

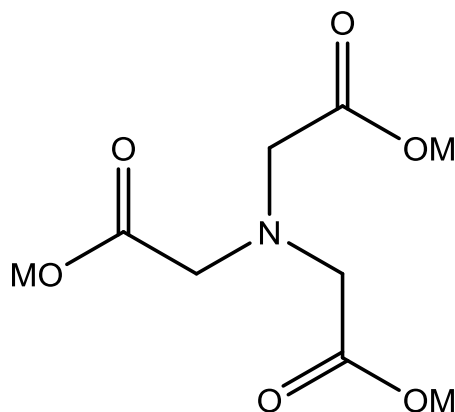
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

2, 2', 2''-トリクロ酢酸 のナトリウム塩

優先評価化学物質通し番号 152



M=H, Na（少なくとも1つはNa）

平成 29 年 6 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 融点	2
② 沸点	2
③ 蒸気圧	2
④ 水に対する溶解度	3
⑤ logPow	3
⑥ ヘンリー係数	3
⑦ Koc	3
⑧ BCF	3
⑨ BMF	4
⑩ 解離定数	4
1-3 分解性	5
① 大気	5
② 水中	6
③ 土壌	6
④ 底質	6
2 【付属資料】	8
2-1 物理化学的性状等一覧	8
2-2 出典	8

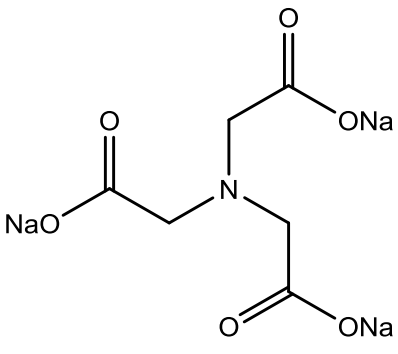
1 評価対象物質の性状

本章では、5 章のモデル推計に用いる物理化学的性状データ、環境中における分解性に係るデータを示す。

1-1 評価対象物質の設定

優先評価化学物質である 2, 2', 2''-ニトリロ三酢酸のナトリウム塩は、ナトリウムの置換数によって異なるものが存在する。

実際の事業者からの化審法届出情報(H26 年度)の照会の結果、3 置換体(CAS 登録番号：5064-31-3)が大半を占めることがわかっており、評価Ⅱにおいてはトリナトリウム＝2, 2', 2''-ニトリロトリアセタート(以下、Na₃NTA と呼ぶ。)を評価対象物質とする。

	
評価対象物質名称	トリナトリウム＝2, 2', 2''-ニトリロトリアセタート
分子式	C ₆ H ₆ NNa ₃ O ₆
優先評価化学物質通し番号	152
CAS 登録番号	5064-31-3

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、本物質は評価Ⅰ実施時とは置換数が異なるため、表中の参考値は信頼性基準に基づいて設定した場合の評価Ⅰ相当の参考値である。また、採用値における下線は、評価Ⅱにおいて精査した結果、参考値から変更した値であることを示している。

表 1-1 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ (Na₃NTA)

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰ相当の参考値
分子量	—	260.112	—	260.112
融点	°C	410 ¹⁾	測定値	410 ¹⁾
沸点	°C	4.88 × 10 ^{2 2)}	MPBPWIN (v1.43) による推計値	4.88 × 10 ^{2 2)}
蒸気圧	Pa	8.07 × 10 ^{-11 2)}	MPBPWIN (v1.43) による推計値	8.07 × 10 ^{-11 2)}
水に対する溶解度	mg/L	6.40 × 10 ^{5 1)}	測定値	6.40 × 10 ^{5 1)}
1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)	—	<u>-2.62</u> ¹⁾	推計値	-10.1 ²⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	8.94 × 10 ^{-12 2)}	HENRYWIN (v3.20) による推計値	8.94 × 10 ^{-12 2)}
有機炭素補正 土壌吸着係数 (Koc)	L/kg	<u>26.3</u> ²⁾	KOCWIN (v2.00) による推計値	3.27 × 10 ^{-6 2)}
生物濃縮係数 (BCF)	L/kg	3 ¹⁾	測定値	3.162 ²⁾
生物蓄積係数 (BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ³⁾	1
解離定数 (pKa)	—	<u>1.4、2.2、 3.0、9.8</u> ⁴⁾⁵⁾	複数の推計値の算術平均値	— ⁶⁾

1) EU RAR (2005)

2) EPI Suite (2012)

3) MHLW, METI, MOE (2014)

4) SPARC (2013)

5) ACD (2015)

6) 評価Ⅰ段階では解離定数を考慮しない

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

① 融点

参考値 410°C は、EU RAR の測定値である。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なかった。

そのため、評価Ⅱにおいても、参考値と同じ値 410°C を用いる。

② 沸点

参考値 4.88 × 10² °C は、EPI Suite の MPBPWIN (v1.43) による推計値である。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なかった。

そのため、評価Ⅱにおいても、参考値と同じ値 4.88 × 10² °C を用いる。

③ 蒸気圧

参考値 8.07 × 10⁻¹¹ Pa は、EPI Suite の MPBPWIN (v1.43) による推計値である。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なかった。

そのため、評価Ⅱにおいても、参考値と同じ値 8.07 × 10⁻¹¹ Pa を用いる。

④ 水に対する溶解度

参考値 6.40×10^5 mg/L は、EU RAR の 20℃における測定値である。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なかった。

そのため、評価Ⅱにおいても、参考値と同じ値 6.40×10^5 mg/L を用いる。

⑤ logPow

参考値-10.1 は、EPI Suite の KOWWIN (v1.68)による推計値である。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いが、EU RAR では Key Study として推計値-2.62 が採用されており、同様の値が複数の情報源において記載されている。

そのため、評価Ⅱにおいては、生態影響に係る暴露推計においてより安全側となる EU RAR の推計値-2.62 を用いる。

⑥ ヘンリー係数

参考値 8.94×10^{-12} Pa·m³/mol は、EPI Suite の HENRYWIN (v3.20) による推計値(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得られなかった。

そのため、評価Ⅱにおいても、参考値と同じ値 8.94×10^{-12} Pa·m³/mol を用いる。

⑦ Koc

参考値 3.27×10^{-6} L/kg は、EPI Suite の KOCWIN (v2.00) による推計値(Log Kow 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いが、KOCWIN については別の推計値(MCI Estimation Method)として 26.3 L/kg も得られている。土壌への吸着が高いイオン性の物質については、イオン性による logP 値低下による影響が抑えられ、また、こちらの方が若干ではあるが推計精度が高いとされている。

そのため、評価Ⅱにおいては、KOCWIN による推計値(MCI Estimation Method)26.3 L/kg を用いる。

⑧ BCF

参考値 3.162 L/kg は、EPI Suite の BCFBAF(v3.01) による推定値(Log Kow Estimation Method)である。その他の信頼性の定まった情報源においては EU RAR からゼブラフィッシュの測定値 1~3 L/kg が得られており、Key Study として 3 L/kg が採用されている。また、その他の情報源においては、ECHA にも同様の値が掲載されている。

そのため、評価Ⅱにおいては、EU RAR の測定値 3 L/kg を用いる。

⑨ BMF

参考値 1 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。

そのため、評価Ⅱにおいても、参考値と同じ値 1 を用いる。

⑩ 解離定数

評価Ⅰにおいては解離を考慮しないため、参考値は設定されていない。また、信頼性の定まった情報源から測定値は得られていない。Na₃NTA は NTA の 3 置換体であるため多段階解離し、その他の情報源において SPARC では推計値 1.38、2.18、2.98、9.85 が、ACD/Percepta では同様の推計値 1.5±0.1、2.3±0.1、3.0±0.1、10.3±0.1(Classic Module)及び 1.2±0.4、2.2±0.4、3.1±0.5、9.1±0.5(GALAS Module)が得られている

そのため、評価Ⅱにおいては、これらの推計値の算術平均値 1.4、2.2、3.0、9.8 を用いる。

また、上記の pK_a 値より、本物質は pH5～9 の実環境中では主に NH⁺(COO⁻)₃として存在し、その存在比率は、pH=5 で 99%、pH=6 で 100%、pH=7 で 100%、pH=8 で 99%、pH=9 で 88%である(SPARC)。

1-3 分解性

下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

表 1-2 分解に係るデータのまとめ (Na₃NTA)

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	0.22 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⁾
		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	9 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 ²⁾
		加水分解	NA

1) EPI Suite (2012)

2) EU RAR (2015)

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、「総括分解半減期」とは、分解の機序を区別しない環境媒体ごとのトータルの半減期のことを示す。

① 大気

大気中での総括分解半減期に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が得られた。

①-1: OH ラジカルとの反応の半減期

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)により反応速度定数の推計値 $7.41 \times 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ が得られている。大気中 OH ラジカル濃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、半減期は 0.22 日と算出される。

評価Ⅱではこの値 0.22 日を用いる。

①-2: オゾンとの反応の半減期

大気中でのオゾンとの反応の半減期に係る情報は得られなかった

①-3：硝酸ラジカルとの反応の半減期

大気中での硝酸ラジカルとの反応の半減期に係る情報は得られなかった

② 水中

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た。

②-1：生分解の半減期

信頼性における情報源において EU RAR、HSDB で様々な測定値が得られており、EU RAR では、数時間から数日の半減期が得られているが温度影響も大きいとため暴露評価に用いる半減期として 5 日が採用されている。また、その他の情報源においては、ECHA に同様の値が掲載されている。

評価Ⅱでは、この値 5 日を用いる。

②-2：加水分解の半減期

水中での加水分解半減期に係る情報は得られなかった。

②-3：光分解の半減期

水中での光分解半減期に係る情報は得られなかった。

なお、EU RAR においては、生分解が主機序のため暴露評価においては光分解を考慮する必要はないとしている。

③ 土壌

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た。

③-1：生分解の半減期

信頼性における情報源において EU RAR では様々な測定値(0.78 日、<3 日、9 日等)が得られており、暴露評価に用いる半減期としては、1～9 日のうちワーストケースの 9 日が採用されている。また、その他の情報源においては、ECHA に EU RAR と同様の値が掲載されている。

評価Ⅱでは、この値 9 日を用いる。

③-2：加水分解の半減期

土壌での加水分解半減期に係る情報は得られなかった。

④ 底質

底質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た。

④-1：生分解の半減期

信頼性における情報源において EU RAR では好気性の測定値として 30℃の 1 日を実環境

温度条件に補正した 9 日と、それをさらに嫌気性へと外挿した 20 日が暴露評価に用いる半減期として採用されている。また、その他の情報源においては、ECHA に同様の値が掲載されている。

評価Ⅱでは、この値 20 日を用いる。

④-2：加水分解の半減期

底質での加水分解半減期に係る情報は得られなかった。

2 【付属資料】

2-1 物理化学的性状等一覧

収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

2-2 出典

ACD(2015):ACD/Labs Percepta Ver.14.0.0

ECHA: Information on Chemicals - Registered substances.

<https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances> (2016.12 調査).

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

EU RAR(2015): ECB, Trisodium nitrilotriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.: 225-768-6)

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

SPARC(2013): ARChem's physicochemical calculator

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

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
EURAR	EU ECB (European Chemicals Bureau): 「リスク評価書 (EU Risk Assessment Report)」
IUCLID	IUCLID
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SPARC	SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry

基本情報

優先通し番号	152 (120)
公示名称	2, 2', 2''-ニトリロ三酢酸のナトリウム塩
CAS登録番号	5064-31-3
CAS名称	Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, sodium salt (1:3)
その他番号	
その他名称	トリナトリウム=2, 2', 2''-ニトリロトリアセタート

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 融点	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ相当)	キースタディー 融点 (評価Ⅰ相当)	キースタ ディー融点 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EURAR	融点	410 °C	410				key study	-		2B	○	○	[410°C with decomposition above 200°C]	BASF (1996) safety data sheet Trilon A92 from 09.12.1996	p.4
2 IUCLID	融点	410 °C	410							4A	×			BASF AG, Technical Information "Trilon A Marken", 10/1989	p.9
3 EPI Suite	融点	199.47 °C	199	MPBPWIN				(Q)SAR	Weighted Value	2C	×				
4 ECHA	分解点	>340°C	340	その他, ISO method 11358-1	no	2: reliable with restrictions	key study	read-across	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)	4C	×		[Sublimation no]	study report, 2010, 2010-08-22	Read across Subs Key Melting point/freezing point.004

基本情報

優先通し番号	152 (120)
公示名称	2, 2', 2''-ニトリロ三酢酸のナトリウム塩
CAS登録番号	5064-31-3
CAS名称	Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, sodium salt (1:3)
その他番号	
その他名称	トリナトリウム=2, 2', 2''-ニトリロトリアセタート

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 の該当	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ相当)	キースタディー 非 (評価Ⅰ相当)	キースタ ディー 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	487.76 °C	488			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method	2C	○	○			
2 IUCLID	—	—					2: reliable with restrictions				3	×		[not applicable]		p.9
3 ECHA	—	—							experimental result		3	×		[Data waiving study technically not feasible]		Exp NS Boiling point.001

基本情報

優先通し番号	152 (120)
公示名称	2, 2', 2"-ニトリロ三酢酸のナトリウム塩
CAS登録番号	5064-31-3
CAS名称	Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, sodium salt (1:3)
その他番号	
その他名称	トリナトリウム=2, 2', 2"-ニトリロトリアセタート

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20℃における 蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ相当)	キースタディー 該非 (評価Ⅰ相当)	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	0.0000000000807 Pa	8.07E-11	8.07E-11	20 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		4C	○	○	MP(410°C),BP(488°C)を 用いて算出		
2 PhysProp	0.000000000808 mmHg	1.08E-07	7.64E-08	25 °C					estimated by calculation		4C	×			NEELY,WB & BLAU,GE (1985)	Vapor Pressure
3 ECHA	0.000000001 hPa	0.0000001	7.09E-08	25 °C	no data	no	4: not assignable	supporting study	estimated by calculation		4C	×			NEELY,WB & BLAU,GE, 1985, no data, cited in SRC PhysProp Database, 20 Aug 2008	Calc Supporting Vapour pressure.001
4 ECHA	—	—	—	20 °C	no data	no	4: not assignable	supporting study	experimental result		3	×		[not measurable at 20 °C]	Verschueren, Karel, 2001, Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals (4th Edition), © 2008 Knovel Corporation. All rights reserved.	Exp Supporting Vapour pressure.002
5 IUCLID	—	—	—								3	×		[Nitrilotriessigsaeure, Trinatriumsalz, hat unter Normalbedingunen im wasserfreien Zustand keinen messbaren Dampf druck.]		p.10

基本情報

優先審査番号	152 (120)
公示名称	2, 2', 2"-ニトリロ三酢酸のナトリウム塩
CAS登録番号	5064-31-3
CAS名称	Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, sodium salt (1:3)
その他番号	
その他名称	トリナトリウム=2, 2', 2"-ニトリロトリアセタート

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃における 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	QLP	reliability	情報源における キースタディ の記号	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ相当)	キースタディ- 酸非 (評価Ⅰ相当)	キースタ ディ-酸非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EURAR	640 g/L	6.40E+05	6.40E+05	20 °C					key study	-		2B	O	O		Ullmann (1991) Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry. A17, 377. VCH Verlagsgesellschaft Weinheim, 1991.	p.4
2 IUCLID	640 g/L	6.40E+05	6.40E+05	20 °C								4A	×		BASF	Beratergremium fuer Umweltrelevante Altstoffe (BUA) der GDCh, Nitrioltriessigsaeure, BUA-Stoffbericht 5, Oktober 1986, VCH Weinheim	p.11
3 IUCLID	680 g/L	6.80E+05	3.39E+05	80 °C								4A	×			BASF AG, Technical Information "Trilon A Marken", 10/1989	p.11
4 EPI Suite	308900 mg/L	308900	2.88E+05	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		4C	×				
5 PhysProp	1000000 mg/L	1000000	9.34E+05	25 °C						estimated by calculation		4C	×			MEYLAN, WM ET AL. (1996)	Water Solubility
6 ECHA	457 g/L	4.57E+05	4.57E+05	20 °C	11.03	OECD TG 105	no	2: reliable with restrictions	key study	read-across	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)	4C	×		[ca. 45.7 other: % (w/v) equivalent to 457 g/L]	study report, 2010, 2010-09-02	Read across Subs Key Water solubility.007

基本情報

優先通し番号	152 (120)
公示名称	2, 2', 2''-ニトリロ三酢酸のナトリウム塩
CAS登録番号	5064-31-3
CAS名称	Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, sodium salt (1:3)
その他番号	
その他名称	トリナトリウム=2, 2', 2''-ニトリロトリアセート

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 ディの是非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ相当)	キースタディ- 除外 (評価Ⅰ相当)	キースタ ディ-除外 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EURAR	-2.62	-2.62						key study	estimated by calculation	The logPow was calculated according to the Rekker method with the computer program Pro-logP (version 2.0)	4C	×	○		BASF (1989) Determination of the partition coefficient. Internal test report from 09.01.1989.	p.4
2 IUCLID	-2.62	-2.62							estimated by calculation		4C	×	○		BASF AG, Laboratory of Environmental Analytics, unpublished data, 09.01.1989	p.10
3 ECHA	-2.62	-2.62	25 °C	[no data on pH]	その他, calculated	no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	estimated by calculation		4C	×	○		Verschueren, Karel, 2001, Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals (4th Edition), © 2008 Knovel Corporation.	Calc WoE Partition coefficient.002
4 ECHA	-2.62	-2.62	25 °C	[no data on pH]	no data	no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	estimated by calculation		4C	×	○		IPCS, 2003, ICSC:1240, Prepared in the context of cooperation between the International Programme on Chemical Safety & the Commission of the European Communities	Calc WoE Partition coefficient.004
5 ECHA	-4.14	-4.14		1.4	その他, ChemEQL	no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	estimated by calculation		4C	×			study report, 2010, 2010-08-08	Calc WoE Partition coefficient.005
6 ECHA	-13.2	-13.2		7	その他, ChemEQL	no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	estimated by calculation		4C	×			study report, 2010, 2010-08-08	Calc WoE Partition coefficient.005
7 ECHA	-31.2	-31.2		14	その他, ChemEQL	no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	estimated by calculation		4C	×			study report, 2010, 2010-08-08	Calc WoE Partition coefficient.005
8 ECHA	-10.08	-10.1	25 °C	[no data on pH]	no data	no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	estimated by calculation		4C	×			MEYLAN,WM & HOWARD,PH, 1995, no data, cited in SRC PhysProp Database, 20 Aug 2008	Calc WoE Partition coefficient.003
9 ECHA	-10.08	-10.1	25 °C	[no data on pH]	KOWWIN	no	2: reliable with restrictions	weight of evidence	estimated by calculation	KOWWIN Program (v1.66)	4C	×			unpublished calculation, 2003, 2003- 02-20	Calc WoE Partition coefficient.001
10 EPI Suite	-10.0815	-10.1			KOWWIN				(Q)SAR		2C	○				
11 PhysProp	-10.08	-10.1							estimated by calculation		4C	×			MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1995)	Log P (octanol-water)

基本情報

優先通し番号	152 (120)
公示名称	2, 2', 2"-ニトリロ三酢酸のナトリウム塩
CAS登録番号	5064-31-3
CAS名称	Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, sodium salt (1:3)
その他番号	
その他名称	トリナトリウム= 2, 2', 2"-ニトリロトリアセート

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 の誤差	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ相当)	キースタディ 誤差 (評価Ⅰ相当)	キースタ ディ誤差 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	8.94E-012 Pa・ m ³ /mol	8.94E-12	20				(Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	○	○			
2 EPI Suite	1.22E-011 Pa・ m ³ /mol	1.22E-11	25				(Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	×				
3 PhysProp	1.21E-16 atm・ m ³ /mol	1.23E-11					estimated by calculation		4C	×			MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1991)	Henry's Law Constant

基本情報

優先順し番号	152 (120)
公示名称	2, 2', 2"-ニトリロ三酢酸のナトリウム塩
CAS登録番号	5064-31-3
CAS名称	Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, sodium salt (1:3)
その他番号	
その他名称	トリナトリウム=2, 2', 2"-ニトリロトリアセタート

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 の是非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価Ⅰ相当)	キースタディー 是非 (評価Ⅰ相当)	キースタ ディー是非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
EPI Suite	Koc	26.27 L/kg	26.3				KOCWIN				(Q)SAR	MCI Estimation Method			○			
EPI Suite	Koc	0.000003266 L/kg	3.27E-06				KOCWIN				(Q)SAR	Log Kow Estimation Method	4C	○				
EURAR	Kp	1.6 L/kg	算出不可								experimental result		3	×		The distribution of NTA between a marine surface sediment and a mineral medium (used for biodegradation tests)	Bolton et al. (1993) Biodegradation of Synthetic Chelates in Subsurface Sediments from the Southeast Coastal Plain. J. Environ. Qual. 22, 125-132.	p.17

基本情報

優先通知番号	152 (120)
公示名称	2, 2', 2"-ニトロロ三酢酸のナトリウム塩
CAS登録番号	5064-31-3
CAS名称	Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, sodium salt (1:3)
その他番号	
その他名称	トリナトリウム＝2, 2', 2"-ニトロロトリアセート

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	情報源に於ける キースタディ の格付	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (野間 I 相当)	キースタディー 試験 (野間 I 相当)	キースタ ディー試験 (野間 II)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1					3.162 L/kg (wet)	3.162					(Q)SAR		4C	○				
2 EURAR					BCF		3 L/kg	3				key	experimental result				○	For the exposure calculations, a BCF value of 3.162 is chosen.		p.18
3 EURAR		1	400 µg/L		BCF		1~3 L/kg	2	concentration of 400 µg/L,				experimental result		2B	×		Fish (Brachidanio rerio) [Equilibrium after 96 hours]	Lentz and Lidzba (1988) Ökotoxische Effekte von Komplexbildnern bei Wassertieren. Umweltforschungsplan des Bundesministers des Inneren, Forschungsbericht 10603048.	p.17-18
4 ECHA		1	400 µg/L		BCF		1~3 L/kg	2		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		[Equilibrium after 96 hours]	2005, EU-RAR - trisodium nitrotriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.: 225-768-6), ECB, IHCP	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
5 EURAR		1	400 µg/L		BCF		<1 L/kg	1	concentration of 400 µg/L,				experimental result		2B	×		Frog (Rana temporaria)	Lentz and Lidzba (1988) Ökotoxische Effekte von Komplexbildnern bei Wassertieren. Umweltforschungsplan des Bundesministers des Inneren, Forschungsbericht 10603048.	p.17-18
6 ECHA		1	400 µg/L		BCF		<1 L/kg	1		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×			2005, EU-RAR - trisodium nitrotriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.: 225-768-6), ECB, IHCP	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
7 EURAR		1	400 µg/L		BCF		1 L/kg	1	concentration of 400 µg/L,				experimental result		2B	×		Crayfish (Procambarus) [Equilibrium after 4 hours]	Lentz and Lidzba (1988) Ökotoxische Effekte von Komplexbildnern bei Wassertieren. Umweltforschungsplan des Bundesministers des Inneren, Forschungsbericht 10603048.	p.17-18
8 ECHA		1	400 µg/L		BCF		1 L/kg	1		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		[Equilibrium after 4 hours]	2005, EU-RAR - trisodium nitrotriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.: 225-768-6), ECB, IHCP	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
9 EURAR		1	400 µg/L		BCF		1~2 L/kg	1.5	concentration of 400 µg/L,				experimental result		2B	×		Guppy (Lebistes reticulatus) Male [Equilibrium after 72 - 96 hours]	Lentz and Lidzba (1988) Ökotoxische Effekte von Komplexbildnern bei Wassertieren. Umweltforschungsplan des Bundesministers des Inneren, Forschungsbericht 10603048.	p.17-18
10 ECHA		1	400 µg/L		BCF		1~2 L/kg	1.5		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		[Male]Equilibrium after 72-96 hours]	2005, EU-RAR - trisodium nitrotriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.: 225-768-6), ECB, IHCP	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
11 EURAR		1	400 µg/L		BCF		6 L/kg	6	concentration of 400 µg/L,				experimental result		2B	×		Guppy (Lebistes reticulatus) Female [Equilibrium after 72 - 96 hours]	Lentz and Lidzba (1988) Ökotoxische Effekte von Komplexbildnern bei Wassertieren. Umweltforschungsplan des Bundesministers des Inneren, Forschungsbericht 10603048.	p.17-18
12 ECHA		1	400 µg/L		BCF		6 L/kg	6		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		[Female]	2005, EU-RAR - trisodium nitrotriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.: 225-768-6), ECB, IHCP	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
13 EURAR		1	400 µg/L		BCF		1~2 L/kg	1.5	concentration of 400 µg/L,				experimental result		2B	×		Goldfish (Carassius auratus) [Equilibrium after 72 - 96 hours]	Lentz and Lidzba (1988) Ökotoxische Effekte von Komplexbildnern bei Wassertieren. Umweltforschungsplan des Bundesministers des Inneren, Forschungsbericht 10603048.	p.17-18
14 ECHA		1	400 µg/L		BCF		1~2 L/kg	1.5		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		[Equilibrium after 72-96 hours]	2005, EU-RAR - trisodium nitrotriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.: 225-768-6), ECB, IHCP	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
15 EURAR		1	400 µg/L		BCF		8 L/kg	8	concentration of 400 µg/L,				experimental result		2B	×		Snail (Lymnaea stagnalis) [Equilibrium after 3 - 7 days]	Lentz and Lidzba (1988) Ökotoxische Effekte von Komplexbildnern bei Wassertieren. Umweltforschungsplan des Bundesministers des Inneren, Forschungsbericht 10603048.	p.17-18
16 ECHA		1	400 µg/L		BCF		8 L/kg	8		no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		[Equilibrium after 3-7 days]	2005, EU-RAR - trisodium nitrotriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.: 225-768-6), ECB, IHCP	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001

基本情報

優先通知番号	152 (120)
公示名称	2, 2', 2"-ニトロロ三酢酸のナトリウム塩
CAS登録番号	5064-31-3
CAS名称	Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, sodium salt (1:3)
その他番号	
その他名称	トリナトリウム＝2, 2', 2"-ニトロロトリアセタート

蓄積性

収束データ

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	情報源に於ける キースタディ の格付	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (野査Ⅰ相当)	キースタディー 格付 (野査Ⅰ相当)	キースタ ディー格付 (野査Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
17 EURAR		1	400 µg/L		BCF		≥20 L/kg		20 concentration of 400 µg/L,				experimental result		2B	×		Snail (Lymnaea stagnalis) [Equilibrium after ≤ 72 days]	Lentz and Lidzba (1988) Ökotoxische Effekte von Komplexbildnern bei Wassertieren. Umweltforschungsplan des Bundesministers des Inneren, Forschungsbericht 10603048.	p.17-18
18 ECHA		1	400 µg/L		BCF		≥20 L/kg		20	no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		[Equilibrium after ≤72 days]	2005, EU-RAR - trisodium nitrioltriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.: 225-768-6), ECB, IHCP	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
19 EURAR		1	400 µg/L		BCF		2~4 L/kg		3 concentration of 400 µg/L,				experimental result		2B	×		Notonecta spec. [Equilibrium after 48 hours]	Lentz and Lidzba (1988) Ökotoxische Effekte von Komplexbildnern bei Wassertieren. Umweltforschungsplan des Bundesministers des Inneren, Forschungsbericht 10603048.	p.17-18
20 ECHA		1	400 µg/L		BCF		2~4 L/kg		3	no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		[Equilibrium after 48 hours]	2005, EU-RAR - trisodium nitrioltriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.: 225-768-6), ECB, IHCP	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
21 EURAR		1	400 µg/L		BCF		5~10 L/kg		7.5 concentration of 400 µg/L,				experimental result		2B	×		Tubificidae [Equilibrium after 5 days]	Lentz and Lidzba (1988) Ökotoxische Effekte von Komplexbildnern bei Wassertieren. Umweltforschungsplan des Bundesministers des Inneren, Forschungsbericht 10603048.	p.17-18
22 ECHA		1	400 µg/L		BCF		5~10 L/kg		7.5	no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		[Equilibrium after 5 days]	2005, EU-RAR - trisodium nitrioltriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.: 225-768-6), ECB, IHCP	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001
23 EURAR		1	400 µg/L		BCF		5~10 L/kg		7.5 concentration of 400 µg/L,				experimental result		2B	×		Frog larvae (Rana temporaria) [Equilibrium after 96 hours]	Lentz and Lidzba (1988) Ökotoxische Effekte von Komplexbildnern bei Wassertieren. Umweltforschungsplan des Bundesministers des Inneren, Forschungsbericht 10603048.	p.17-18
24 ECHA		1	400 µg/L		BCF		5~10 L/kg		7.5	no data	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		4A	×		[Equilibrium after 96 hours]	2005, EU-RAR - trisodium nitrioltriacetate (CAS No.: 5064-31-3, EINECS No.: 225-768-6), ECB, IHCP	Exp Supporting Bioaccumulation: aquatic / sediment.001

基本情報

優先通し番号	152 (120)
公示名称	2, 2', 2''-ニトリロ三酢酸のナトリウム塩
CAS登録番号	5064-31-3
CAS名称	Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, sodium salt (1:3)
その他番号	
その他名称	トリナトリウム=2, 2', 2''-ニトリロトリアセート

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 の脱非	値の種類	値の種類の詳細	キースタ ディ-脱非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 SPARC	pKa	9.85	9.85	20						estimated by calculation		○			
2 SPARC	pKa	2.98	2.98	20						estimated by calculation		○			
3 SPARC	pKa	2.18	2.18	20						estimated by calculation		○			
4 SPARC	pKa	1.38	1.38	20						estimated by calculation		○			
5 ACD	pKa	9.1±0.4	9.1			Percepta v14.0.0				estimated by calculation	pKa/GALAS	○			
6 ACD	pKa	3.2±0.5	3.1			Percepta v14.0.0				estimated by calculation	pKa/GALAS	○			
7 ACD	pKa	2.2±0.4	2.2			Percepta v14.0.0				estimated by calculation	pKa/GALAS	○			
8 ACD	pKa	1.2±0.4	1.2			Percepta v14.0.0				estimated by calculation	pKa/GALAS	○			
9 ACD	pKa	10.3±0.1	10.3			Percepta v14.0.0				estimated by calculation	pKa/classic	○			
10 ACD	pKa	3.0±0.1	3.0			Percepta v14.0.0				estimated by calculation	pKa/classic	○			
11 ACD	pKa	2.3±0.1	2.3			Percepta v14.0.0				estimated by calculation	pKa/classic	○			
12 ACD	pKa	1.5±0.1	1.5			Percepta v14.0.0				estimated by calculation	pKa/classic	○			

基本情報

優先通し番号	152 (120)
公示名称	2, 2', 2''-ニトリロ三酢酸のナトリウム塩
CAS登録番号	5064-31-3
CAS名称	Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, sodium salt (1:3)
その他番号	
その他名称	トリナトリウム＝2, 2', 2''-ニトリロトリアセート

環境中運命

実験データ

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	BOWEN	GLP	reliability	情報源における キースタディの 結果	値の種類	値の種類の詳細	キースタ ディ＝結果 (詳細見)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	大気	OHラジカルとの反応		74.0782E-12 cm ³ /molecule/ sec	5.0E+05 molecule/cm3	0.22 day		0.22	25 °C		AOPWIN					(Q)SAR		○			
2 EURAR	水域	生分解	0.14 day ⁻¹			5 day		5							key			○	The available studies demonstrate that NTA is biodegraded in freshwaters with half-life in the range of several hours to some days, after an acclimation period in the range of days to weeks. Degradation is considerably influenced by temperature. For the following exposure calculations, a half-life of 5 days is used.		p17 Table
3 EURAR	土壌	生分解	0.077 day ⁻¹			9 day		9							key			○	The available studies demonstrate that NTA is mineralised in soils, half-lives between 1 – 9 days were determined. For the exposure calculations, a half-life of 9 days is used as a worst case.		p17 Table
4 EURAR	底質	生分解	0.086 day ⁻¹			20 day		20							key		anaerobic	○	The reaction was slower than for the aerobic degradation. For degradation in the anaerobic sediment layer, a roughly estimated half-life of 20 days is used.		p17 Table

参考情報

優先通し番号	152 (120)
公示名称	2, 2', 2"-ニトリロ三酢酸のナトリウム塩
CAS登録番号	5064-31-3
CAS名称	Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, sodium salt (1:3)
その他番号	
その他名称	トリナトリウム=2, 2', 2"-ニトリロトリアセタート

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	値の詳細	備考	文献	ページ番号等
1 EURAR	readily biodegradable	100%			OECD TG 301E			key	experimental result		14 days, River water [lag phase: 5d] Meeting the 10 days time window criterion	BASF (1983b) Labor Oekologie, unveröfentlichte Untersuchung, Testnummer OT/1/83/5.	p.9-11
2 EURAR		100%			OECD TG 301E				experimental result		14 days, lag phase: 5-11 d for samples with industrial WWTP effluent	BASF (1983b) Labor Oekologie, unveröfentlichte Untersuchung, Testnummer OT/1/83/5.	p.9-11
3 EURAR		100%			OECD TG 301E				experimental result		7d [lag phase: 1d] Adapted Activated Sludge	BASF (1983c) Labor Oekologie, unveröfentlichte Untersuchung, Testnummer OT/1/83/4.	p.9-11
4 EURAR		75~90 %			OECD TG 301E				experimental result		12d [lag phase: 2-5d] Adapted Activated Sludge	BASF (1983c) Labor Oekologie, unveröfentlichte Untersuchung, Testnummer OT/1/83/4.	p.9-11
5 EURAR		92%			OECD TG 301F				experimental result		28d [lag phase: 16d] Industrial Activated Sludge	BASF (1983d) Labor Oekologie, unveröfentlichte Untersuchung, Testnummer 05/83/07.	p.9-11
6 ECHA		0%	DOC removal		OECD TG 301E	yes	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		0d	1983, 1983.3.18.	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.005
7 ECHA		65%	DOC removal		OECD TG 301E	yes	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		1d	1983, 1983.3.18.	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.005
8 ECHA		70%	DOC removal		OECD TG 301E	yes	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		7d	1983, 1983.3.18.	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.005
9 ECHA		75%	DOC removal		OECD TG 301E	yes	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		14d	1983, 1983.3.18.	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.005
10 ECHA		90%	DOC removal		OECD TG 301E	yes	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		28d	1983, 1983.3.18.	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.005
11 ECHA		100%	DOC removal		OECD TG 301E	yes	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		28d	1983, 1983.3.18.	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.005
12 ECHA		90%	DOC removal		OECD TG 301E	no	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		7 day, lag time: 1 day	1983, 1983.10.12 EU-RAR - trisodium nitrioltriacetate.2005, ECB, IHCP	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.006
13 ECHA		100%	DOC removal		OECD TG 301E	no	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		7 day, lag time: 1 day	1983, 1983.10.12 EU-RAR - trisodium nitrioltriacetate.2005, ECB, IHCP	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.006
14 ECHA		50%	DOC removal		OECD TG 301E	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		9d	1983, 1983.10.12 EU-RAR - trisodium nitrioltriacetate.2005, ECB, IHCP	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
15 ECHA		100%	DOC removal		OECD TG 301E	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		14 day, Lag phase: 5-11 d for samples with industrial WWTP effluent	1983, 1983.10.12 EU-RAR - trisodium nitrioltriacetate.2005, ECB, IHCP	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
16 ECHA		100%	DOC removal		OECD TG 301E	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		14 day, Lag phase: 5 d for river water samples	1983, 1983.10.12 EU-RAR - trisodium nitrioltriacetate.2005, ECB, IHCP	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
17 ECHA		75~90 %	DOC removal		OECD TG 301E	no	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result		Lag phase: 2-5 d	1983, 1983.10.12 EU-RAR - trisodium nitrioltriacetate.2005, ECB, IHCP	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.003
18 IUCLID		92%			OECD TG 301F		1: reliable without restriction				28d [lag phase: 16 d]	BASF 1983	p.33
19 IUCLID		100%			OECD TG 301E	no	2: reliable with restrictions				7d	BASF 1983	p.38