

(案)

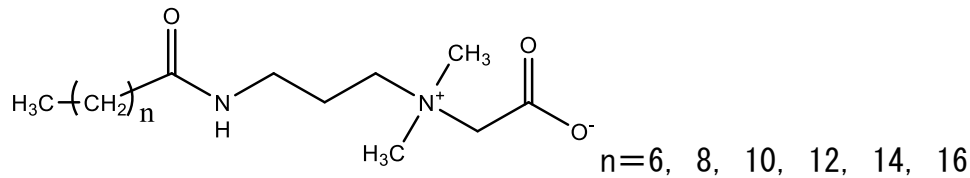
## 優先評価化学物質のリスク評価(一次)

### 生態影響に係る評価Ⅱ

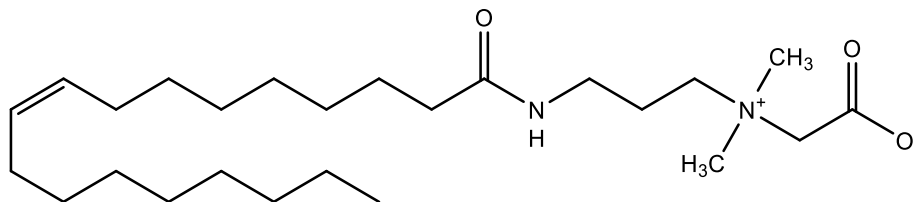
#### 物理化学的性状等の詳細資料

[ (3-アルカンアミド (C=8, 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート又は (Z) - { [3-(オクタデカ-9-エンアミド) プロピル] (ジメチル) アンモニオ} アセタート

優先評価化学物質通し番号 174



又は



令和6年1月

経済産業省

## 目 次

24		
25		
26	1 評価対象物質の性状.....	1
27	1-1 評価対象物質の設定.....	1
28	1-2 物理化学的性状及び濃縮性.....	3
29	1-3 分解性 .....	7
30	2 【付属資料】 .....	10
31	2-1 物理化学的性状等一覧.....	10
32	2-2 その他 .....	10
33		

34 1 評価対象物質の性状

35 本章では、優先評価化学物質「[(3-アルカンアミド (C = 8, 10, 12, 14, 16,  
36 18、直鎖型) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート又は (Z) - {[3-(オク  
37 タデカ-9-エンアミド) プロピル] (ジメチル) アンモニオ} アセタート (以下、CAPB (コ  
38 カミドプロピルベタイン) という。)」のリスク評価に用いる物理化学的性状データ、環境中  
39 における分解性に係るデータを示す。

40

41 1-1 評価対象物質の設定

42 CAPB は、アルキル鎖長又はアルキル鎖上のビニル基の置換状態が異なる両性界面活性剤  
43 の混合物である。そこで平成 28 年度第 3 回化審法のリスク評価等に用いる物理化学的性状、  
44 分解性、蓄積性等のレビュー会議 (平成 29 年 3 月 2 日) において、以下のように評価対象  
45 物質の検討を行った。

46 化審法の製造・輸入数量等が届出されている CAPB の CAS 登録番号は表 1-1 のとおりで  
47 あった (平成 27 年度化審法届出情報 (平成 26 年度実績))。製造輸入数量が最も多いものは  
48 アルキル鎖長が C12 となる CAS 登録番号 4292-10-8 の物質で 72 %を占めていた。

49 C<sub>8-18</sub>CAPB (C<sub>n</sub>CAPB の n はアルキル鎖長の平均値を意味する。C<sub>8-18</sub> はヤシ油由来の混合  
50 物を示す。以下同じ。) 及び CAS 登録番号の不明分を除き、製造輸入数量を用いて加重平均  
51 した場合の平均鎖長は 12.01 であった。

52

53 表 1-1 優先評価化学物質通し番号 174 の CAS 登録番号 (平成 26 年度実績)

アルキル 鎖長	構造等の 区別	CAS 登録番号
C12	直鎖	4292-10-8
C14	直鎖	59272-84-3
C8-18	総称	61789-40-0
不明		記載なし

54

55 また、OECD (2006) は、C<sub>8-18</sub>CAPB の物質の同定において、アルキル鎖長の分布を、  
56 C<sub>8</sub>CAPB: 7 %、C<sub>10</sub>CAPB: 6 %、C<sub>12</sub>CAPB: 51 %、C<sub>14</sub>CAPB: 18 %、C<sub>16</sub>CAPB: 8 %、C<sub>18</sub>CAPB:  
57 10 %であるとしている。参考までに、工業製品における CAPB のアルキル鎖長の分布 (OECD  
58 (2006), HERA (2005)) を表 1-2 に示す。

59

60

61

62

表 1-2 工業製品における CAPB のアルキル鎖長の分布

アルキル鎖長	組成 (%)		
	C6	—	—
C8	5.6~6.0	≤10	5.0
C10	5.4~5.7	≤10	6.1
C12	53.1~53.2	47~60	56.4
C14	16.1~17.4	17~25	14.2
C16	8.1~8.3	7~14	8.1
C18	10.0~10.2	7~14	9.9
情報源	OECD (2006), HERA (2005)	OECD (2006), HERA (2005)	OECD (2006)
文献	CIR (1991)	Henkel KGaA (2001)	Unilever Research (1997)

63

64 物理化学的性状等を決定するに当たっては、国内の製造・輸入数量において7割を超え、  
65 かつ製造輸入数量を用いて加重平均した場合にも分布の中心となり、また工業製品中の組  
66 成で最も高い割合を占めるとされている C<sub>12</sub>CAPB の値を原則として採用した。

67

68 1-2 物理化学的性状及び濃縮性

69 下表に、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、  
70 技術ガイダンス<sup>1</sup>という。）に従い精査<sup>2</sup>し、モデル推計に採用した物理化学的性状及び生物  
71 濃縮係数を示す。なお、表中の下線部は、評価Ⅱにおいて精査した結果、評価Ⅰから変更し  
72 た値を示している。

73

74 表 1-3 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	—	342.51	—	342.51
融点	°C	(283)	MPBPWIN(v1.43)によるC <sub>12</sub> CAPBの推計値 <sup>1)</sup>	283 <sup>1)</sup>
沸点	°C	(651)	MPBPWIN(v1.43)によるC <sub>12</sub> CAPBの推計値 <sup>1)</sup>	651 <sup>1)</sup>
蒸気圧	Pa	(4.5 × 10 <sup>-13</sup> )	MPBPWIN(v1.43)によるC <sub>12</sub> CAPBの推計値を20°Cに補正した値 <sup>1)</sup>	4.54 × 10 <sup>-13</sup> <sup>1)</sup>
臨界ミセル濃度(CMC)	mg/L	<u>250</u>	暴露推計用：CMCの20°C測定値 <sup>3)</sup>	— <sup>9)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	<u>(1 × 10<sup>6</sup>)</u>	排出係数設定用：水に混和 <sup>2)</sup>	5 × 10 <sup>4</sup> <sup>2), 3)</sup>
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	<u>2.4</u>	低速攪拌法によるC <sub>12</sub> CAPBのpH=7.0の測定値の算術平均値 <sup>10), 11)</sup>	2.69 <sup>1)</sup>
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	<u>(6.2 × 10<sup>-13</sup>)</u>	Henry推計式による値 <sup>4)</sup>	2.71 × 10 <sup>-17</sup> <sup>1)</sup>
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	200	OECD TG 121によるC <sub>12</sub> CAPBの測定値 <sup>5)</sup>	200 <sup>5)</sup>
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	<u>6.5</u>	カテゴリーアプローチによる推計 <sup>6)</sup>	70.8 <sup>1)</sup>
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPowとBCFから設定 <sup>4)</sup>	1
酸解離定数(pKa)	—	<u>2.0</u>	複数の推計値の算術平均値 <sup>7), 8)</sup>	— <sup>9)</sup>

75 ※令和5年度第1回化審法のリスク評価等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  
76 (令和5年10月19日)で了承された値

- 77 1) EPI Suite 7) SPARC(2013)  
78 2) IUCLID(2000) 8) ACD/Labs(2015)  
79 3) ECHA 9) 評価Ⅰにおいては考慮しない  
80 4) MHLW, METI, MOE(2014) 10) NITE(2023)  
81 5) OECD(2006) 11) Hodgesら(2019)  
82 6) NITE(2009) 括弧内は参考値であることを示す

83 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

84

85 ①融点

<sup>1</sup> 「I.4.4.2 物理化学的性状と生物蓄積性に係る追加的な情報収集」において、評価Ⅱでの追加的な情報収集について記載されている。

<sup>2</sup> 界面活性剤特有の性状を考慮し、水に対する溶解度やlogPow等については、ECHA等における評価手法を参考に精査。

86 評価Ⅰでは、MPBPWIN v1.43 を用いた C<sub>12</sub>CAPB の推計値 (283 °C) を採用した。この値  
87 は、ECHA 及び OECD (2006) にも記載されている。ECHA において、OECD TG 102 の試験  
88 で 60 °C から 260 °C の間で分解が起こり値が同定できなかったとの記載があるため、評価Ⅱ  
89 においては、この値 (283 °C) を参考値として用いる。

90

#### 91 ②沸点

92 評価Ⅰでは、MPBPWIN v1.43 を用いた C<sub>12</sub>CAPB の推計値 (651 °C) を採用した。ECHA  
93 において、OECD TG 103 の試験で 60 °C から 260 °C の間で分解が起こり値が同定できなかつ  
94 たとの記載があるため、評価Ⅱにおいては、この値 (651 °C) を参考値として用いる。

95

#### 96 ③蒸気圧

97 評価Ⅰでは、MPBPWIN v1.43 を用いた 25 °C における C<sub>12</sub>CAPB の推計値 ( $6.4 \times 10^{-13}$  Pa)  
98 を 20 °C の値に補正したもの ( $4.5 \times 10^{-13}$  Pa) を採用した。この値は、ECHA 及び OECD (2006)  
99 にも記載されている。推計に用いた融点 (283 °C) 及び沸点 (651 °C) を本書では参考値とし  
100 ていることから、評価Ⅱにおいても、この値 ( $4.5 \times 10^{-13}$  Pa) を参考値として用いる。

101

#### 102 ④臨界ミセル濃度(CMC)

103 評価Ⅰでは界面活性剤か否かを考慮しないため、値は設定されていない。

104 ECHA では、臨界ミセル濃度 (CMC) を自動希釈法 (逆 CMC) を使用して測定し、平均表  
105 面張力対濃度曲線を作成して 20 °C における CMC を 250 mg/L と報告している。

106 評価Ⅱにおいては、実環境中の濃度を考慮し、暴露推計時に用いる水への溶解度として  
107 CMC の 250 mg/L を用いる。

108

#### 109 ⑤水に対する溶解度

110 評価Ⅰでは、IUCLID (2000) に記載された混和状態の C<sub>12</sub>CAPB の値 ( $1 \times 10^5$  mg/L) と  
111 ECHA の C<sub>12</sub>CAPB の採用値 (250 mg/L) の平均値 ( $5 \times 10^4$  mg/L) を採用した。

112 評価Ⅱにおいては、排出量推計時に用いる水への溶解度として本物質は水に混和するこ  
113 とから参考値として  $1 \times 10^6$  mg/L を用いる。

114

#### 115 ⑥1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)

116 評価Ⅰでは、KOWWIN v1.68 を用い双性イオン型の構造により推計した C<sub>12</sub>CAPB の値  
117 (2.69) を採用した。その他の信頼できる情報源<sup>3</sup>に測定値はないが、NITE (2023) では、低速  
118 攪拌法を用いた C<sub>12</sub>CAPB の pH 7.0 における分配係数が 2.2 と報告されている。また、  
119 C<sub>12</sub>CAPB の pH 7.0 における分配係数として、Hodges ら (2019)では、低速攪拌法で 2.59、溶

<sup>3</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。

120 解度比法で 1.75 が報告されている。

121 評価Ⅱにおいては、低速攪拌法を用いた測定値の算術平均値 (2.4) を用いる。

122

123 ⑦ヘンリー係数

124 評価Ⅰでは、HENRYWIN v3.20 を用いた 20 °Cにおける C<sub>12</sub>CAPB の推計値 ( $2.7 \times 10^{-17}$  Pa·  
125 m<sup>3</sup>/mol) を採用した。その他の信頼できる情報源に測定値はなかった。暴露推計時に用いる  
126 水溶解度 (CMC) が 1 mol/L 未満であるため技術ガイダンスに従い Henry 推計式を用いて  
127 20 °Cにおける蒸気圧と水に対する溶解度 (CMC) から算出すると  $6.2 \times 10^{-13}$  Pa·m<sup>3</sup>/mol が得  
128 られた。推計に用いた蒸気圧 ( $4.5 \times 10^{-13}$  Pa) を本書では参考値としていることから評価Ⅱ  
129 においては、Henry 推計式の値 ( $6.2 \times 10^{-13}$  Pa·m<sup>3</sup>/mol) を参考値として用いる。

130

131 ⑧有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)

132 評価Ⅰでは、OECD (2006) に記載された OECD TG121 (HPLC 法) による C<sub>12</sub>CAPB の有機  
133 炭素補正土壌吸着定数 (Koc) の測定値 (200 L/kg) を採用した。その他の信頼できる情報源  
134 に界面活性剤に使用できると考えられる OECD TG106 (バッチ平衡法) を含め、測定値はな  
135 かった。そこで、KOCWIN v.2.01a (MCI 法) を用い双性イオン型の構造により推計し、  
136 C<sub>12</sub>CAPB の推計値 647.5 L/kgを得た。ただし、KOCWIN の結果には、C<sub>12</sub>CAPB は第四級ア  
137 ンモニウム化合物であり、第四級アンモニウム化合物の土壌吸着はイオン交換によるメカ  
138 ニズムで生じていると示唆される、との記載があった。また、KOCWIN には第四級アンモ  
139 ニウム化合物のトレーニングセットを含んでいないため、C<sub>12</sub>CAPB の Koc の推計は  
140 KOCWIN の範囲外であるとの記載が計算結果にあった。

141 そのため、評価Ⅱにおいても OECD (2006) の OECD TG121 (HPLC 法) による測定値 (200  
142 L/kg) を用いる。ただし、ECHA の情報要件と化学物質安全性評価に関するガイダンス<sup>4</sup>に  
143 は、OECD TG 121 (HPLC 法) は界面活性剤には適さないと記載されており、不確実性を持  
144 った値であることに留意する必要がある。

145

146 ⑨生物濃縮係数(BCF)

147 評価Ⅰでは、BCFBAFWIN を用いた C<sub>12</sub>CAPB の推計値 (70.8 L/kg) を採用した。評価Ⅱ  
148 では、技術ガイダンスに従い、NITE カテゴリーアプローチ (カテゴリーI) を用い⑥で採用  
149 した値 (2.4) より再推定を行った値 (6.5 L/kg) を用いる。

150

151 ⑩生物蓄積係数(BMF)

152 評価Ⅰで採用した値 (1) は、C<sub>12</sub>CAPB の logPow (2.69) 及び BCF (70.8 L/kg) から技術ガ  
153 イダンスに従って設定したものである。BMF の測定値は得られなかったため、評価Ⅱにお

---

<sup>4</sup> ECHA (2017) Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.7a: Endpoint specific guidance  
[https://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information\\_requirements\\_r7a\\_en.pdf](https://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r7a_en.pdf)

154 いても logPow (2.4) と BCF (6.5 L/kg) に基づく設定値 (1) を用いる。

155

156 ①酸解離定数(pKa)

157 CAPB は通常水溶液として使用され、C<sub>12</sub>CAPB の水溶液の pH は 6.5～7.5 である。HERA  
158 (2005) はベタインについて、「非常に低い pH では陽イオン特性が支配的であり、アルカリ  
159 条件下では陰イオン性の挙動をとらない」としている。また、信頼性の定まった情報源から  
160 は解離定数に関する測定値は得られなかった。分子構造より ACD/Percepta 14.0.0 (Build 2726)  
161 の pKA Classic、pKA GALAS 及び SPARC を用いて推計した pKaacid はそれぞれ、1.8 ± 0.3、  
162 1.9 ± 0.4 及び 2.24 であり、評価Ⅱではこれらの算術平均値 (2.0) を用いる。pKa が 2.0 の場  
163 合、pH 5.0、6.0、7.0、8.0、9.0、10.0 の水中で陽イオンはそれぞれ 0.1 %、0.0 %、0.0 %、  
164 0.0 %、0.0 %、0.0 % となり、環境中の pH では主に双性イオンの状態で存在すると考えられ  
165 る。

166

167

168

表 1-4 ベタインの構造に対する pH の影響

pH range	Betaines
Alkaline	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{R}-\text{N}^+-\text{CH}_2\text{COO}^- \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$
isoelectric	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{R}-\text{N}^+-\text{CH}_2\text{COO}^- \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$ Domsch 1995, BUA 1997
Acidic	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{R}-\text{N}^+-\text{CH}_2\text{COOH} \\   \\ \text{CH}_3 \end{array} + \text{X}^-$

169

170

171

(HERA2005)



172 1-3 分解性

173 下表に、技術ガイダンスに従い精査し、モデル推計に採用した分解半減期に係るデータを  
174 示す。

175

176

表 1-5 分解に係るデータのまとめ\*

項目		半減期 (日)	詳細
大気	大気における総括分解半減期		NA
	機序別の 半減期	OH ラジカルとの反応	0.33
		オゾンとの反応	NA
		硝酸ラジカルとの反応	NA
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
		加水分解	365
		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
		加水分解	365
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
		加水分解	365

177 ※令和 5 年度第 1 回化審法のリスク評価等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  
178 (令和 5 年 10 月 19 日) で了承された値

179

180

181

182

183

184

185

186

187

188

189

190

191

192

193

- 1) EPI Suite
  - 2) ECHA
  - 3) OECD (2006)
  - 4) METI (2004)
- NA: 情報が得られなかったことを示す

上記分解項目について、精査概要を以下に示す。なお、分解に係る情報には、分解の機序ごとの速度定数又は半減期と、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「総括分解半減期」があり、各環境媒体の「総括分解半減期」に関する情報が得られない場合は、分解の機序別の情報を用いる。

①大気

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

194 ても、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応に関する情報は得られなかった。

195 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

196 大気中における OH ラジカルとの反応速度定数の測定値に関する情報は得られなかった  
197 ため、AOPWIN (v1.91) により推計された C<sub>12</sub>CAPB の反応速度定数  $4.8 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$   
198 を半減期算出に採用する。この値は ECHA 及び OECD (2006) にも記載されている。大気中  
199 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの  $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$  とした場合、半減期は 0.33 日と  
200 算出される。評価Ⅱではこの値 (0.33 日) を用いる。なお、OECD (2006) では、「CAPB の蒸  
201 気圧が非常に低いことから、この分解経路は環境的に重要ではない」とも記載されている。

202

203 ②水中

204 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機序  
205 別の反応に関する情報が得られた。

206 ②-1 生分解の半減期

207 化審法の分解度試験 (標準法) により、28 日間後の C<sub>12</sub>CAPB の BOD 分解度、TOC 分解  
208 度、HPLC 分解度はそれぞれ 93 %、97 %、100 %であるという結果が得られている (METI  
209 (2004))。また、ECHA 及び OECD (2006) では、EU Method C.4-F の 28 日の試験結果として、  
210 ThOD と COD の値より求めた分解度が 82 %、95 %であると記載されている。評価Ⅱにおい  
211 ては、METI (2004) の結果から技術ガイダンスの変換方法に従い得られた生分解半減期であ  
212 る 5 日を用いることとする。

213 ②-2 加水分解の半減期

214 OECD (2006) において、HYDROWIN v1.67 を用い推定した C<sub>12</sub>CAPB の加水分解の半減期  
215 が > 1 年であるため、評価Ⅱでは加水分解による半減期を 365 日とする。なお OECD (2006)  
216 では「CAPB は環境条件下で加水分解されるとは予想されない」とも記載されている。

217

218 ③土壌

219 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、生分解及び加水分解の機  
220 序別の反応に関する情報が得られた。

221 ③-1 生分解の半減期

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

224 ③-2 加水分解の半減期

225 半減期に関するデータは得られなかったため、土壌中での加水分解半減期は、技術ガイダ  
226 ンスに従って、水中の加水分解半減期と同じ 365 日とする。

227

228 ④底質

229 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。また、機序別の半減期に関す

230 る情報も得られなかった。

231 ④-1 生分解の半減期

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

234 ④-2 加水分解の半減期

235 半減期に関するデータは得られなかったため、底質中での加水分解半減期は、技術ガイダンスに従って、水中の加水分解半減期と同じ365日とする。

237

238 **2 【付属資料】**

239 **2-1 物理化学的性状等一覧**

240 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

241

242 ACD/Labs (2015): Advanced Chemistry Development, Inc. ACD/Percepta 14.0.0.

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

244 <http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>, (2017-01-16 閲  
245 覧).

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

247 HERA (2005): Human and Environmental Risk Assessment on ingredients of household cleaning  
248 products, Cocamidopropyl betaine (CAPB), 2005.

249 Hodges, Geoff et al. (2019): A Comparison of log Kow (n-octanol-water partition coefficient) values  
250 for non-ionic, anionic, cationic and amphoteric surfactants determined using predictions and  
251 experimental methods. Environmental Sciences Europe, 31:1.

252 IUCLID (2000): EU ECB. IUCLID Dataset, (carboxymethyl)dimethyl-3-[(1-  
253 oxododecyl)amino]propylammonium hydroxide, 2000.

254 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  
255 ダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

256 METI (2004): METI. #28 水中の生分解性：スクリーニング試験. 既存化学物質点検, 2004,  
257 <http://www.nite.go.jp/chem/kasinn/jcheck/index.html>.

258 NITE (2023): 小黒かく, 近藤啓子, 篠崎裕哉, 藤原亜矢子, 低速攪拌法を用いた界面活性剤  
259 の1-オクタノール/水分配係数の測定, 日本分析化学会第72年会, 要旨集, 2P-264, 2023.

260 OECD (2006): OECD. SIDS Initial assessment Report, Alkylamidopropyl betaines (Cocamidopropyl  
261 betaine, Lauramidopropyl betaine). 2006.

262 SPARC (2013): ARChem's physicochemical calculator. <http://www.archemcalc.com/sparc.html>

263

264 **2-2 その他**

265 特になし。

266

情報源略称	詳細等
ACD	ACD/Labs Percepta
ECHA	Information on Chemicals – Registered substances.
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
IUCLID	International Uniform Chemical Information Database
SIDS	OECD: SIDSレポート
SPARC	SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry
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	121000,174000
優先評価化学物質名称	[ (3-アルカンアミド (C=8, 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート又は (Z) - [ [3- (オクタデカ-9-エンアミド) プロピル] (ジメチル) アンモニオ] アセタート
CASRN	4292-10-8
CA_IN	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]-, inner salt
その他番号	
その他名称	2- [ (3-オドデカンアミドプロパン-1-イル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート
SMILES	CCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(+)(CC(=O)O-)(C)C

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	融点	282.96 °C	282.96	MPBPWIN				(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 Weighted Value	2C	○	○			
2 IUCLID	融点	0 °C	0		no					4A	×	×			p.5
3 ECHA	融点	melting point not identifiable due to decomposition	単位換算不可	OECD TG 102	no data	1: reliable without restriction	key study	experimental result		-	-	×	Decomp. temp.:60 - 260 °C	study report/2010	Exp Key Melting point/freezing point.001
ECHA	融点	283 °C	283	MPBPWIN	no	4 (not assignable)	supporting study	estimated by calculation	EPIWIN v3.12, MPBPWIN v1.41	4C	-	○		other: unpublished calculation/2004	Read-across Supporting Melting point/freezing point.003
4 SIDS	融点	283 °C	283	MPBPWIN		2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.41	2C	×	○		Fh-ITEM (2004a) Calculation of environmental fate data via EPISUITE v3.11 (boiling point via MPBWIN v1.41, melting point via MPBWIN v1.41, partition coefficient via KOWWIN v1.67, vapour pressure via MPBWIN v1.41, water solubility via WSKOW v1.41, BCF via BCFWIN v.2.15, stability in water via HYDROWIN v1.67, photodegradation via AOPWIN v1.91, Henry's Law constant via HENRYWIN v3.10)	p.13; SIDS Dossier p.9

基本情報

優先通し番号	121000,174000
優先評価化学物質名称	[ (3-アルカンアミド (C=8, 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート又は (Z) - [ [3- (オクタデカ-9-エンアミド) プロピル] (ジメチル) アンモニオ] アセタート
CASRN	4292-10-8
CA IN	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]-, inner salt
その他番号	
その他名称	2- [ (3-ドデカンアミドプロパン-1-イル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート
SMILES	CCCCCCCCCCC(=O)NCC[N+](C)(C)O(-)(C)C

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPaにおける 沸点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	650.63 °C	650.63			MPBPWIN				(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 Adapted Stein and Brown Method	2C	○	○			
2 IUCLID	100 °C	100	100.445	1000 hPa							4A	×	×			p.5
3 ECHA	651 °C	651	651.0208	1 013 hPa	MPBPWIN	no	4 (not assignable)	supporting study	estimated by calculation	EPIWIN v3.12, MPBPWIN v1.41	-	-	○		other: unpublished calculation/2004	Calc Supporting Boiling point.001
	melting point not identifyabl e due to decomposi tion	単位換算 不可		1 013 hPa	OECD TG 102	no data	1: reliable without restriction	key study	experimental result		-	-	×	Decomp. temp.:60 - 260 ° C	study report/2010	Exp Key Boiling point.003
4 SIDS	651 °C	651	651.0208	1013 hPa	MPBPWIN		2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.41	4C	×	○		Fh-ITEM (2004a) Calculation of environmental fate data via EPISUITE v3.11 (boiling point via MPBWIN v1.41, melting point via MPBWIN v1.41, partition coefficient via KOWWIN v1.67, vapour pressure via MPBWIN v1.41, water solubility via WSKOW v1.41, BCF via BCFWIN v.2.15, stability in water via HYDROWIN v1.67, photodegradation via AOPWIN v1.91, Henry's Law constant via HENRYWIN v3.10)	p.13; SIDS Dossier p.9

基本情報

優先通し番号	121000,174000
優先評価化学物質名称	[ (3-アルカンアミド (C=8, 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート又は (Z) - [ 3 - (オクタデカ-9-エンアミド) プロピル] (ジメチル) アンモニオ] アセタート
CASRN	4292-10-8
CA IN	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]-, inner salt
その他番号	
その他名称	2 - [ (3-ドデカンアミドプロパン-1-イル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート
SMILES	CCCCCCCCC(=O)NCCN(C)C(=O)O

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 ディー該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディー該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	6.41E-13 Pa[2C以下の値を用いて推定(4)]	6.41E-13	4.54E-13	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR	MPBPWIN v1.43	4C	○	○			
2 ECHA	<=0.0031 hPa	0.31	0.31	20 °C	OECD TG 104	no data	2: reliable with restrictions	supporting study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	×	C8/10 If a rest of humidity exist, this can result in a too high value. Hence, a comparator check with an absolute dry sample can yield in a lower result.	study report/2006	Read across Subs Supporting Vapour pressure.001
3 ECHA	6.4E-15 hPa	6.4 E-13	4.54E-13	25 °C	MPBPWIN	no	4: not assignable	supporting study	estimated by calculation	MPBPWIN v1.41	-	-	×		other: unpublished calculation/2004	Calc Supporting Vapour pressure.003
4 SIDS	6.4E-15 hPa	6.4E-13	4.54E-13	25 °C	MPBPWIN		2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.41	4C	○	○	Fh-ITEM (2004a) Calculation of environmental fate data via EPISUITE v3.11 (boiling point via MPBW v1.41, melting point via MPBW v1.41, partition coefficient via KOWWIN v1.67, vapour pressure via MPBW v1.41, water solubility via WSKOW v1.41, BCF via BCFWIN v.2.15, stability in water via HYDROWIN v1.67, photodegradation via AOPWIN v1.91, Henry's Law constant via HENRYWIN v3.10)		p.13; SIDS Dossier p.10-11



基本情報

優先通し番号	121000,174000
優先評価化学物質名称	[ (3-アルカンアミド (C=8, 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート又は (Z) - [ (3- (オクタデカ-9-エンアミド) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート
CASRN	4292-10-8
CA_IN	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]-, inner salt
その他番号	
その他名称	2- [ (3-オドデカンアミドプロパン-1-イル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート
SMILES	CCCCCCCCC(=O)NCCN(C)C(=O)O[C]C

水溶解度(CMC)

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	信頼性ラック (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 EPI Suite	1755 mg/L	1755	1638.3038	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR	WSKOW v1.41	4C	×	×			
2 IUCLID	>100 g/L [miscible]	100000	100000	20 °C	4~6 [4-6 at 100 g/l and 20 degree C]	その他	no					4A	○	×			p.6
3 ECHA	1755 mg/L	1755	1638.3038	25 °C		WSKOWWIN	no data	4: not assignable	supporting study	estimated by calculation	EPIWIN v3.12, WSKOW v1.41	-	-	×	soluble (1000-10000 mg/L)	other: unpublished calculation / 2004	Calc Supporting Water solubility.001
4 ECHA	<=250 mg/L	250	250	20 °C		-	no data	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	○	○	The test item is visually unlimited soluble in water. The CMC at 20°C of C12 AAPB was determined to be ca. 250 mg/L. Therefore the water solubility of C12 AAPB molecules is <=250 mg/L. moderately soluble (100-1000 mg/L)	study report / 2010	Exp Key Water solubility.003
5 SIDS	1755 mg/L	1755	1638.3038	25 °C		WSKOWWIN		2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR	WSKOW v1.41	4C	×	×		Fh-ITEM (2004a) Calculation of environmental fate data via EPISUITE v3.11 (boiling point via MPBWIN v1.41, melting point via MPBWIN v1.41, partition coefficient via KOWWIN v1.67, vapour pressure via MPBWIN v1.41, water solubility via WSKOW v1.41, BCF via BCFWIN v2.15, stability in water via HYDROWIN v1.67, photodegradation via AOPWIN v1.91, Henry's Law constant via HENRYWIN v3.10)	p.13; SIDS Dossier p.11-12

基本情報

優先通し番号	121000,174000
優先評価化学物質名称	[ (3-アルカンアミド (C=8, 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート又は (Z) - [ (3- (オクタデカ-9-エンアミド) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート
CASRN	4292-10-8
CA IN	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]-, inner salt
その他番号	
その他名称	2- [ (3-ドデカンアミドプロパン-1-イル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート
SMILES	CCCCCCCCC(=O)NCCCN+(CC(=O)O-)(C)C

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	2.687	2.687			KOWWIN				(Q)SAR	KOWWIN v1.68	2C	○	×	双性イオン型のSMILESにて推計		
2 ECHA	3.54[C12 derivate]	3.54	20 °C		-	no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×	×		other: unpublished calculation. 2010	Calc Key Partition coefficient.001
3 SIDS	0.69	0.69	25 °C		KOWWIN		2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR	KOWWIN v1.67	4C	×	×		Fh-ITEM (2004a) Calculation of environmental fate data via EPISUITE v3.11 (boiling point via MPBWIN v1.41, melting point via MPBWIN v1.41, partition coefficient via KOWWIN v1.67, vapour pressure via MPBWIN v1.41, water solubility via WSKOW v1.41, BCF via BCFWIN v.2.15, stability in water via HYDROWIN v1.67, photodegradation via AOPWIN v1.91, Henry's Law constant via HENRYWIN v3.10)	p.13; SIDS Dossier p.11
NITE	2.2	2.2	25 °C	7.0	低速攪拌法	no			測定値		-	-	○		小黒かく, 近藤啓子, 篠崎裕哉, 藤原亜矢 子, 低速攪拌法を用いた界面活性剤の1- オクタノール/水分配係数の測定, 日本 分析化学会第72年会要旨集, 2P-264, 2023.	
Hodges et al.	2.59	2.59	25 °C	7.0	低速攪拌法	no			測定値		-	-	○		Hodges, Geoff et al. (2019) A Comparison of log Kow (n-octanol- water partition coefficient) values for non-ionic, anionic, cationic and amphoteric surfactants determined using predictions and experimental methods. Environmental Sciences Europe, 31:1.	p.7
Hodges et al.	1.75	1.75			溶解度比法	no			算出値	オクタノール溶解度 とCMCの比から算 出	-	-	×		Hodges, Geoff et al. (2019) A Comparison of log Kow (n-octanol- water partition coefficient) values for non-ionic, anionic, cationic and amphoteric surfactants determined using predictions and experimental methods. Environmental Sciences Europe, 31:1.	p.7

基本情報

優先通し番号	121000,174000
優先評価化学物質名称	[(3-アルカンアミド(C=8, 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)プロピル) (ジメチル)アンモニオ]アセタート又は(Z)-[3-(オクタデカ-9-エンアミド)プロピル] (ジメチル)アンモニオ]アセタート
CASRN	4292-10-8
CA_IN	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]-, inner salt
その他番号	
その他名称	2-[(3-ドデカンアミドプロパン-1-イル) (ジメチル)アンモニオ]アセタート
SMILES	CCCCCCCCC(=O)NCCCN(+)(C)C(=O)O-[C]C

土壌吸着係数

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
1 EPI Suite	Koc	647.5	647.5				KOCWIN				(Q)SAR	KOCWIN v2.01	4C	×	×			
ECHA	Koc	320[log Koc=2.5]	320	20 °C			OECD TG 121	no data	2: reliable with restrictions	weight of evidence	estimated by calculation		4C	×	×		study report/2009/study report/2009	Calc WoE Adsorption / desorption.004
	Koc	726	726				ACD	no data	2: reliable with restrictions	weight of evidence	estimated by calculation	using the guideline conform EUSES algorithm for non hydrophobics, on the basis of ACD calculated Kow values	-	-	×		other: unpublished calculation /2010	Calc WoE Adsorption / desorption.005
	Koc	3063[log Koc=3.486]	3063				PCKOCWIN	no data	4: not assignable	supporting study	estimated by calculation	EPIWIN v3.11, via PCKOCWIN v1.66	-	-	×		other: unpublished calculation /2004/review article or handbook/Schutz vor weiteren anthropogenen Organikaenitragen. /Litz/1990 /In: Blume H-P (ed.), Handbuch des Bodenschutzes, ecomed-Verlag Landsberg/Lech, pp. 579-584	Calc Supporting Adsorption / desorption.006
9 SIDS	Koc	3063[log Koc=3.486; Koc=3063]	3063				PCKOCWIN		2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR	PCKOCWIN v1.66	4C	×	×		Fh-ITEM (2004a) Calculation of environmental fate data via EPISUITE v3.11 (boiling point via MPBWIN v1.41, melting point via MPBWIN v1.41, partition coefficient via KOWWIN v1.67, vapour pressure via MPBWIN v1.41, water solubility via WSKOW v1.41, BCF via BCFWIN v.2.15, stability in water via HYDROWIN v1.67, photodegradation via AOPWIN v1.91, Henry's Law constant via HENRYWIN v3.10) Litz (1990) Schutz vor weiteren anthropogenen Organikaenitragen. In: Blume H-P (ed.) Handbuch des Bodenschutzes, ecomed-Verlag Landsberg/Lech, pp. 579-584	p.14; SIDS Dossier p.16-17

基本情報

優先通し番号	121000,174000
優先評価化学物質名称	[(3-アルカンアミド(C=8, 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)プロピル) (ジメチル)アンモニオ]アセタート又は(Z)-[3-(オクタデカ-9-エンアミド)プロピル] (ジメチル)アンモニオ]アセタート
CASRN	4292-10-8
CA_IN	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]-, inner salt
その他番号	
その他名称	Z-[3-ドデカンアミドプロパン-1-イル] (ジメチル)アンモニオ]アセタート
SMILES	CCCCCCCCCCC(=O)NCCN(+)(C)C(=O)O-[C]C

土壌吸着係数

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
10 SIDS	logKoc	2.3	199.5262315				OECD TG 121		2: reliable with restrictions	key study	experimental result		1B	○	○		Degussa (2006) Determination of the soil adsorption coefficient (logKoc) of (Dodecyl)Amido Propylbetain and (Tetradecyl)Amido Propylbetain - Screening Results, report number AL 06028771-IV of 06.07.06	p.14; SIDS Dossier p.17

基本情報

優先通し番号	121000.174000
優先評価化学物質名称	[ (3-アルカンアミド (C=8, 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート又は (Z) - [ (3- (オクタデカ-9-エンアミド) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート
CASRN	4292-10-8
CA_IN	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]-, inner salt
その他番号	
その他名称	Z- [ (3-ドデカンアミドプロパン-1-イル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート
SMILES	CCCCCCCCC(=O)NCC[N+](C)(C)O-[C]C

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
1 EPI Suite	2.71E-017 Pa・m <sup>3</sup> /mol	2.71E-17	20°C				(Q)SAR	HENRYWIN v3.20 Bond Estimation Method	2C	○	×	その他, Experimental Data from PhysProp Database		
2 ECHA	6.27E-16 Pa・m <sup>3</sup> /mol	6.27E-16	25°C		4: not assignable	supporting study	estimated by calculation	EPIWIN v3.11, HENRYWIN v3.10	4C	×	×		other: unpublished calculation / 2004 / publication / Thomas RG / 1990 / Volatilization from water / In: Handbook of chemical property estimation methods; Lyman WJ, Reehl WF, Rosenblatt DH (eds), McGraw-Hill Book Company, New York, pp 15-1 - 15-34	Calc Supporting Henry's Law constant.001
4 SIDS	6.27E-16 Pa・m <sup>3</sup> /mol	6.27E-16			2: reliable with restrictions	key study	(Q)SAR	HENRYWIN v3.10	4C	×	×		Fh-ITEM (2004a) Calculation of environmental fate data via EPISUITE v3.11 (boiling point via MPBWIN v1.41, melting point via MPBWIN v1.41, partition coefficient via KOWWIN v1.67, vapour pressure via MPBWIN v1.41, water solubility via WSKOW v1.41, BCF via BCFWIN v.2.15, stability in water via HYDROWIN v1.67, photodegradation via AOPWIN v1.91, Henry's Law constant via HENRYWIN v3.10) Thomas RG (1990) Volatilization from water. In: Handbook of chemical property estimation methods; Lyman WJ, Reehl WF, Rosenblatt DH (eds), McGraw-Hill Book Company, New York, pp 15-1 - 15-34	p.13; SIDS Dossier p.16
5 Henry計算式		6.22E-13					EST	H=VP/(WS/MW)			○	VP(0.0000000000064), WS(250), MW(342.51)を用いて計算		

基本情報

優先通し番号	121000,174000
優先評価化学物質名称	[(3-アルカンアミド(C=8, 10, 12, 14, 16, 18, 直鎖型)プロピル)(ジメチル)アンモニオ]アセタート又は(Z)-[(3-(オクタデカ-9-エンアミド)プロピル)(ジメチル)アンモニオ]アセタート
CASRN	4292-10-8
CA IN	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]-, inner salt
その他番号	
その他名称	2-[(3-ドデカンアミドプロパン-1-イル)(ジメチル)アンモニオ]アセタート
SMILES	CCCCCCCCC(=O)NCCN(C)C(=O)O[C]C

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誌非	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-誌非(評価I)	キースタディ-誌非(評価II)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite					BCF		70.79 L/kg (wet)2C以下の値を用いて推定(4)]	70.79					(Q)SAR	BCFBFWIN	4C	○				
2 SIDS					BCF		71	71					other: calculated	via BCFWIN v2.15 log Kow used for BCF estimate: 0.69					Fh-ITEM (2004a) Calculation of environmental fate data via EPISUITE v3.11 (boiling point via MPBWIN v1.41, melting point via MPBWIN v1.41, partition coefficient via KOWWIN v1.67, vapour pressure via MPBWIN v1.41, water solubility via WSKOW v1.41, BCF via BCFWIN v.2.15, stability in water via HYDROWIN v1.67, photodegradation via AOPWIN v1.91, Henry's Law constant via HENRYWIN v3.10)	
3 NITEカテゴリアブローネ		2			BCF		6.5L/kg	6.5	技術ガイダンス 式 1-2						-	-	○	logBCF=1.05*logPow-1.71		

基本情報

優先通し番号	121000,174000
優先評価化学物質名称	[ (3-アルカンアミド (C=8, 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート又は (Z) - [ [3- (オクタデカ-9-エンアミド) プロピル] (ジメチル) アンモニオ] アセタート
CASRN	4292-10-8
CA IN	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]-, inner salt
その他番号	
その他名称	2- [ (3-ドデカンアミドプロパン-1-イル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート
SMILES	<chem>CCCCCCCCC(=O)NCC[N+](C)(C)O[O-]X(C)C</chem>

解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 SPARC	pKa	2.24	算出不可							estimated by calculation		○			
2 ACD	Strongest pKa(Acid):	1.8±0.3	算出不可			ACD/pKa Classic				estimated by calculation		○			
3 ACD	Strongest pKa(Acid):	1.9±0.4	算出不可			ACD/pKa GALAS				estimated by calculation		○			

基本情報

優先通し番号	121000,174000
優先評価化学物質名称	[ [ (3-アルカンアミド (C=8, 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート又は (Z) - [ [3- (オクタデカ-9-エンアミド) プロピル] (ジメチル) アンモニオ] アセタート
CASRN	4292-10-8
CA-IN	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]-, inner salt
その他番号	
その他名称	Z- [ [ (3-ドデカンアミドプロパン-1-イル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート
SMILES	CCCCCCCCC(=O)NCCN(C)C(=O)O(C)C

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 是非	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
ECHA	大気	OHラジカルによる光化学反応	48.420 x 10E-12 cm <sup>3</sup> /molecule x s		500000 molecules/cm <sup>3</sup> (24h-day)	8h			25°C				no	2 (reliable with restrictions)	key study	estimated by calculation	EPIWIN v3.11, AOPWIN v1.91	○		other: unpublished calculation/2004	Phototransformation in air
SIDS	大気	OH based on intensity of sunlight	.000000000 0484209 cm <sup>3</sup> /(molecule*sec)		500000 molecule/cm <sup>3</sup>	50 % after 8 hour(s)								(2) valid with restrictions	Critical study for SIDS endpoint	other (calculated)	AOPWIN v.191	○		Fh-ITEM (2004a) Calculation of environmental fate data via EPISUITE v3.11 (boiling point via MPBWIN v1.41, melting point via MPBWIN v1.41, partition coefficient via KOWWIN v1.67, vapour pressure via MPBWIN v1.41, water solubility via WSKOW v1.41, BCF via BCFWIN v.2.15, stability in water via HYDROWIN v1.67, photodegradation via AOPWIN v1.91, Henry's Law constant via HENRYWIN v3.10)	3.1.1 PHOTODEGRADATION
SIDS	水中	STABILITY IN WATER				t1/2>1 year								(2) valid with restrictions	Critical study for SIDS endpoint	other (calculated)	HYDROWIN v1.67	○		Fh-ITEM (2004a) Calculation of environmental fate data via EPISUITE v3.11 (boiling point via MPBWIN v1.41, melting point via MPBWIN v1.41, partition coefficient via KOWWIN v1.67, vapour pressure via MPBWIN v1.41, water solubility via WSKOW v1.41, BCF via BCFWIN v.2.15, stability in water via HYDROWIN v1.67, photodegradation via AOPWIN v1.91, Henry's Law constant via HENRYWIN v3.10)	3.1.2 STABILITY IN WATER



参考情報

優先通し番号	121000,174000
優先評価化学物質名称	[ (3-アルカンアミド (C=8, 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型) プロピル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート又は (Z) - [ (3-オクタデカ-9-エンアミド) プロピル] (ジメチル) アンモニオ] アセタート
CASRN	4292-10-8
CA IN	1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]-, inner salt
その他番号	
その他名称	2- [ (3-ドデカンアミドプロパン-1-イル) (ジメチル) アンモニオ] アセタート
SMILES	CCCCCCCCCCC(=O)NCCCN+(CC(=O)O-)(C)C

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是非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
ECHA	Interpretation of results:readily biodegradable	82% 95%	ThOD COD		EU Method C.4-F (Determination of the "Ready" Biodegradability - MITI Test)	no data	2 (reliable with restrictions)	key study	experimental result	28 d		study report / 1996	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.004
SIDS	readily biodegradable	82%	based on the ThOD value of 0.70 mg O2/mg		Directive 92/69/EEC, C.4-F		(1) valid without restriction	Critical study for SIDS endpoint	experimental result	after 28 days			3.5 BIODEGRADATION
	readily biodegradable	95%	based on the COD value of 60 mg/l		Directive 92/69/EEC, C.4-F		(1) valid without restriction	Critical study for SIDS endpoint	experimental result	after 28 days			3.5 BIODEGRADATION
既存点検事業		93%	酸素消費量 (BOD(NH3))		化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result			経済産業公報 2004/11/15	J-CHECK
		97%	直接定量による化学分析法 (TOC)		化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result			経済産業公報 2004/11/15	J-CHECK
		100%	直接定量による化学分析法 (HPLC)		化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result			経済産業公報 2004/11/15	J-CHECK