas: He]				320.901472	298 K		その他,Absolute value measured directly					experimen tal result				Photoionization Mass Spectrometer Studies of the Collisionally Stabilized Product Distribution in the Reaction of OH Radicals with Selected Alkenes at 298 K, Biermann, H.W.; Harris, G.W.; Pitts, J.N., Jr. J. Phys. Chem. 86, 2958 (1982).	CS <sub>2</sub> + ·OH → Products
58 NIST	大気	OHラジカルとの反応		[Rate expression: 1.93x10 <sup>-17</sup> [cm <sup>3</sup> /molec ule s] e <sup>-(12305 [J/mole]/RT )]Rate constant is an upper limit.] Pressure: 4.67E-2 - 0.13 bar [Bath gas: Ar]</sup>					251~363 K		その他,Absolute value measured directly					experimen tal result				Rate of Reaction of OH with CS <sub>2</sub> , Wine, P.H.; Shah, R.C.; Ravishankara, A.R. J. Phys. Chem. 84, 2499 (1980).	CS <sub>2</sub> + ·OH → Products



PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
59 NIST	大気	OHラジカルとの反応		8.00E-12 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec[Unc ertainty: 3.1600001]				2.0056342	298 K											Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry: Volume I - gas phase reactions of Ox, HOx, NOx and SOx species, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Crowley, J.N.; Hampson, R.F.; Hynes, R.G.; Jenkin, M.E.; Rossi, M.J.; Troe, J. Atmos. Chem. Phys. 4, 1461 (2004).	CS2 + ·OH → CS2OH
60 NIST	大気	OHラジカルとの反応		1.84E-13± 3.32E-14 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec[Pre ssure: 1.33E-2 bar Bath gas: Ar]				87.2014871	296 K		その他,Absolute value measured directly					experimen tal result				Flash Photolysis Resonance Fluorescence Investigation of the Reactions of OH Radicals with OCS and CS2, Kurylo, M.J. Chem. Phys. Lett. 58, 238 (1978).	CS2 + ·OH → Products
61 NIST	大気	OHラジカルとの反応		<=7.01E-14 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec[Pre ssure: 6.67E-2 bar Uncerta inty: 1.58  Bath gas: Ar]				228.888354	300~425 K		その他,Absolute value measured directly					experimen tal result				Rate Constants for the Reaction of OH Radicals with COS, CS2 and CH3SCH3 over the Temperature Range 299-430 K, Atkinson, R.; Perry, R.A.; Pitts, J.N., Jr. Chem. Phys. Lett. 54, 14 (1978).	CS2 + ·OH → Products
62 NIST	大気	OHラジカルとの反応		[Relative rate value: 10.70 Refer ence reaction: C2H6 + · OH → · C2H5 + H2O Pressu re: 1.01 bar Bath gas: N2]					297 K		その他,Relative rate value measured					experimen tal result				Determination of room temperature OH rate constants for acetylene, ethylene dichloride, ethylene dibromide, p-dichlorobenzene and carbon disulfide, Arnts, R.R.; Seila, R.L.; Bufalini, J.J. J. Air Pollut. Control Assoc. 39, 453 (1989).	CS2 + ·OH → Products
63 NIST	大気	OHラジカルとの反応		[Rate expression: 6.91x10 <sup>-14</sup> [cm <sup>3</sup> /molec ule s] e <sup>-(9562 [J/mole]/RT ) Pressure: 0.91 bar Bath gas: N2]</sup>					297 K		その他,Derived from fitting to a complex mechanism					experimen tal result				Kinetics and mechanism of the reaction of OH with CS2 under atmospheric conditions, Hynes, A.J.; Wine, P.H.; Nicovich, J.M. J. Phys. Chem. 92, 3846 (1988).	CS2 + ·OH → Adduct
64 NIST	大気	硝酸ラジカルとの反応		<=1.00E-15 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec				1.15E-02	298 K											Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry: supplement VI. IUPAC subcommittee on gas kinetic data evaluation for atmospheric chemistry, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Hampson, R.F., Jr.; Kerr, J.A.; Rossi, M.J.; Troe, J. J. Phys. Chem. Ref. Data 26, 1329 (1997).	CS2 + NO3 → Products

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
65 NIST	大気	硝酸ラジカルとの反応		<=4.00E-16 cm^3/molec ule/sec				2.87E-02	298 K											Chemical Kinetic and Photochemical Data for Use in Stratospheric Modeling: Evaluation No. 11 of the NASA Panel for Data Evaluation, DeMore, W.B.; Sander, S.P.; Golden, D.M.; Hampson, R.F.; Kurylo, M.J.; Howard, C.J.; Ravishankara, A.R.; Kolb, C.J.; Molina, M.J., JPL Publication 94-26, 1 (1994)	CS2 + NO3 → Products
66 NIST	大気	硝酸ラジカルとの反応		<=1.00E-15 cm^3/molec ule/sec				1.15E-02	298 K											Evaluated Kinetic and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry. Supplement IV, IUPAC Subcommittee on Gas Kinetic Data Evaluation for Atmospheric Chemistry, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Hampson Jr., R.F.; Kerr, J.A.; Troe, J. J. Phys. Chem. Ref. Data 21, 1125 (1992).	CS2 + NO3 → Products
67 NIST	大気	硝酸ラジカルとの反応		<=1.00E-15 cm^3/molec ule/sec				1.15E-02	298 K											Evaluated Kinetic and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry: Supplement III, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Hampson Jr., R.F.; Kerr, J.A.; Troe, J. J. Phys. Chem. Ref. Data 18, 881 (1989).	CS2 + NO3 → Products
68 NIST	大気	硝酸ラジカルとの反応		1.89E-15 cm^3/molec ule/sec				6.06E-03	298 K							estimated by calculation				Predicting the night-time NO3 radical reactivity in the troposphere, Sabljic, A.; Gusten, H. Atmos. Environ. 24, 73 (1990).	CS2 + NO3 → Products
69 NIST	大気	硝酸ラジカルとの反応		4.00E-16 cm^3/molec ule/sec				2.87E-02	298 K							estimated by calculation				Absorption spectrum of NO3 and kinetics of the reactions of NO3 with NO2, Cl, and several stable atmospheric species at 298 K, Burrows, J.P.; Tyndall, G.S.; Moortgat, G.K. J. Phys. Chem. 89, 4848 (1985).	CS2 + NO3 → Products
70 NIST	大気	OHラジカルとの反応		8.00E-12 cm^3/molec ule/sec[Unc ertainty: 3.1600001]				2.0056342	200~300 K											Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry: Volume I - gas phase reactions of Ox, HOx, NOx and SOx species, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Crowley, J.N.; Hampson, R.F.; Hynes, R.G.; Jenkin, M.E.; Rossi, M.J.; Troe, J. Atmos. Chem. Phys. 4, 1461 (2004).	CS2 + OH → CS2OH
71 NIST	大気	OHラジカルとの反応		8.00E-12 cm^3/molec ule/sec[Unc ertainty: 3.1600001]				2.0056342	250~300 K											Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry: supplement VI. IUPAC subcommittee on gas kinetic data evaluation for atmospheric chemistry, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Hampson, R.F., Jr.; Kerr, J.A.; Rossi, M.J.; Troe, J. J. Phys. Chem. Ref. Data 26, 1329 (1997).	CS2 + OH → CS2OH
72 NIST	大気	OHラジカルとの反応		8.00E-12 cm^3/molec ule/sec[Unc ertainty: 3.1600001] Bath gas: N2]				2.0056342	250~300 K											Evaluated Kinetic and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry. Supplement IV, IUPAC Subcommittee on Gas Kinetic Data Evaluation for Atmospheric Chemistry, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Hampson Jr., R.F.; Kerr, J.A.; Troe, J. J. Phys. Chem. Ref. Data 21, 1125 (1992).	CS2 + OH → CS2OH

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
73 NIST	大気	OHラジカルとの反応		[Rate expression: 1.73x10 <sup>-14</sup> [cm <sup>3</sup> /molecule s] e <sup>-(7292 [J/mole]/RT)] Pressure: 6.40E-2 - 6.80E-2 bar Bath gas: He</sup>					249~299 K		その他, Absolute value measured directly					experimental result				Oxidation of CS <sub>2</sub> by reaction with OH. 1. Equilibrium constant for the reaction OH + CS <sub>2</sub> = CS <sub>2</sub> OH and the kinetics of the CS <sub>2</sub> OH + O <sub>2</sub> reaction, Murrells, T.P.; Lovejoy, E.R.; Ravishankara, A.R. J. Phys. Chem. 94, 2381 (1990).	CS <sub>2</sub> + ·OH → CS <sub>2</sub> OH
74 NIST	大気	OHラジカルとの反応		<=2.00E-15 cm <sup>3</sup> /molecule/sec				8022.53681	298 K							-				Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry: Volume I - gas phase reactions of Ox, HOx, NOx and SOx species, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Crowley, J.N.; Hampson, R.F.; Hynes, R.G.; Jenkin, M.E.; Rossi, M.J.; Troe, J. Atmos. Chem. Phys. 4, 1461 (2004).	CS <sub>2</sub> + ·OH → COS + SH
75 NIST	大気	OHラジカルとの反応		<=2.00E-15 cm <sup>3</sup> /molecule/sec				8022.53681	298 K							-				Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry: Volume I - gas phase reactions of Ox, HOx, NOx and SOx species, Atkinson, R.; Baulch, D.L.; Cox, R.A.; Crowley, J.N.; Hampson, R.F.; Hynes, R.G.; Jenkin, M.E.; Rossi, M.J.; Troe, J. Atmos. Chem. Phys. 4, 1461 (2004).	CS <sub>2</sub> + ·OH → COS + SH
76 NITE初期リスク評価書	大気	OHラジカルとの反応		2.9E-12 cm <sup>3</sup> /molecule/sec	5E+05~1E+06 molecule/cm <sup>3</sup>	3~6 日		3.68852267	24 °C							-		○		U.S. NLM, National Library of Medicine (2002) HSDB, Hazardous Substances Data Bank, Bethesda, MD (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB から引用). ATSDR, Agency for Toxic Substances and Disease Registry (1996) Toxicological profile for Carbon disulfide. Atlanta, GA.	p.5
77 NITE初期リスク評価書	大気	直接光分解														-				U.S. NLM, National Library of Medicine (2002) HSDB, Hazardous Substances Data Bank, Bethesda, MD (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB から引用).	p.5
78 NITE初期リスク評価書	大気	その他, 酸化分解		3.6E-12 cm <sup>3</sup> /molecule/sec [二硫化炭素と原子状の酸素との反応速度定数]	2.5E+05 molecule/cm <sup>3</sup> [原子状の酸素濃度]	8.9 日		8.91392979	25 °C							-				U.S. NLM, National Library of Medicine (2002) HSDB, Hazardous Substances Data Bank, Bethesda, MD (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB から引用). (反応速度定数) ATSDR, Agency for Toxic Substances and Disease Registry (1996) Toxicological profile for Carbon disulfide. Atlanta, GA. (分解生成物)	p.5
79 NITE初期リスク評価書	水域	その他, OHラジカルとの反応		8.0E+12 cm <sup>3</sup> /molecule/sec [情報源の間違いの可能性]	1E-20 molecule/cm <sup>3</sup> [情報源の間違いの可能性]	100 日		100.28171	24 °C							-				U.S. NLM, National Library of Medicine (2002) HSDB, Hazardous Substances Data Bank, Bethesda, MD (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB から引用).	p.5
80 NITE初期リスク評価書	水域	加水分解				1.1 年				9						外挿 (補外)	測定値外挿	○		U.S. NLM, National Library of Medicine (2002) HSDB, Hazardous Substances Data Bank, Bethesda, MD (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB から引用).	p.5
81 NITE初期リスク評価書	水域	生分解 (好氣的)					2 % [GC 測定による直接定量法]				化審法TG					experimental result				通商産業省, 1988	p.6

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価II)	備考	文献	ページ番号等
82 PhysProp	大気	OHラジカルとの反応		0.0000000000029 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec				5.53278401	24 °C							experimen tal result		○		ARNTS,RR ET AL. (1989)	Atmospheric OH Rate Constant
83 REACH登録 情報	水域	生分解 (好 氣的)					>80 %[DOC removal]1 wk]				OECD TG 301D		yes	1: reliable without restriction	key study	experimen tal result				study report, 1992	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
84 REACH登録 情報	大気	OHラジカルとの反応		<0.07E12 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec[a reaction rate constant < 0.07 E12 cm <sup>3</sup> .molec ule-1.s-1 was obtained at a temperature of 300.2 K]		>0.2 年 [expected tropospheric half life]		2.29E-22	300.2 K		その他,rate constants for the reaction of OH radicals with CS2 were determined using flash photolysis resonance fluorescence techniques		no data	3: not reliable		experimen tal result			publication, 1978	Exp Disregarded Phototransformatio n in air.001	
85 REACH登録 情報	大気	OHラジカルとの反応		<0.1E12 cm <sup>3</sup> /molec ule/sec[< 0.1 E12 cm <sup>3</sup> .molec ule-1.s-1 was obtained at a temperature of 424.5 K]		>0.2 年 [expected tropospheric half life]		1.60E-22	424.5 K		その他,rate constants for the reaction of OH radicals with CS2 were determined using flash photolysis resonance fluorescence techniques		no data	3: not reliable		experimen tal result			publication, 1978	Exp Disregarded Phototransformatio n in air.001	

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
86 REACH登録 情報	大気	その他,光 分解		1.1E-12~ 2.9E-12 cm <sup>3</sup> /mole ule/sec[An atmospheri c half life was not given in this study, though based on these results (reaction rates between 1.1 10-12 and 2.9 10-12 cm <sup>3</sup> /molec ule per second) an atmospheri c half life of CS2 was estimated to be between 5 and 15 days (BUA, 1991).]									no data	2: reliable with restrictions	key study	experimen tal result				publication, 1983 BUA, 1991	Exp Key Phototransformatio n in air.003
87 REACH登録 情報	水域	加水分解				1.1 年[half life was extrapolated ]			20 °C	7	その他,Buffered aqueous solutions were prepared, CS2 was analysed by headspace gas chromatogra phy with thermal conductivity detection		no	2: reliable with restrictions	supporting study	外挿(補 外)				publication, 1990	Exp Supporting Hydrolysis.002
88 REACH登録 情報	水域	生分解(好 氣的)					80 %[CO2 evolution]28 d]				OECD TG 301D		no data	4: not assignable	supporting study	experimen tal result				secondary source, 2005 study report, 1992, 1992-11-17	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.001
89 REACH登録 情報	水域	加水分解				1.1 年				9	その他,headspac e gas chromatogra phy with thermal conductivity detection		no data	4: not assignable	supporting study	外挿(補 外)				secondary source, 2001 study report, 1976	Exp Supporting Hydrolysis.001
90 既存点検事 業	水域	生分解					59.1 %[酸素 消費量によ る結果]				化審法TG					experimen tal result					
91 既存点検事 業	水域	生分解					0%				化審法TG					experimen tal result					

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ランカル濃度	半減期	分解度	統一表記 _半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディー該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
92 既存点検事業	水域	生分解					39.0 %[吸光度計による結果]				化審法TG					experimental result					
93 既存点検事業	水域	生分解					5 %[28日  GC法]				化審法TG					experimental result					
94 既存点検事業	水域	生分解					0 %[28日]				化審法TG					experimental result					
95 既存点検事業	水域	生分解					0%				化審法TG					experimental result					

PACS_F 等	1000
PACS_Name 等	二硫化炭素
CASRN	75-15-0
CA_IN	Carbon disulfide
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C=S

分解性 (2)

収集データ

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
1 IUCLID	readily biodegradable	80%			OECD TG 301D	yes			experimental result				p.33
2	readily biodegradable	80%			OECD TG 301D	yes			experimental result				p.33
3 NITE初期リスク評価書	not readily biodegradable	2%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result		二硫化炭素はソーダ石灰と反応するので、揮発性物質用改良型培養瓶を用いた酸素消費量の測定は現状では不可能と判断され、GC測定による直接定量法により分解率を測定している。	通商産業省, 1988.	p.6
4 REACH登録情報		>80 %	DOC removal		OECD TG 301D	yes	1: reliable without restriction	key study				1992	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
5		80%	CO_2 evolution		OECD TG 301D	no data	4: not assignable	supporting study				2005, 1992, 1992.11.17.	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.001
6 既存点検事業		39%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result				K0053
7		59.10%	O_2 consumption		化審法TG	-	-	-	experimental result				K0053
8		0%	TOC removal		化審法TG	-	-	-	experimental result				K0053
9		5%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result				K0053
10		0%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result				K0053
11		0%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result				K0053
12		5%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result			-.	K0053
13		0%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result			-.	K0053
14		0%	Test mat. analysis		化審法TG	-	-	-	experimental result			-.	K0053