

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20

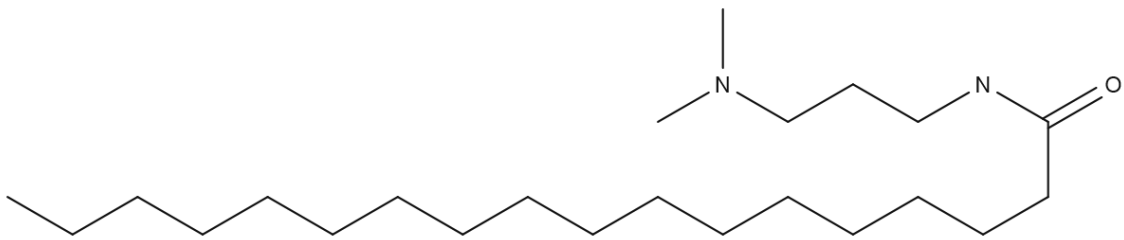
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

N- [3 - (ジメチルアミノ) プロピル] ステアルアミド

優先評価化学物質通し番号 153



平成 31 年 1 月

経済産業省

目 次

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

1 1 評価対象物質の性状

2 モデル推計に用いる物理化学的性状データ、環境中における分解性に係るデータを示す。

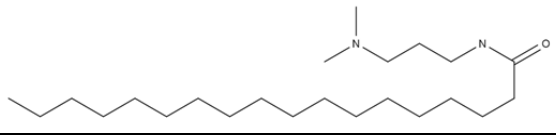
3

4 1-1 評価対象物質の設定

5 評価対象物質は、N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアルアミド(以下、N-DPS
6 という。)である。

7

表 1-1 評価対象物質の構造等

| | |
|--------------|--|
| 評価対象物質構造 |  |
| 評価対象物質名称 | N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアルアミド |
| 分子式 | C ₂₃ H ₄₈ N ₂ O |
| 優先評価化学物質通し番号 | 153 |
| CAS 登録番号 | 7651-02-7 |

8

9

10
11
12
13
14
15
16

1-2 物理化学的性状及び濃縮性

下表にモデル推計に採用した物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。

なお、採用値における下線は、評価Ⅱにおいて精査した結果、評価Ⅰから変更した値であることを示している。

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 | — | 368.6 | — | 368.6 |
| 融点 | °C | 67.4 ¹⁾ | 測定値 | 67.4 ¹⁾ |
| 沸点 | °C | <u>206.3</u> ¹⁾ | 測定値 | 476.74 ²⁾ |
| 蒸気圧 | Pa | <u>3.4 × 10⁻⁸</u> ¹⁾ | 20°Cにおける測定値 | 3.4 × 10 ⁻⁸ ¹⁾ |
| 水に対する溶解度 | mg/L | 10 ¹⁾ | 20°Cにおける測定値 (臨界ミセル濃度 205 mg/L ¹⁾) | 10 ¹⁾ |
| 1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow) | — | <u>2.01</u> ¹⁾ (7.35 ³⁾) | 推計値 | 7.35 ²⁾ |
| ヘンリー係数 | Pa・m ³ /mol | <u>1.25 × 10⁻⁶</u> ³⁾ | Henry 推計式による値 | 1.4 × 10 ⁻⁴ ²⁾ |
| 有機炭素補正 土壌吸着係数(Koc) | L/kg | <u>1.52 × 10⁵</u> ¹⁾ | Quaternary ammonium compounds, C20-22-alkyltrimethyl, chlorides (C-22 ATQ)での測定値の Read across による当該物質適用値 | 7.93 × 10 ⁴ ²⁾ |
| 生物濃縮係数(BCF) | L/kg | <u>9.85</u> ²⁾ | BCFBFAF(v3.01)による推計値 | 2,271 ²⁾ |
| 生物蓄積係数(BMF) | — | <u>1</u> | logPow と BCF から設定 ³⁾ | 10 |
| 解離定数(pKa) | — | <u>8.65、14.8</u> _{1),4),5)} | 複数の推計値の算術平均値 | — ⁶⁾ |

17 ※平成 30 年度第 1 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー
18 会議（平成 30 年 6 月 22 日）で了承された値

19 1) ECHA 22 4) SPARC (2013)
20 2) EPI Suite (2012) 23 5) ACD (2015)
21 3) MHLW, METI, MOE (2014) 24 6) 評価Ⅰ段階では解離定数を考慮しない

25

26 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

27 ① 融点

28 評価Ⅰの採用値 67.4 °C は、ECHA の OECD TG 102 準拠の測定値である。また、その他の信
29 頼性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

30 そのため、評価Ⅱにおいても、同じ値 67.4 °C を用いる。

31

32 ② 沸点

33 評価Ⅰの採用値 476.74 °C は、EPI Suite の MPBPWIN(v1.43)による推計値である。また、そ
34 の他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られていないが、ECHA では Key Study として
35 OECD TG 103 準拠の測定値 206.3 °C が採用されている。

36 そのため、評価Ⅱにおいては、ECHA の値 206.3 °C を用いる。

37

38 ③ 蒸気圧

39 評価Ⅰの採用値 3.4×10⁻⁸ Pa は、ECHA の 20°Cにおける OECD TG 104 準拠の測定値である。

40 また、その他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

41 そのため、評価Ⅱにおいても、同じ値 3.4×10^{-8} Pa を用いる。

42

43 ④ 水に対する溶解度

44 評価Ⅰの採用値 10 mg/L は、ECHA の 20°C における OECD TG 105 準拠の測定値である。ま
45 た、その他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

46 そのため、評価Ⅱにおいても、同じ値 10 mg/L を用いる。

47 なお、ECHA では ISO 4311 準拠の 25 °C における臨界ミセル濃度が参考情報として記載され
48 ており、20°C に補正した値は 205 mg/L である。

49

50 ⑤ logPow

51 評価Ⅰの採用値 7.35 は、EPI Suite の KOWWIN (v1.68) による推計値である。その他の信頼性
52 の定まった情報源から測定値は得られていないが、ECHA では Key Study として EU method A.8
53 準拠で飽和溶解度の実測値の比率から算出した推計値 2.00(pH=4)、2.01(pH=7)、2.57(pH=9)の
54 記載があった。

55 そのため、評価Ⅱにおいては、ECHA の pH=7 の推計値 2.01 を用いる。ただし、N-DPS は界
56 面活性作用を有する物質であり、logPow を正しく推計できていない可能性があるため、EPI Suite
57 の推計値 7.35 も参考値として併記することとする。

58

59 ⑥ ヘンリー係数

60 評価Ⅰの採用値 1.4×10^{-4} Pa·m³/mol は、EPI Suite の HENRYWIN (v3.20) による 20°C にお
61 ける推計値(Bond Estimation Method)である。また、他の信頼性の定まった情報源から測定値は
62 得られなかった。

63 なお、水溶解度が 1mol/L 未満のため技術ガイダンスに従い Henry 推計式を用いて 20°C にお
64 ける蒸気圧と水に対する溶解度から算出すると、 1.25×10^{-6} Pa·m³/mol が得られた。

65 そのため、評価Ⅱにおいては、Henry 推計式の値 1.25×10^{-6} Pa·m³/mol を用いる。

66

67 ⑦ Koc

68 評価Ⅰの採用値 7.93×10^4 L/kg は、EPI Suite の KOCWIN (v2.00) による推計値(Log Kow
69 Estimation Method)である。また、その他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られていな
70 いが、ECHA では OECD TG 106 に準拠した Quaternary ammonium compounds,
71 C20-22-alkyltrimethyl, chlorides (C-22 ATQ)での測定値を Read across により当該物質に適用し
72 た旨の記載があった。

73

74

表 1-3 ECHA の Koc 試験データ

| 土壌 | pH | 有機炭素含有率[%] | Koc [L/kg] | 測定温度 [°C] |
|--------------------|-----|------------|--------------------|-----------|
| Cranfield 164 soil | 6.0 | 3.7 | 19.8×10^3 | 20±2 |
| Cranfield 277 soil | 7.4 | 2.7 | 516×10^3 | 20±2 |
| Cranfield 299 soil | 7.6 | 2.9 | 52.8×10^3 | 20±2 |
| SW sediment | 7.6 | 6.2 | 17.4×10^3 | 20±2 |
| Tilburg sludge | 6.6 | 37.5 | 0.95×10^3 | 20±2 |

75

76 また、後述する pKa の値から環境水中においては 4 級アンモニウムイオンとして存在し、
77 C22-ATQ も同様に環境水中では 4 級アンモニウムイオンとして存在しているものと考えられる。

78 この存在形態に加え、評価Ⅱにおいては、*N*-DPS が界面活性作用を有し推計が難しい物質であ
 79 ることから、当該物質の推計値ではなく、ECHA において物理化学的性状・構造情報・生態毒性
 80 等の類似性より Read across を行った試験データ由来の値を採用する。ここでは、表 1-3 の Koc
 81 のうち、活性汚泥を除いた 4 つの土壌の平均値 1.52×10^5 L/kg を用いる。

82

83 ⑧BCF

84 評価Ⅰの採用値 2,271 L/kg は、EPI Suite の BCFBAF(v3.01) による推定値(Log Kow
 85 Estimation Method)である。また、その他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られていな
 86 い。

87 そのため、評価Ⅱにおいては、logPow の採用値 2.01 を用いた BCFBAF(v3.01) による推計値
 88 9.85 L/kg を用いる。

89

90 ⑨BMF

91 評価Ⅰの採用値 10 は、logPow と BCF から技術ガイダンスに従って設定された値である。ま
 92 た、他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られなかった。

93 そのため、評価Ⅱにおいても、logPow と BCF から技術ガイダンスに従って設定される値 1 を
 94 用いる。

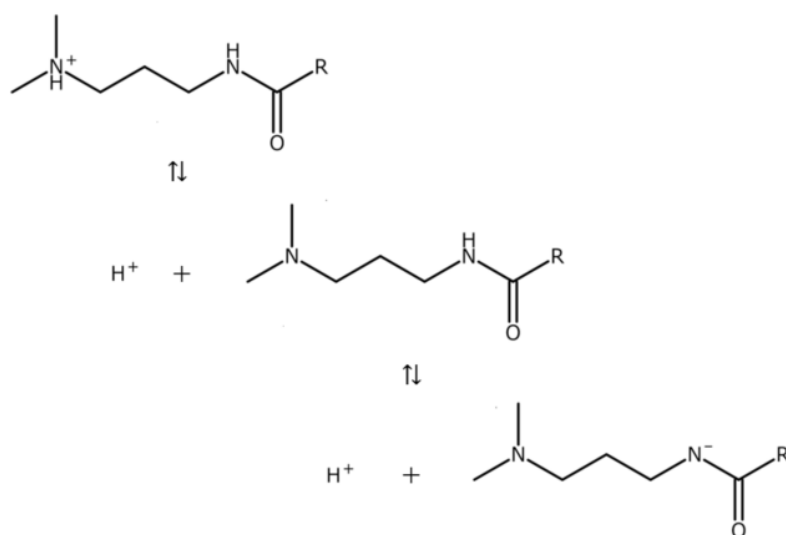
95

96 ⑩解離定数¹

97 評価Ⅰにおいては解離を考慮していないため採用値は設定されていない。また、信頼性の定ま
 98 った情報源から測定値は得られていないが、その他の情報源において推計値(pKa)として、ECHA
 99 では 9.45 ± 0.28 が、SPARC では 6.43、13.40 が、ACD/Percepta では 9.5 ± 0.3 、 16.3 ± 0.5 (Classic
 100 Module)及び 9.2 ± 0.4 、 14.8 ± 0.4 (GLASS Module)が得られている。

101 また、ACD/Percepta によると本物質は pH=5~8 において主に 4 級アンモニウムイオンとして
 102 存在し、その存在比率は、pH=5 で 100%、pH=6 で 100%、pH=7 で 99%、pH=8 で 94%である。

103 そのため、評価Ⅱにおいては、これらの推計値(pKa)の算術平均値 8.65、14.8 を用いる。



104

105

106

図 1-1 解離に係る構造式(長鎖は R として省略)

¹ 解離定数に係る各推計ツールの詳細については技術ガイダンス I 章(p111~)の記載を参照

107 1-3 分解性

108 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

109
110

表 1-4 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 | 0.14 ¹⁾ |
| | | 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 ^{2) 3)} |
| | | 加水分解 | NA |
| | | 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 | 29.5 ²⁾ |
| | | 加水分解 | NA |
| 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 ³⁾ |
| | | 加水分解 | NA |

111 ※平成 30 年度第 1 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー
112 会議（平成 30 年 6 月 22 日）で了承された値

113 1) EPI Suite (2012)

3) MHLW, METI, MOE (2014)

114 2) ECHA

NA:情報が得られなかったことを示す

115

116 上記分解項目について、精査概要を以下に示す。なお、「総括分解半減期」とは、分解の機序を
117 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。

118

119 ①大気

120 大気中での総括分解半減期に係る情報は得られなかったが、OH ラジカルに係る機序別の情報
121 が得られた。

122 ①-1: OH ラジカルとの反応の半減期

123 信頼性における情報源において測定値は得られなかったが、EPI Suite の AOPWIN(v.1.92)に
124 より反応速度定数の推計値 $1.16 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 / \text{molecule/s}$ が得られている。大気中 OH ラジカル濃
125 度を技術ガイダンス(MHLW, METI, MOE (2014))より $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$ とした場合、半減期
126 は 0.14 日と算出される。

127 評価Ⅱではこの値 0.14 日を用いる。

128

129 ②水中

130 水中での総括分解半減期に係る情報は得られなかったが、生分解に係る機序別の情報が得られ
131 た。

132 ②-1: 生分解の半減期

133 信頼性における情報源において測定値は得られなかったが、EPI Suite の BIOWIN(v4.10)では
134 Weeks-Months との結果が得られている。また、その他の情報源においては、ECHA に分解性試

135 験データ OECD TG-301B の結果として分解度 88%の記載があり、技術ガイダンスに従うと半減
136 期は 5 日と設定される。

137 評価Ⅱでは、この値 5 日を用いる。

138 ②-2：加水分解の半減期

139 一般的にアミドは環境中において非常にゆっくりと加水分解されることが知られているが、水中
140 での加水分解半減期に係る N-DPS の情報は得られなかった。

141 ③土壌

142 土壌での総括分解半減期に係る情報は得られなかったが、生分解に係る機序別の情報が得られ
143 た。

144 ③-1：生分解の半減期

145 信頼性における情報源において測定値は得られなかったが、その他の情報源においては、ECHA
146 に OECD TG-307 の結果として 23.2 日(Silt loam)、24 日(Clay)、41.4 日(Loam)が掲載されて
147 いる。

148 評価Ⅱでは、これらの算術平均値 29.5 日を用いる。

149

150 ④底質

151 底質での総括分解半減期及び機序別の半減期に係る情報は得られなかった。

152 ④-1：生分解の半減期

153 底質での生分解半減期に係る情報は得られなかったため、評価Ⅱでは、技術ガイダンスに従っ
154 て、水中の生分解半減期の 4 倍である 20 日を用いる。

155

156 2 【付属資料】

157 2-1 物理化学的性状等一覧

158 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

159

160 出典)

161 ・ACD(2015):ACD/Labs Percepta Ver.14.2.0

162 ・ECHA: Information on Chemicals - Registered substances.

163 <https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances> (2018.05 調査).

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

165 ・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
166 ダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

167 ・SPARC(2013): ARChem's physicochemical calculator

168 <http://www.archemcalc.com/sparc.html>

169

170 2-2 その他

171 特になし。

172

| 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 |
| SPARC | SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry |

基本情報

| | |
|------------|--|
| 優先通し番号 | 153 |
| 優先評価化学物質名称 | N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアルアミド |
| CASRN | 7651-02-7 |
| CA_IN | Octadecanamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]- |
| その他番号 | |
| その他名称 | N-[3-(N, N-ジメチルアミノ)プロパン-1-イル]ステアルアミド |
| SMILES | CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(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 | 196.17 °C | 196.17 | MPBPWIN | | | | (Q)SAR | Weighted Value | 2C | × | × | | | |
| 2 ECHA | 融点 | 67.4±0.3 °C | 67.4 | OECD TG 102 | no | 1: reliable without restriction | key study | experimental result | | 1B | ○ | ○ | | study report, 2012, 2012-04-02 | Exp Key Melting point/freezing point.001 |

基本情報

| | |
|------------|--|
| 優先通し番号 | 153 |
| 優先評価化学物質名称 | N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアルアミド |
| CASRN | 7651-02-7 |
| CA_IN | Octadecanamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]- |
| その他番号 | |
| その他名称 | N-[3-(N, N-ジメチルアミノ)プロパン-1-ール]ステアルアミド |
| SMILES | CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(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 | 476.74 °C | 476.74 | | | MPBPWIN | | | | (Q)SAR | Adapted Stein and Brown Method | 2C | ○ | × | | | |
| 2 ECHA | 412.3~0.3 °C | 206.3 | | | OECD TG 103 | no | 1: reliable without restriction | key study | experimental result | | 4A | × | ○ | | study report, 2012, 2012-04-02 | Exp Key Boiling point.001 |

基本情報

| | |
|------------|--|
| 優先通し番号 | 153 |
| 優先評価化学物質名称 | N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアルアミド |
| CASRN | 7651-02-7 |
| CA_IN | Octadecanamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]- |
| その他番号 | |
| その他名称 | N-[3-(N,N-ジメチルアミノ)プロパン-1-イル]ステアルアミド |
| SMILES | CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(C)C |

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 EPI Suite | 0.0000000 0067 mmHg | 8.93E-08 | 8.93E-08 | 20 °C | MPBPWIN | - | - | key study | (Q)SAR | MPBPWIN v1.43 September 2008 | 2C | × | × | | | - |
| 2 ECHA | 0.0000000 34 Pa | 3.4E-08 | 3.4E-08 | 20 °C | OECD TG 104 | no | 1: reliable without restriction | key study | experimental result | | 1B | ○ | ○ | | study report, 2012, 2012-05-30 | Exp Key Vapour pressure.001 |

基本情報

| | |
|------------|--|
| 優先通し番号 | 153 |
| 優先評価化学物質名称 | N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアルアミド |
| CASRN | 7651-02-7 |
| CA_IN | Octadecanamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]- |
| その他番号 | |
| その他名称 | N-[3-(N,N-ジメチルアミノ)プロパン-1-イル]ステアルアミド |
| SMILES | CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(C)C |

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 |
|-------------|---|-------------|---------------------|---------|-----|---------------|---------|---------------------------------|--------------------|---------------------|--------------------------------|---------------|------------------|-------------------|----|--------------------------------|------------------------------|
| 1 EPI Suite | 0.002525 mg/L | 0.002525 | 2.36E-03 | 25 °C | | WSKOWWIN | - | - | key study | (Q)SAR | WSKOWWIN v1.41a September 2008 | 2C | x | x | | | - |
| 2 ECHA | 10 mg/L | 10 | 10 | 20 °C | | OECD TG 105 | no data | 1: reliable without restriction | weight of evidence | experimental result | | 1B | x | x | | study report, 2012 | Exp WoE Water solubility.002 |
| 3 | 220 mg/L [critical micelle concentration] | 220 | 205.371416 | 25 °C | | その他, ISO 4311 | no data | 1: reliable without restriction | weight of evidence | experimental result | | 4A | x | x | | study report, 2012 | Exp WoE Water solubility.001 |
| 4 | 10 mg/L | 10 | 10 | 20 °C | 6.8 | OECD TG 105 | no data | 1: reliable without restriction | weight of evidence | experimental result | | 1B | ○ | ○ | | study report, 2012, 2012-11-15 | Exp WoE Water solubility.002 |

基本情報

| | |
|------------|--|
| 優先通し番号 | 153 |
| 優先評価化学物質名称 | N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアルアミド |
| CASRN | 7651-02-7 |
| CA_IN | Octadecanamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]- |
| その他番号 | |
| その他名称 | N-[3-(N,N-ジメチルアミノ)プロパン-1-イル]ステアルアミド |
| SMILES | CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(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 | 7.3497 | 7.35 | | | KOWWIN | | | | (Q)SAR | | 2C | ○ | ○ | | | |
| 2 ECHA | 2.57[weighted log Kow] | 2.57 | 20 °C | 9 | EU Method A.8 | no | 2: reliable with restrictions | key study | estimated by calculation | | 4C | × | × | | study report, 2012, 2012-12-04 study report, 2012, 2012-11-15 study report, 2012, 2012-11-15 study report, 2012, 2012-11-15 | Calc Key Partition coefficient.001 |
| 3 | 2.01[weighted log Kow] | 2.01 | 20 °C | 7 | EU Method A.8 | no | 2: reliable with restrictions | key study | estimated by calculation | | 4C | × | ○ | | study report, 2012, 2012-12-04 study report, 2012, 2012-11-15 study report, 2012, 2012-11-15 study report, 2012, 2012-11-15 | Calc Key Partition coefficient.001 |
| 4 | 2[weighted log Kow] | 2 | 20 °C | 4 | EU Method A.8 | no | 2: reliable with restrictions | key study | estimated by calculation | | 4C | × | × | | study report, 2012, 2012-12-04 study report, 2012, 2012-11-15 study report, 2012, 2012-11-15 study report, 2012, 2012-11-15 | Calc Key Partition coefficient.001 |

基本情報

| | |
|------------|--|
| 優先通し番号 | 153 |
| 優先評価化学物質名称 | N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアルアミド |
| CASRN | 7651-02-7 |
| CA_IN | Octadecanamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]- |
| その他番号 | |
| その他名称 | N-[3-(N, N-ジメチルアミノ)プロパン-1-イル]ステアルアミド |
| SMILES | CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(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 ³ /mol] | 測定条件 温度 | pH | reliability | 情報源における キースタディ の該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ ンク (評価Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ) | キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|-------------|--------------------------------------|----------------------------------|------------|----|-------------|--------------------------|--------|---------------------------|---------------------|------------------------|------------------------|--|----|--------|
| 1 EPI Suite | 2.02E-004 Pa・ m ³ /mol | 2.02.E-04 | 25 °C | | | | (Q)SAR | Bond Estimation Method | 2C | × | × | | | |
| 2 EPI Suite | 0.000139 Pa・ m ³ /mol | 1.39.E-04 | 20 °C | | | | (Q)SAR | Bond Estimation Method | 2C | ○ | × | | | |
| 3 Henry計算式 | | 1.25E-06 | | | | | EST | H=VP/(WS/MW) | | | ○ | VP(0.000000034)、WS(10)、 MW(368.6)を用いて計算 | | |

基本情報

| | |
|------------|--|
| 優先通し番号 | 153 |
| 優先評価化学物質名称 | N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアルアミド |
| CASRN | 7651-02-7 |
| CA_IN | Octadecanamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]- |
| その他番号 | |
| その他名称 | N-[3-(N,N-ジメチルアミノ)プロパン-1-イル]ステアルアミド |
| SMILES | CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(C)C |

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 |
|------|-----------|-----|---------------------------------------|------------|------------------------------------|------|----------------|----------------------------|---------------------------------------|--------------------------|---|---------------------------------|---------------------|------------------------|------------------------|--------------------------------|---|--------|
| 1 | EPI Suite | Koc | 79340 L/kg | 7.93E+04 | | | KOCWIN | | | | (Q)SAR | Log Kow Estimation Method | 4C | ○ | x | logP=7.35による推計 | | |
| 2 | ECHA | Koc | 19.8E3 L/kg | 1.98E+04 | 20±2 ° C[Cranfield 164 soil] | 6 | OECD TG 106 | yes (incl. certificate) | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | 4C | x | ○ | | study report, 2009, 2009-03-19 | Read across Subs Key Adsorption / desorption.001 | |
| 3 | | Koc | 516E3 L/kg[Cranfield 277 soil] | 5.16E+05 | 20±2 °C | 7.4 | OECD TG 106 | yes (incl. certificate) | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | 4C | x | ○ | | study report, 2009, 2009-03-19 | Read across Subs Key Adsorption / desorption.001 | |
| 4 | | Koc | 52.8E3 L/kg[Cranfield 299 soil] | 5.28E+04 | 20±2 °C | 7.6 | OECD TG 106 | yes (incl. certificate) | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | 4C | x | ○ | | study report, 2009, 2009-03-19 | Read across Subs Key Adsorption / desorption.001 | |
| 5 | | Koc | 17.4E3 L/kg[SW sediment] | 1.74E+04 | 20±2 °C | 7.6 | OECD TG 106 | yes (incl. certificate) | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | 4C | x | ○ | | study report, 2009, 2009-03-19 | Read across Subs Key Adsorption / desorption.001 | |
| 6 | | Koc | 950 L/kg[Tilburg sludge] | 9.50E+02 | 20±2 °C | 6.6 | OECD TG 106 | yes (incl. certificate) | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | 4C | x | x | | study report, 2009, 2009-03-19 | Read across Subs Key Adsorption / desorption.001 | |

基本情報

| | |
|------------|--|
| 優先通し番号 | 153 |
| 優先評価化学物質名称 | N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアラミド |
| CASRN | 7651-02-7 |
| CA_IN | Octadecanamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]- |
| 他の番号 | |
| 他の名称 | N-[3-(N,N-ジメチルアミノ)プロパン-1-イル]ステアラミド |
| SMILES | CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(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 | | 1 | | BCF | | 9.85 L/kg (wet) | 9.85 | BCFBAF | | | | (Q)SAR | BCFBAF | 4C | | ○ | logP=2.01での推計 | | |
| 2 | | | 1 | | BCF | | 2.270 L/kg (wet) | 2.270 | BCFBAF | | | | (Q)SAR | BCFBAF | 4C | | x | logP=7.35での推計 | | |

基本情報

| | |
|------------|--|
| 優先通し番号 | 153 |
| 優先評価化学物質名称 | N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアルアミド |
| CASRN | 7651-02-7 |
| CA_IN | Octadecanamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]- |
| その他番号 | |
| その他名称 | N-[3-(N,N-ジメチルアミノ)プロパン-1-イル]ステアルアミド |
| SMILES | CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(C)C |

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 ACD | pKa | 9.5±0.3 | 9.5 | | | ACD/Percepta | | | | (Q)SAR | classic | ○ | | | |
| 2 | pKa | 16.3±0.5 | 16.3 | | | ACD/Percepta | | | | (Q)SAR | classic | ○ | | | |
| 3 | pKa | 9.2±0.4 | 9.2 | | | ACD/Percepta | | | | (Q)SAR | GALAS | ○ | | | |
| 4 | pKa | 14.8±0.4 | 14.8 | | | ACD/Percepta | | | | (Q)SAR | GALAS | ○ | | | |
| 5 ECHA | pKa | 9.45±0.28 | 9.45 | 25 °C | | | no | 2: reliable with restrictions | key study | estimated by calculation | | ○ | | other company data, 2012, 2013-03-28 | Calc Key Dissociation constant.001 |
| 6 SPARC | pKa | 6.43 | 6.43 | 20 °C | | SPARC | | | | (Q)SAR | SPARC | ○ | | | |
| 7 | pKa | 13.4 | 13.4 | 20 °C | | SPARC | | | | (Q)SAR | SPARC | ○ | | | |

基本情報

| | |
|------------|--|
| 優先通し番号 | 153 |
| 優先評価化学物質名称 | N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアラミド |
| CASRN | 7851-02-7 |
| CA IN | Octadecanamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]- |
| その他番号 | |
| その他名称 | N-[3-(N,N-ジメチルアミノ)プロピル-1-イル]ステアラミド |
| SMILES | CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(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 ケーススタディの 読表 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | ケーススタディー 旗手 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|-------------|----|--------------|--------|---|--------|---|---|------------------|---|---------|--------------------------------|------------------|----------------------------|---------------------------------------|---------------------------|---|------------------------------------|-------------------------|--------------------------------|--|--------|
| 1 EPI Suite | 大気 | OHラジカルとの反応 | | 115.8646E-12 cm ³ /molec ule/sec | | | | 0.14 | 25 °C | | AOPWIN | | | | | (Q)SAR | | ○ | | | |
| 2 EPI Suite | 水域 | 生分解 | | | | | | | | | BIOWIN | Weeks- Months | | | | (Q)SAR | Biowin3 Ultimate Biodegradation | x | | | |
| 3 ECHA | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | 91 % [(C22 fraction) primary biodegradation]5 2 d[median of all | | 20~25 °C | 7.5±0.5 | その他,OECD Guideline 303 A | | yes | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | x | | study report, 2010, 2010-07-18 | Read across Subs Key Biodegradation in water and sediment: simulation tests.001 | |
| 4 ECHA | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | 96 % [(C20 fraction) primary biodegradation]5 2 d[median of all | | 20~25 °C | 7.5±0.5 | その他,OECD Guideline 303 A | | yes | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | x | | study report, 2010, 2010-07-18 | Read across Subs Key Biodegradation in water and sediment: simulation tests.001 | |
| 5 ECHA | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | 92.2 % [weighted average based on content of the constituents C20 | | 20~25 °C | 7.5±0.5 | その他,OECD Guideline 303 A | | yes | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | x | | study report, 2010, 2010-07-18 | Read across Subs Key Biodegradation in water and sediment: simulation tests.001 | |
| 6 ECHA | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | 60 % [CO2 evolution]16 d] | | 22±2 °C [Test temperature: 22 +/- 2°C (20.0 - 23.0 °C, for 4 h down to 19.5 °C] | | OECD TG 301B | | yes | 1: reliable without restriction | key study | experimental result | x | | study report, 1995, 1995-01-05 | Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001 | |
| 7 ECHA | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | 88 % [CO2 evolution]28 d] | 5 | 22±2 °C [Test temperature: 22 +/- 2°C (20.0 - 23.0 °C, for 4 h down to 19.5 °C] | | OECD TG 301B | | yes | 1: reliable without restriction | key study | experimental result | ○ | | study report, 1995, 1995-01-05 | Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001 | |
| 8 ECHA | 土壌 | 生分解 (好氣的) | | | | 41.4 日 [DT50 (d) at 20 ° C]Loam] | | | 20 °C | | その他,OECD Guideline 307 | | yes (incl. certificate) | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | ○ | | study report, 2011, 2011-12-06 | Read across Subs Key Biodegradation in soil.001 | |
| 9 ECHA | 土壌 | 生分解 (好氣的) | | | | 24 日 [DT50 (d) at 20 ° C]Clay] | | | 20 °C | | その他,OECD Guideline 307 | | yes (incl. certificate) | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | ○ | | study report, 2011, 2011-12-06 | Read across Subs Key Biodegradation in soil.001 | |
| 10 ECHA | 土壌 | 生分解 (好氣的) | | | | 23.2 日 [DT50 (d) at 20 ° C]Silt loam] | | | 20 °C | | その他,OECD Guideline 307 | | yes (incl. certificate) | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | ○ | | study report, 2011, 2011-12-06 | Read across Subs Key Biodegradation in soil.001 | |
| 11 ECHA | 土壌 | 生分解 (好氣的) | | | | 24 日 [DT50 (20 deg C), median of three soils]Silt loam] | | | 20 °C | | その他,OECD Guideline 307 | | yes (incl. certificate) | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | x | | study report, 2011, 2011-12-06 | Read across Subs Key Biodegradation in soil.001 | |
| 12 ECHA | 土壌 | 生分解 (好氣的) | | | | 45.5 日 [DT50 (12 deg C), median of three soils]Silt loam] | | | 12 °C | | その他,OECD Guideline 307 | | yes (incl. certificate) | 1: reliable without restriction | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | x | | study report, 2011, 2011-12-06 | Read across Subs Key Biodegradation in soil.001 | |

参考情報

| | |
|------------|--|
| 優先通し番号 | 153 |
| 優先評価化学物質名称 | N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]ステアルアミド |
| CASRN | 7651-02-7 |
| CA_IN | Octadecanamide, N-[3-(dimethylamino)propyl]- |
| その他番号 | |
| その他名称 | N-[3-(N,N-ジメチルアミノ)プロパン-1-イル]ステアルアミド |
| SMILES | CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(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 | 情報源におけるケーススタディの該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|------|-----|-----|------|-------|-------|-----|-------------|-------------------|------|---------|----|----|--------|
|------|-----|-----|------|-------|-------|-----|-------------|-------------------|------|---------|----|----|--------|

なし