

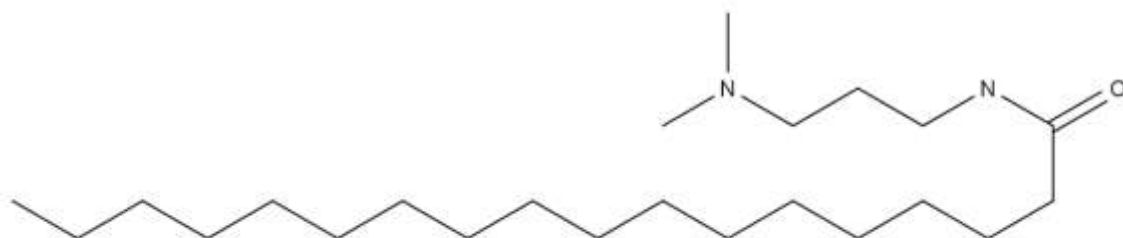
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

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



令和6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	6
2 【付属資料】	8
2 - 1 物理化学的性状等一覧	8
2 - 2 その他	8

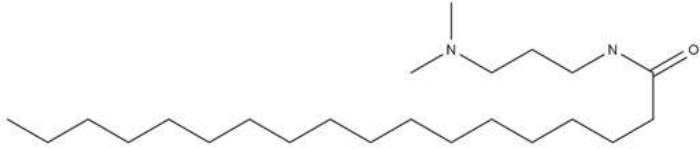
1 評価対象物質の性状

本章では、優先評価化学物質「*N*－〔3－（ジメチルアミノ）プロピル〕ステアルアミド」のリスク評価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

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 という。）である。

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	<i>N</i> －〔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

1-2 物理化学的性状及び濃縮性

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、技術ガイダンス¹という。）に従い精査²し、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。

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	測定値 ¹⁾	67.4 ¹⁾
沸点	°C	412.3	測定値 ¹⁾	476.74 ²⁾
蒸気圧	Pa	3.4×10^{-8}	20 °Cにおける測定値 ¹⁾	3.4×10^{-8} ¹⁾
臨界ミセル濃度 (CMC)	mg/L	205	暴露推計用：CMC 測定値の 20 °C補正值(塩酸塩) ¹⁾	— ⁷⁾
水に対する溶解度	mg/L	205	排出係数設定用：CMC 測定値の 20 °C補正值(塩酸塩) ¹⁾	10 ¹⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)	—	2.6	低速攪拌法による pH=7.0 の測定値の算術平均値(塩酸塩) ³⁾	7.35 ²⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	6.1×10^{-8}	Henry 推計式による値 ³⁾	1.4×10^{-4} ²⁾
有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)	L/kg	1.5×10^5 (Kd : 4.3×10^3)	Quaternary ammonium compounds, C20-22-alkyltrimethyl, chlorides (C-22 ATQ) での測定値の算術平均値を Read across により当該物質に適用 ¹⁾	7.93×10^4 ²⁾
生物濃縮係数 (BCF)	L/kg	24	BCFBAF (v3.01) による推計値 ²⁾	2,271 ²⁾
生物蓄積係数 (BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ⁴⁾	1
酸解離定数 (pKa)	—	8.7、15	複数の推計値の算術平均値 ^{1), 5), 6)}	— ⁷⁾

※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（令和 5 年 10 月 19 日）で了承された値

1) ECHA

2) EPI Suite (2012)

3) NITE (2023)

4) MHLW, METI, MOE (2014)

5) SPARC (2013)

6) ACD (2015)

7) 評価Ⅰにおいては考慮しない

括弧内は参考値であることを示す

¹ 「1.4.4.2 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。

² 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平成 31 年 1 月の 3 省合同審議会(薬事・食品衛生審議会薬事分科会化学物質安全対策部会化学物質調査会、化学物質審議会安全対策部会、中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会)審議時より再精査。

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

① 融点

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、その他の信頼性の定まった情報源³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、同じ値 67.4 °Cを用いる。

② 沸点

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 OECD TG 103 準拠の測定値 412.3 °Cが採用されている。

そのため、評価Ⅱにおいては、ECHA の値 412.3 °C を用いる。

③ 蒸気圧

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。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、同じ値 3.4×10^{-8} Pa を用いる。

④ 臨界ミセル濃度 (CMC)

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。

臨界ミセル濃度 (CMC) としては、ECHA に塩酸塩を用いた ISO 4311 準拠 (フラスコ法) の 25 °Cにおける測定値 220 mg/L が記載されており、20 °Cに補正した値は 205 mg/L である。

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 CMC の 205 mg/L を用いる。

⑤ 水に対する溶解度

評価Ⅰの採用値 10 mg/L は、ECHA の 20 °Cにおける OECD TG 105 準拠 (フラスコ法) 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。

排出量推計時に用いる溶解度としては、評価Ⅰで採用した 10 mg/L は解離種・非解離種の一部の溶解度のみを表している可能性があることから、安全側の排出となるよう CMC の 205 mg/L を用いる。

⑥ 1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)

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。その他の信頼性の定まった情報源から測定値は得られていないが、NITE (2023) では塩酸塩を用いた低速撹拌法による pH 7.0 の分配係数の算術平均値が 2.6 と報告されている。

また、ECHA では Key Study として EU method A.8 準拠で塩酸塩のオクタノール溶解度及び CMC の実測値の比率から算出した、溶解度比法による値 2.04 を pH 補正した値 2.00 (pH 4)、2.01 (pH 7)、2.57 (pH 9)の記載があった。

評価Ⅱにおいては、低速撹拌法による測定値の算術平均値 (2.6) を用いる。

³ 「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。

⑦ ヘンリー係数

評価Ⅰの採用値 $1.4 \times 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$ は、EPI Suite の HENRYWIN (v3.20) による 20 °Cにおける推計値 (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得られなかった。

なお、CMC が 1 mol/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における蒸気圧と CMC から算出すると、 $6.1 \times 10^{-8} \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$ が得られた。

そのため、評価Ⅱにおいては、Henry 推計式の値 $6.1 \times 10^{-8} \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$ を用いる。

⑧ 有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)

評価Ⅰの有機炭素補正土壌吸着定数 (Koc) の採用値 $7.93 \times 10^4 \text{ L/kg}$ 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、ECHA では OECD TG 106 に準拠した Quaternary ammonium compounds, 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た旨の記載があった。

表 1-3 ECHA の Koc 及び Kd 試験データ

土壌	pH	有機炭素含有率 [%]	Kd [L/kg]	Koc [L/kg]	測定温度 [°C]
Cranfield 164 soil (silty clay loam)	6.0	3.7	0.73×10^3	1.98×10^4	20 ± 2
Cranfield 277 soil (clay)	7.4	2.7	13.9×10^3	5.16×10^5	20 ± 2
Cranfield 299 soil (loam)	7.6	2.9	1.53×10^3	5.28×10^4	20 ± 2
SW sediment	7.6	6.2	1.08×10^3	1.74×10^4	20 ± 2
Tilburg sludge	6.6	37.5	0.36×10^3	9.5×10^2	20 ± 2

また、後述する pKa の値から環境水中においてはプロトン化されたアンモニウムイオンとして存在し、C22-ATQ も同様に環境水中ではプロトン化された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ている。

N-DPS が界面活性作用を有し推計が難しい物質であることから、当該物質の推計値ではなく、物理化学的性状・構造情報・生態毒性等の類似性より Read across を行った ECHA の試験データを採用することとする。表 1-3 の活性汚泥を除いた 4 つの土壌の平均値は Koc が $1.5 \times 10^5 \text{ L/kg}$ 、Kd が $4.3 \times 10^3 \text{ L/kg}$ であった。評価Ⅱにおいては、Koc の値 $1.5 \times 10^5 \text{ L/kg}$ を用いる。

⑨ 生物濃縮係数 (BCF)

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 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。

そのため、評価Ⅱにおいては、logPow の採用値 2.6 を用いた BCFBAF (v3.01) による推計値 24 L/kg を用いる。

⑩ 生物蓄積係数 (BMF)

評価Ⅰの採用値 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、logPow と BCF から技術ガイダンスに従って設定される値 1 を用いる。

①酸解離定数 (pKa)⁴

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 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 Module) 及び 9.2 ± 0.4 、 14.8 ± 0.4 (GLASS Module) が得られている。

また、ACD/Percepta によると本物質は pH=5~8 においてプロトン化されたアンモニウムイオンとして存在し、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。

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 8.7、15 を用いる。

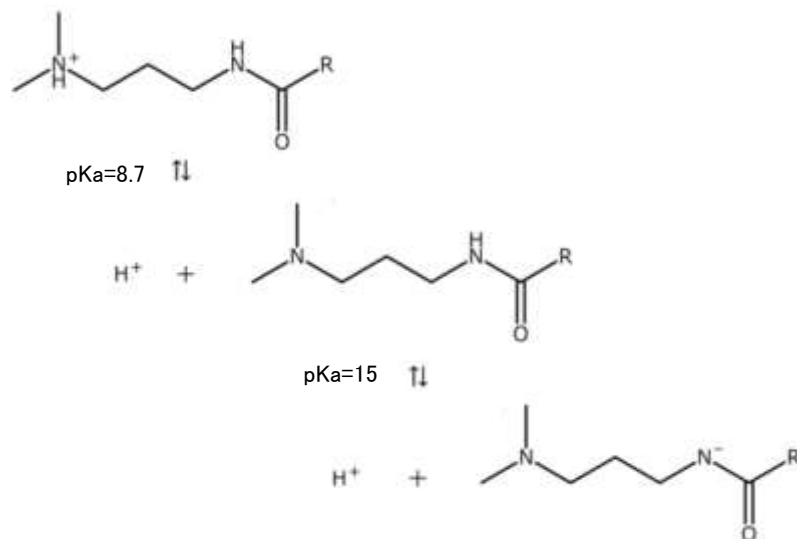


図 1-1 解離に係る構造式(長鎖はRとして省略)

⁴ 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

1-3 分解性

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示す。

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	反応速度定数の推計値から OH ラジカル濃度 $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$ として算出 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	分解性試験のパスレベルより設定 ^{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	複数の推計値の算術平均 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	水中生分解半減期の 4 倍 ³⁾
		加水分解	NA	-

※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
(令和 5 年 10 月 19 日) で了承された値

1) EPI Suite (2012)

3) MHLW, METI, MOE (2014)

2) ECHA

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 $1.2 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$ 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 0.14 日と算出される。

評価Ⅱではこの値 0.14 日を用いる。

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測定値は得られなかったが、EPI Suite の BIOWIN (v4.10) では

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期は 5 日と設定される。

評価Ⅱでは、この値 5 日を用いる。

②-2：加水分解の半減期

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。

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 に OECD TG-307 に準拠した C-22 ATQ での測定値、23.2 日 (Silt loam)、24 日 (Clay)、41.4 日 (Loam) を Read across により当該物質に適用した旨の記載があった。

評価Ⅱでは、これらの算術平均値 29.5 日を用いる。

④底質

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。

④-1：生分解の半減期

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て、水中の生分解半減期の 4 倍である 20 日を用いる。

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。

出典)

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

- ・ ECHA: Information on Chemicals - Registered substances.

<https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances> (2023.10 調査).

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

- ・ 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.

- ・ 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.

- ・ SPARC(2013): ARChem's physicochemical calculator.

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

2 - 2 その他

特になし。

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-イル]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 該当	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該当 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該当 (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	412.3			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℃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 該当	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該当 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該当 (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(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 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	×	×			-
2 ECHA	10 mg/L	10	10	20 °C	6.8	OECD TG 105	no data	1: reliable without restriction	weight of evidence	experiment al result		1B	○	×		study report, 2012, 2012-11-15	Exp WoE Water solubility.002
3	220 mg/L [critical micelle concentratio n]	220	205	25 °C		その他,ISO 4311	no data	1: reliable without restriction	weight of evidence	experiment al result		4A	×	○	protonated amine (Stearic acid 3- (dimethylaminopropyl)am ide hydrochloride)	study report, 2012	Exp WoE Water solubility.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

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[weigh ted 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[weigh ted 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
5	2.04	2.04	20 °C		EU Method A.8	no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×	×	protonated amine (Stearic acid 3- (dimethylaminopropyl)ami de hydrochloride)	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
6	4.18	4.18	20 °C		EU Method A.8	no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×	×	free amine	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
7 NITE	2.6	2.6	25 °C	7.0	低速攪拌法	no			測定値		—	—	○	protonated amine (Stearic acid 3- (dimethylaminopropyl)ami de hydrochloride)	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/水分分配係数の測 定, 日本分析化学会第72年会要旨集, 2P-264, 2023.	

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		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		
4			6.11E-08					EST	H=VP/(WS/MW)	—	—	○	VP(0.000000034)、WS(205)、 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

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	79340 L/kg	7.93E+04								(Q)SAR		4C	○	×			
2 ECHA	Kd	0.73E3 L/kg	7.30E+02	20±2 °C	6	Cranfield 164 soil silty clay loam OC:3.7%	OECD TG 106	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	×		study report, 2009, 2009-03-19	Read across Subs Key Adsorption / desorption.001
3	Kd	13.9E3 L/kg	1.39E+04	20±2 °C	7.4	Cranfield 277 soil clay OC:2.7%	OECD TG 106	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	×		study report, 2009, 2009-03-19	Read across Subs Key Adsorption / desorption.001
4	Kd	1.53E3 L/kg	1.53E+03	20±2 °C	7.6	Cranfield 299 soil loam OC:2.9%	OECD TG 106	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	×		study report, 2009, 2009-03-19	Read across Subs Key Adsorption / desorption.001
5	Kd	1.08E3 L/kg	1.08E+03	20±2 °C	7.6	SW sediment OC:6.2%	OECD TG 106	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	×		study report, 2009, 2009-03-19	Read across Subs Key Adsorption / desorption.001
6	Kd	0.36E3 L/kg	3.60E+02	20±2 °C	6.6	Tilburg sludge C:37.5%	OECD TG 106	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)		4C	×	×		study report, 2009, 2009-03-19	Read across Subs Key Adsorption / desorption.001
7	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	×	○		study report, 2009, 2009-03-19	Read across Subs Key Adsorption / desorption.001
8	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	×	○		study report, 2009, 2009-03-19	Read across Subs Key Adsorption / desorption.001
9	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	×	○		study report, 2009, 2009-03-19	Read across Subs Key Adsorption / desorption.001
10	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	×	○		study report, 2009, 2009-03-19	Read across Subs Key Adsorption / desorption.001
11	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	×	×		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

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		4C	○	×	logP=2.0での推計		
2			1			BCF		24 L/kg (wet)	24	BCFBAF				(Q)SAR		—	—	○	logP=2.6での推計		
3			1			BCF		2,270 L/kg (wet)	2,270	BCFBAF				(Q)SAR		4C	×	×	logP=7.3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)プロパシ-1-イル]ステアルアミド
SMILES	CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)NCCCN(C)C

環境中運命

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 該非 (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 cm³3/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	×			
3 ECHA	水域	生分解 (好氣的)					91 % [(C22 fraction) primary biodegradation]52 d[median of all samples]		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)		×		study report, 2010, 2010-07-18	Read across Subs Key Biodegradation in water and sediment: simulation tests.001
4	水域	生分解 (好氣的)					96 % [(C20 fraction) primary biodegradation]52 d[median of all samples]		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)		×		study report, 2010, 2010-07-18	Read across Subs Key Biodegradation in water and sediment: simulation tests.001
5	水域	生分解 (好氣的)					92.2 % [weighted average based on content of the constituents C20 and C22 ATQ]52 d]		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)		×		study report, 2010, 2010-07-18	Read across Subs Key Biodegradation in water and sediment: simulation tests.001
6	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		×		study report, 1995, 1995-01-05	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
7	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	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	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	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)		×		study report, 2011, 2011-12-06	Read across Subs Key Biodegradation in soil.001
12	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)		×		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	情報源におけるキースタディ の該非	値の種類	値の詳細	備考	文献	ページ番号等
------	-----	-----	------	-------	-------	-----	-------------	----------------------	------	------	----	----	--------

なし