

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23

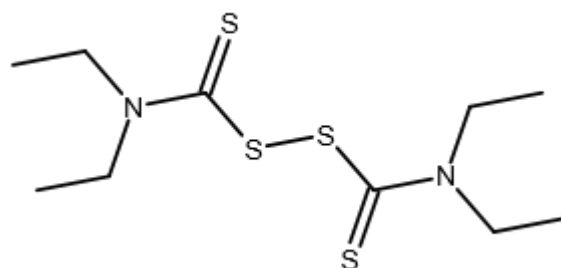
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

テトラエチルチウラムジスルフィド （別名ジスルフィラム）

優先評価化学物質通し番号 41



令和2年 1月

経済産業省

目 次

| | | |
|----|------------------------|----|
| 24 | | |
| 25 | | |
| 26 | 1 評価対象物質の性状 | 3 |
| 27 | 1-1 評価対象物質の設定 | 3 |
| 28 | 1-2 物理化学的性状及び濃縮性 | 5 |
| 29 | 1-3 分解性 | 8 |
| 30 | 2 【付属資料】 | 11 |
| 31 | 2-1 物理化学的性状等一覧 | 11 |
| 32 | 2-2 その他 | 12 |
| 33 | | |

34 1 評価対象物質の性状

35 本章では、優先評価化学物質テトラエチルチウラムジスルフィド（別名ジスルフィラム）
36 （以下、「ジスルフィラム」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
37 における分解性に係るデータを示す。

38

39 1-1 評価対象物質の設定

40 ジスルフィラムは、化審法の分解度試験が実施されている（MITI (1990a)）（OECD
41 TG301C 相当）。被験物質濃度 100 mg/L、活性汚泥濃度 30 mg/L で 28 日間試験した結果、
42 ジスルフィラムは一部変化し（BOD 分解度：0%、2%、0%、HPLC 分解度：48%、54%、
43 48%）、ジエチルアミン及び二硫化炭素が生成した（ジエチルアミン：51%、54%、48%、二
44 硫化炭素：0.2%、0.1%、0.3%）。二硫化炭素は揮発性が高く、また炭酸ガス吸収剤であるソ
45 ーダライムに吸着するため生成率が低かったと考えられると試験報告書では考察している。

46 一方、変化物のジエチルアミンを対象にした分解度試験結果(MITI (1988))によれば、塩
47 酸を加えて pH を 7.0 に調整（調整前は pH9.9）して試験したところ、28 日間後には完全
48 に分解し、良分解性と判定されている（BOD 分解度（NO₂）：69%、70%、68%、（NH₃）：
49 89%、91%、88%、TOC 分解度 99%、99%、100%、HPLC 分解度 100%、100%、100%）。
50 この試験結果により、ジスルフィラムの分解度試験でジエチルアミンが残留したのはアミ
51 ンの生成によって pH がアルカリ性になったためであり、実環境中の pH では変化物のジエチ
52 ルアミンは残留しないと考えられる。

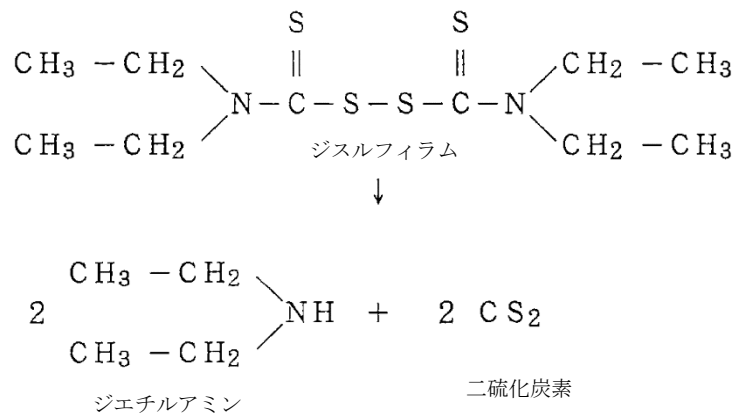
53 また、変化物の二硫化炭素については、ジスルフィラムの分解度試験では残留しているが、
54 良分解判定¹されていることから、実環境では残留しないと考えられる。

55 以上の試験結果と、化審法では第二種特定化学物質の指定根拠となる変化物は自然的作
56 用による化学的変化を生じにくいものに限るとされている点²を踏まえて、評価対象物質に
57 は親化合物のジスルフィラムを設定する。

58

¹ 平成 30 年度化学物質審議会第 2 回安全対策部会（平成 30 年 9 月 21 日）

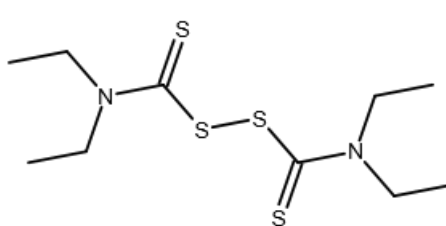
² 化審法第二条第 3 項一ロまたは同二ロ「当該化学物質が自然的作用による化学的変化を生じやすいものである場合には、自然的作用による化学的変化により生成する化学物質（元素を含む。）がイに該当するもの（自然的作用による化学的変化を生じにくいものに限る。）であること。」



59
60
61
62
63

図 1-1 ジスルフィラムの生分解試験による生成物

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 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| 分子式 | $\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{N}_2\text{S}_4$ |
| 優先評価化学物質通し番号 | 41 |
| CAS 登録番号 | 97-77-8 |

64
65

66 1-2 物理化学的性状及び濃縮性

67 下表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
68 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。

69
70

表 1-2 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 | — | 296.52 | — | 296.52 |
| 融点 | °C | 71.5 ¹⁻⁴⁾ | 測定値 | 71.5 ¹⁻³⁾ |
| 沸点 | °C | <u>—</u> ⁵⁾ | 沸騰する前に分解すると推定 | 152 ^{1-3), 6)} |
| 蒸気圧 | Pa | <u>4.2 × 10⁻⁴</u> ⁷⁾ | MPBPWIN (v. 3. 20) による推計値 | 1.4 × 10 ^{-5 4)} |
| 水に対する溶解度 | mg/L | <u>3.82</u> ^{2, 3, 4)} | 25°Cでの測定値を 20°Cに補正した測定値 | 9.3 ⁸⁾ |
| 1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow) | — | 3.88 ^{2, 3, 6)} | 測定値 | 3.88 ^{2, 3, 6)} |
| ヘンリー係数 | Pa・m ³ /mol | <u>0.033</u> ⁹⁾ | 蒸気圧と水溶解度からの推計値 | 6.5 ⁷⁾ |
| 有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc) | L/kg | 1.8 × 10 ⁴ ⁷⁾ | KOCWIN (v. 2. 00) による推計値 | 1.8 × 10 ⁴ ⁷⁾ |
| 生物濃縮係数 (BCF) | L/kg | <u>230</u> ¹⁰⁾ | カテゴリーアプローチによる推計値 | 170 ⁷⁾ |
| 生物蓄積係数 (BMF) | — | 1 ⁹⁾ | logPow と BCF から設定 | 1 ⁹⁾ |
| 解離定数 (pKa) | — | — | 解離性の基を有さない物質 | — ¹¹⁾ |

71 ※ 平成 30 年度第 3 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
72 ュー会議 (平成 31 年 3 月 28 日) で了承された値

- 73 1) CRC 7) EPI-Suite (2012)
74 2) HSDB 8) MITI (1990b)
75 3) PhysProp 9) MHLW, METI, MOE (2014)
76 4) ECHA 10) NITE (2010)
77 5) OECD (2010) 11) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない
78 6) USHPV (2009)

79

80 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

81 ①融点

82 評価Ⅰで採用した値 (71.5°C) は、CRC、HSDB、PhysProp に記載された値であり、これ
83 らの情報源からは測定値であるか不明であるが、同じ値が ECHA には測定値として記載さ
84 れており、評価Ⅱにおいてもこの値 (71.5°C) を用いる。

85

86 ②沸点

87 評価Ⅰで採用した値 (152°C) (標準圧力 (760 mmHg) における値) は、CRC、HSDB、
88 PhysProp、USHPV (2009) に記載された値 (117°C) (17 mmHg における測定値) を標準圧
89 力に補正した値である。類似物質であるチウラム (テトラメチルチウラムジスルフィド) (図
90 1-2) の SIDS のレポート (OECD (2010)) には、沸点の値 (129°C) (20 mmHg における
91 測定値) があり、「沸騰する前に分解」との記載があった。構造の類似性からジスルフィラ

92 ムも標準圧力下では沸騰する前に分解すると推定されるため、評価Ⅱにおいては数値を設
93 定しないこととする。

94

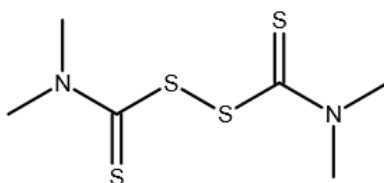
95 ③蒸気圧

96 評価Ⅰで採用した値 (1.4×10^{-5} Pa) は、ECHA に記載された 25°C での測定値 (2.0×10^{-5}
97 Pa) を 20°C に補正した値である。ECHA によれば、この値はジスルフィラムの測定値で
98 はなく、類似物質であるチウラムの EU A.4 法による測定値が read-across 扱いで記載され
99 ているデータである。他にチウラムの SIDS のレポート (OECD (2010)) には 2.3×10^{-3} P
100 (25°C) というチウラムの測定値があった。

101 信頼性の定まった情報源にジスルフィラムを対象にした測定値は見つからなかった。EPI
102 Suite (2012)の MPBPWIN(v.3.20)を用いた推計値 (融点 71.5°C を入力) は 4.2×10^{-4} Pa で
103 ある。評価Ⅱではこの推計値 (4.2×10^{-4} Pa) を用いる。

104 なお、HSDB、PhysProp にはジスルフィラムの推計値としてそれぞれ 8.2×10^{-2} Pa、 6.3
105 $\times 10^{-4}$ Pa の値 (ただし 20°C に補正した値) があった。

106



107

108 図 1-2 チウラムの構造式

109

110 ④水に対する溶解度

111 評価Ⅰで採用した値 (9.3 mg/L)は、MITI (1990b)に記載された $25 \pm 1^{\circ}\text{C}$ での測定値 (\leq
112 10 mg/L) を 20°C に補正し、不等号を外したものである。USHPV (2009)に不等号の付かな
113 い測定値 (25°C で 4.09 mg/L) の記載があり、HSDB、PhysProp、ECHA にも同じ値が記
114 載されている。評価Ⅱにおいてはこの値を 20°C に補正した値 (3.82 mg/L) を用いる。

115

116 ⑤logPow

117 評価Ⅰで採用した値 (3.88) は、HSDB、PhysProp、USHPV (2009)に記載された測定値
118 である。評価Ⅱにおいてもこの値 (3.88) を用いる。

119

120 ⑥ヘンリー係数

121 評価Ⅰで採用した値 ($6.5 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$) は、EPI Suite (2012)の HENRYWIN(v.3.20)を用
122 いた 20°C での推計値である。信頼性の定まった情報源に測定値は見つからなかった。評価
123 Ⅱでは、水への溶解度が 1 mol/L 未満 (1.3×10^{-5} mol/L) であるため、 20°C での蒸気圧と水

124 に対する溶解度から推計した値 ($0.033 \text{ Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$) を採用する。

125

126 ⑦Koc

127 評価Ⅰで採用した値 ($1.8\times 10^4 \text{ L/kg}$) は、EPI Suite (2012)の KOCWIN(v.2.00)を用いて
128 logPow (3.88) を入力して求めた推計値である。信頼性の定まった情報源にジスルフィラム
129 を対象にした測定値は見つからなかった。評価Ⅱでも評価Ⅰで採用した値 ($1.8\times 10^4 \text{ L/kg}$)
130 を用いる。

131 なお、参考情報として ECHA には類似物質のチウラムを対象にした read-across 扱いの
132 測定値で OECD-TG106 に従った試験で $1.2899\times 10^4 \text{ L/kg}$ 、 $6.359\times 10^3 \text{ L/kg}$ 、 2.4526×10^4
133 L/kg 、 $2.245\times 10^3 \text{ L/kg}$ という記載があった。

134

135 ⑧BCF

136 評価Ⅰで採用した値 (170 L/kg) は、EPI Suite (2012)の BCFBAF(v.3.01)を用いて
137 logPow (3.88) を入力して求めた推計値である。一方、化審法における優先評価化学物質に
138 関するリスク評価の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という) に従い logPow (3.88)
139 を用いた NITE カテゴリーアプローチを用いた推計値は 230 L/kg (カテゴリーⅡ-A) であ
140 る。信頼性の定まった情報源に測定値は見つからなかった。評価Ⅱではカテゴリーアプロ
141 チによる推計値 (230 L/kg) を用いる。

142

143 ⑨BMF

144 評価Ⅰで採用した値は、logPow (3.88) 及び BCF (170 L/kg) から技術ガイダンスに従っ
145 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においても logPow
146 (3.88) 及び BCF (230 L/kg) に従って設定した値 (1) を用いる。

147

148 ⑩解離定数

149 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。USHPV (2009)に
150 よれば本物質は「Not applicable」とあり解離性の基を有さないと考えられる。

151

152 1-3 分解性

153 下表に採用した分解に係るデータを示す。

154

155

表 1-3 分解に係るデータのまとめ

| 項目 | | 半減期 (日) | 詳細 | |
|----|---------------|-------------|-------|---|
| 大気 | 大気における総括分解半減期 | NA | | |
| | 機序別の半減期 | OH ラジカルとの反応 | 0.041 | AOPWIN (v. 1.92) ¹⁾ により推計。反応速度定数の推定値から、OH ラジカル濃度を 5×10^5 molecule/cm ³ として算出 |
| | | 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 | 10 | 分解度試験の HPLC 分解度に基づき設定 ^{2), 3)} |
| | | 加水分解 | - | 加水分解は重要な機序でない ⁴⁾ |
| | | 光分解 | - | 直接光分解を受けにくい ⁴⁾ |
| 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 | 10 | 水中生分解と同じと仮定 |
| | | 加水分解 | - | 水中加水分解の項参照 |
| 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 | 40 | 水中生分解半減期の4倍と仮定 |
| | | 加水分解 | - | 水中加水分解の項参照 |

156 ※ 平成 30 年度第 3 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
157 ュー会議（平成 31 年 3 月 28 日）で了承された値

158 1) EPI Suite (2012)

159 2) MITI (1990a)

160 3) MHLW, METI, MOE (2014)

161 4) HSDB

162 NA: 情報が得られなかったことを示す

163

164 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
165 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。

166

167 ①大気

168 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
169 ては、OH ラジカルとの反応に関する情報が得られた。

170 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

171 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
172 ため、AOPWIN (v1.92) により推計された 3.9×10^{-10} cm³/molecule/s を半減期算出に採用
173 する。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの 5×10^5 molecule/cm³ とした場合、半減
174 期は 0.041 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (0.041 日) を用いる。

175

176 ②水中

177 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、生分解の機序別の半減期に
178 関する情報が得られた。また、加水分解、光分解についての定性的な情報が得られた。

179 ②-1 生分解の半減期

180 本物質について水中での生分解半減期に関する数値は得られなかった。1-1で述べたよ
181 うに MITI (1990a)における化審法の分解度試験 (OECD TG301C 相当) で被験物質濃度
182 100 mg/L、活性汚泥濃度 30 mg/L で生分解度試験を 28 日間行った結果、BOD 分解度は
183 0%、2%、0%、HPLC 分解度は 48%、54%、48%であった。表 1-4 に 28 日間後の分析
184 結果をまとめた。この表によれば(水+被験物質系)では 95%残留で(汚泥+被験物質)系で
185 50%程度の残留に変化していることから、BOD は約 0%でも微生物による分解が起きてい
186 ると考えられる。28 日間後の HPLC 分解度が約 50%であるため、技術ガイダンスに従っ
187 て、水中での生分解半減期を 10 日とする。

188 一方、1-1で述べたように分解度試験ではジエチルアミンの生成により pH がアルカリ
189 性になったため、ジエチルアミンが残留している。しかし、実環境中ではアルカリ性になら
190 ずジエチルアミンが残留しないと考えられるため、全体として分解が進み半減期がより短
191 くなる可能性がある点に留意する必要がある。

192

193

表 1-4 生分解試験の 28 日間後の分析結果

| | | (水+被験物質系) | (汚泥+被験物質)系 | | | | 理論量 (mg) |
|------------------|------|-----------|------------|-------|-------|-------------------------|----------|
| | | No. 1 | No. 2 | No. 3 | No. 4 | | |
| BOD | (mg) | 0.0 | 0.0 | 1.4 | 0.0 | 68.1 (NO ₂) | |
| | (%) | | | | | | |
| DOC 残留 | (mg) | 1.5 | 5.8 | 6.1 | 5.6 | 12.2 | |
| | (%) | 12 | 48 | 50 | 46 | | |
| 被験物質残留 (HPLC) | (mg) | 28.5 | 15.6 | 13.9 | 15.6 | 30.0 | |
| | (%) | 95 | 52 | 46 | 52 | | |
| ジエチルアミン生成 (HPLC) | (mg) | 0.8 | 7.6 | 8.0 | 7.1 | 14.8 | |
| | (%) | 5 | 51 | 54 | 48 | | |
| 二硫化炭素生成 (HPLC) | (mg) | 0.06 | 0.03 | 0.02 | 0.05 | 15.4 | |
| | (%) | 0.4 | 0.2 | 0.1 | 0.3 | | |

194

195 なお、参考情報として ECHA には類似物質のチウラムを対象にした read-across 扱いの
196 測定値が 2 つあった。1 つ目は OECD 301D に従った測定値で、28 日間後の BOD 分解度
197 40% (10.2 mg/L)、20% (2 mg/L)であった。(技術ガイダンスに従って水中での生分解半減
198 期に換算すると 10 日又は 30 日) 2 つ目はドイツの BBA (連邦農林生物科学研究センター)
199 のガイドライン Part IV, Section 5-1 に従った測定値で、半減期が 1.9 日 (河川、池) (初期
200 濃度 1.195 mg/L)、0.7 日 (河川) (初期濃度 0.01626 mg/L) であった。

201 ②-2 加水分解の半減期

202 本物質について水中での加水分解半減期に関する測定値は得られなかった。表 1-4 に
203 よれば (水+被験物質系) は 28 日間後に 95%残留しジエチルアミンが 5%生成しているこ

204 とから加水分解が少し起きていることが確認できるが、HSDB には本物質は環境条件下で
205 は加水分解は非常に遅いため重要な分解機序でないと想定されるとの記載があった。この
206 ため評価Ⅱでは加水分解の半減期を設定しない。

207 なお、参考情報として ECHA には類似物質のチウラムを対象にした read-across 扱いの
208 測定値で US EPA Ref.:161-1 というガイドラインに従った試験で pH=5、pH=7、pH=9 で
209 それぞれ半減期を 68.5 日、3.5 日、6.9 時間という記載があった。

210 ②-3 光分解の半減期

211 本物質について水中での光分解半減期に関する測定値は得られなかった。大気中での記
212 述ではあるが HSDB には本物質は 290 nm 以上の光吸収が低いため、直接光分解されにく
213 く重要な分解機序でないと想定されるとの記載があった。このため評価Ⅱでは光分解半減
214 期を設定しない。

215

216 ③土壌

217 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。また、機序別の半減期に関す
218 る情報も得られなかった。

219 ③-1 生分解の半減期

220 本物質について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
221 は、技術ガイダンスに従って、水中の生分解半減期と同じ 10 日とする。

222 なお、参考情報として ECHA には類似物質のチウラムを対象にした read-across 扱いの
223 測定値で US-EPA 540/9-82-021 に従った試験で土壌生分解の半減期が 2 日という記載や、
224 EU Method C.23 に従った試験で土壌生分解の半減期が 3.7 日 (20 °C Sandy loam)、5.5
225 日 (20 °C Sandy clay loam)、6.8 日 (20 °C Clay)、9.8 日 (10 °C Sandy loam) という
226 記載があった。

227 ③-2 加水分解の半減期

228 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、水中の加水
229 分解半減期と同じく設定しない。

230

231 ④底質

232 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
233 る情報も得られなかった。

234 ④-1 生分解の半減期

235 半減期に関するデータは得られなかったため、底質中での生分解半減期は、技術ガイダ
236 ンスに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 40 日とする。

237 ④-2 加水分解の半減期

238 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、水中の加水
239 分解半減期と同じく設定しない。

240 **2 【付属資料】**

241 **2-1 物理化学的性状等一覧**

242 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

243

244 出典)

245 CRC: Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 90th ed., CRC Press,
246 2009-2010.

247 ECHA: Information on Chemicals – Registered substances.

248 <http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>, (2018-
249 08-10 閲覧).

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

251 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. [http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB)
252 [bin/sis/htmlgen?HSDB](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB), (2018-08-10 閲覧).

253 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
254 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.

255 MITI (1988): ジエチルアミン (試料 No.K-880) の分解度試験成績報告書. 既存化学物質点
256 検, 1988.

257 MITI (1990a): テトラエチルチウラムジスルフィド (被験物質番号 K-862) の微生物によ
258 る分解度試験. 既存化学物質点検, 1990.

259 MITI (1990b): テトラエチルチウラムジスルフィド 被験物質番号 K-862) の物理化学的性
260 状の測定. 既存化学物質点検, 1990.

261 NITE (2010): NITE. カテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測に関する報告書, 2010.

262 OECD (2010): SIDS Initial Assessment Report, BIS(DIMETHYLTHIOCARBAMOYL)
263 DISULFIDE, 2010.

264 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2018-08-10 閲
265 覧).

266 USHPV (2009): U.S. Environmental Protection Agency Hazard Characterization
267 Document, SCREENING-LEVEL HAZARD CHARACTERIZATION, Thiuram
268 Category, September, 2009.

269

270 2-2 その他

271 特になし。

272

| 情報源略称 | 詳細等 |
|-----------|---|
| Aldrich | Sigma-Aldrich試薬カタログ |
| CCD | Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 16th, John Wiley & Sons |
| CRC | CRC Handbook of Chemistry and Physics, 97th, CRC-Press |
| ECHA | Information on Chemicals - Registered substances. |
| EPI Suite | U.S.EPA EPI Suite |
| HSDB | Hazardous Substances Data Bank (HSDB) |
| IUCLID | EU ECB International Uniform Chemical Information Database |
| Merck | The Merck Index, 15th Ed, Merck & Co, RSC Publishing |
| PhysProp | SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009 |
| USHPV | US/HPVチャレンジプログラム |
| 既存点検事業 | 化審法既存点検事業の試験結果 |

基本情報

| | |
|-------------|---|
| PACS_F 等 | 41000 |
| PACS_Name 等 | テトラエチルチウラムジスルフィド(別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA_IN | Thioperoxydicarbonic diamide ([[(H2N)C(S)]2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

分子量

収集データ

| | 情報源名 | 値 | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|----|-----------|---------|----|---|--|
| 1 | Aldrich | 296.54 | | | p.2381 |
| 2 | CCD | | | | |
| 3 | CRC | 296.539 | | - | Physical Constants of Organic Compounds (Section |
| 4 | EPI Suite | 296.52 | | | |
| 5 | HSDB | 296.55 | | Lide, DR (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 81st Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2000, p. 3-320 | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: |
| 6 | IUCLID | | | | |
| 7 | Merck | 296.54 | | - | Monograph Number: 0003364 |
| 8 | PhysProp | 296.54 | | - | p.1 |
| 9 | ECHA | | | | Identification |
| 10 | USHPV | 296.52 | | - | p.7 |
| 11 | 既存点検事業 | 296.55 | | - | K0862 |

基本情報

| | |
|-------------|---|
| PACS_F 等 | 41000 |
| PACS_Name 等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA_IN | Thioperoxydicarbonic diamide ([[(H2N)C(S)]2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

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 Aldrich | 融点 | 69~71 °C | 70 | | | | | | | 2B | × | × | | | p.2381 |
| 2 CCD | 融点 | 65~70 °C | 67.5 | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | | Tetraethylthiuram Disulfide |
| 3 CRC | 融点 | 71.5 °C | 71.5 | - | - | - | - | - | | 2B | ○ | ○ | | | Physical Constants of Organic Compounds (Section 3) |
| 4 EPI Suite | 融点 | 138.92 °C | 138.92 | MPBPWIN | | | | (Q)SAR | | 2C | × | × | | | |
| 5 HSDB | 融点 | 71.5 °C | 71.5 | | | | | | | 2B | ○ | ○ | | | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT: |
| 6 IUCLID | 融点 | >64 °C | 64 | | | | | | | 4A | × | × | | | p.5 |
| 7 Merck | 融点 | 70 °C | 70 | - | - | - | - | - | | 2B | × | × | | | Monograph Number: 0003364 |
| 8 PhysProp | 融点 | 71.5 °C | 71.5 | - | - | - | - | - | | 2B | ○ | ○ | | | p.1 |
| 9 ECHA | 融点 | 71.5 °C | 71.5 | | | 1: reliable without restriction | key study | experimental result | | 4A | × | ○ | | | Exp Key Melting point/freezing point.001 |
| 10 USHPV | 融点 | 69~73 °C | 71 | - | - | - | - | experimental result | | 2B | × | × | | | p.7 |
| 11 既存点検事業 | 融点 | 70 °C[343K(70°C)] | 70 | - | - | - | - | - | | 4A | × | × | | THE MERCK INDEX ELEVENTH EDITION. | K0862 |

基本情報

| | |
|-------------|--|
| PACS F 等 | 41000 |
| PACS Name 等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA IN | Thioperoxydicarbonic diamide (((H2N)C(S))2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

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 CRC | 117 ° C[Boiling point at reduce pressure; pressure in mmHg is indicated by | 117 | 151.7829 | 17 mmHg | - | - | - | - | - | | 2B | ○ | × | | | Physical Constants of Organic Compounds (Section 3) |
| 2 EPI Suite | 386.01 °C | 386.01 | 386 | | MPBPWIN | | | | (Q)SAR | | 2C | × | × | | | |
| 3 HSDB | 117 °C | 117 | 151.7829 | 17 mmHg | | | | | | | 2B | ○ | × | | | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT: p.5 |
| 4 IUCLID | 117 °C | 117 | 151.7829 | 17 mmHg | | | | | | | 4A | × | × | | | p.1 |
| 5 PhysProp | 117 °C | 117 | 151.7829 | 17 mmHg | - | - | - | - | - | | 2B | ○ | × | | | Exp Key Boiling point.001 |
| 6 ECHA | 117 °C | 117 | 151.7829 | 17 mmHg | | | 2: reliable with | key study | experimental result | | 4A | × | × | | | p.7 |
| 7 USHPV | 117 °C | 117 | 151.7829 | 17 mmHg | - | - | - | - | experimental result | | 2B | ○ | × | | | p.7 |
| 8 | 232 °C | 232 | 232 | 760 mmHg | その 他,NOMO5 Estimation Software | - | - | - | estimated by calculation | | 4C | × | × | | NOMO5 Estimation Software. | p.7 |

基本情報

| | |
|-------------|--|
| PACS F 等 | 41000 |
| PACS Name 等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA IN | Thioperoxydicarbonic diamide ((H2N)C(S)2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

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 | 4.2E-04 | 4.2E-04 | 4.2E-04 | 20 °C | MPBPWIN | | | | (Q)SAR | | 2C | × | ○ | 沸点386°C、融点71.5°Cを使用 | | |
| 2 HSDB | 8.7E-4 mmHg | 0.11599 | 8.22E-02 | 25 °C | | | | | estimated by calculation | | 4C | × | × | | | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE: p.5 |
| 3 IUCLID | [Not applicable.] | 単位換算不可 | | | | | | | | | 3 | × | × | | | |
| 4 PhysProp | 0.0000066 1 mmHg | 8.81E-04 | 6.25E-04 | 25 °C | - | - | - | - | estimated by calculation | | 4C | × | × | | NEELY,WB & BLAU,GE (1985). | p.1 |
| 5 ECHA | 2.0E-05 Pa | 2.0E-05 | 1.42E-05 | 25 °C | EU Method A.4, Method A4 specified in Commission Directive 92/69/EEC (which constitutes Annex V of Council Directive 67/548/EEC) | yes (incl. certificate) | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | 4C | ○ | × | | 2005,2005.10.8. | Read across Subs Key Vapour pressure.002 |
| 6 USHPV | 0.097 mmHg | 12.93227 | 9.16772 | 25 °C | その他,NOMO5 Estimation Software | - | - | - | estimated by calculation | | 4C | × | × | | NOMO5 Estimation Software. | p.7 |

基本情報

| | |
|-------------|--|
| PACS_F 等 | 41000 |
| PACS_Name 等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA_IN | Thioperoxydicarbonic diamide (((H2N)C(S))2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

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 CCD | [insoluble] | 単位換算不可 | | | | - | - | - | - | - | | 3 | × | × | | | Tetraethylthiuram Disulfide |
| 2 CRC | [insoluble] | 単位換算不可 | | | | - | - | - | - | - | | 3 | × | × | | | Physical Constants of Organic Compounds (Section 3) etc |
| 3 EPI Suite | 83.06 mg/L[2B以上の値を用いて推定 (2C)] | 83.06 | 77.5370447 | 25 °C | | WSKOWWIN | | | | (Q)SAR | | 2C | × | × | | | |
| 4 HSDB | 4.09 mg/L | 4.09 | 3.82 | 25 °C | | | | | | | | 2B | × | ○ | | | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES: |
| 5 IUCLID | [Practically insoluble in water.] | 単位換算不可 | | | | | | | | | | 3 | × | × | | | p.5 |
| 6 Merck | 0.02 g/100 mL[Practically insol in | 200 | | 25 °C | | | | | | | | 4A | × | × | | | Monograph Number: 0003364 |
| 7 PhysProp | 4.09 mg/L | 4.09 | 3.82 | 25 °C | | | | | | experimental result | | 2B | × | ○ | | NEELY,WB & BLAU,GE (1985). | p.1 |
| 8 ECHA | 4.09 mg/L | 4.09 | 3.81804133 | 25 °C | | | | 2: reliable with restrictions | key study | experimental result | | 4A | × | × | | HSDB,Disulfiram, CAS No. 97-77-8,2010,US National Library of Medicine (NLM) http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB. Yalkowsky, S.H. and He, Yan..Handbook of Aqueous Solubility Data: An Extensive Compilation of Aqueous Solubility Data for Organic,2003,Handbook of Aqueous Solubility Data: An Extensive Compilation of Aqueous Solubility. | Exp Key Water solubility.001 |
| 9 USHPV | 4.09 mg/L | 4.09 | 3.82 | 25 °C | | | | | | experimental result | | 2B | × | ○ | | | p.7 |
| 10 既存点検事業 | ≤ 10 mg/L | 10 | 9.33506438 | 25±1 °C | | OECD TG 105 | | | | experimental result | | 1B | ○ | × | | | K0862 |

基本情報

| | |
|-------------|--|
| PACS F 等 | 41000 |
| PACS_Name 等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA_IN | Thioperoxydicarbonic diamide ((H2N)C(S)2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

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 | 3.67 | 3.67 | | | KOWWIN | | | | (Q)SAR | | 2C | × | × | | | |
| 2 HSDB | 3.88 | 3.88 | | | | | | | | | 2B | ○ | ○ | | | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION p.1 |
| 3 PhysProp | 3.88 | 3.88 | | | - | - | - | - | experimental result | - | 2B | ○ | ○ | | HANSCH,C ET AL. (1995). | p.1 |
| 4 ECHA | 3.88 | 3.88 | | | | | | | experimental result | | 4A | × | × | | | Exp Key Partition coefficient.001 |
| 5 USHPV | 3.88 | 3.88 | | | - | - | - | - | experimental result | - | 2B | ○ | ○ | | | p.7 |

基本情報

| | |
|------------|--|
| PACS_F等 | 41000 |
| PACS_Name等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA_IN | Thioperoxydicarbonic diamide (((H2N)C(S))2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

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 | 6.52 Pa·m ³ /mol | 6.5 | 20 °C | | | | (Q)SAR | | 2C | ○ | × | | | |
| 2 HSDB | 8.3E-5 atm·m ³ /mol | 8.409975 | 25 °C | | | | estimated by calculation | | 4C | × | × | | | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: |
| 3 PhysProp | 0.0000832 atm· m ³ /mol | 8.43024 | 25 °C | | - | - | estimated by calculation | | 4C | × | × | | MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1991). | p.1 |
| 4 USHPV | 0.0000832 atm· m ³ /mol | 8.43024 | | | - | - | estimated by calculation | | 4C | × | × | | U.S. EPA. 2008. Estimation Programs Interface Suite, for Microsoft Windows, v 3.20. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.. | p.7 |
| 5 Henry計算式 | | 0.033 | | | | | EST | H=VP/(WS/MW) | | × | ○ | VP(4.2×10 ⁻⁴), WS(3.82)、 MW(296.52)を用いて計算 | | |

基本情報

| | |
|-------------|--|
| PACS F 等 | 41000 |
| PACS Name 等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA IN | Thioperoxydicarbonic diamide (((H2N)C(S))2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

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 | 18170 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定 | 1.8E+04 | | | | KOCWIN | | | | (Q)SAR | | 2C | ○ | ○ | | | |
| 2 HSDB | Koc | 3100 | 3100 | | | | | | | | estimated by calculation | | 4C | × | × | | | ENVIRONMENTAL FATE: |
| 3 ECHA | Koc | 12899 | 12899 | | | Soil IV: loam | OECD TG 106 | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | 4C | × | × | | | Read across Subs Key Adsorption / desorption.002 |
| 4 | Koc | 6359 | 6359 | | | Soil III: silt loam | OECD TG 106 | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | 4C | × | × | | | Read across Subs Key Adsorption / desorption.002 |
| 5 | Koc | 24526 | 24526 | | | Soil II: loamy sand | OECD TG 106 | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | 4C | × | × | | | Read across Subs Key Adsorption / desorption.002 |
| 6 | Koc | 2245 | 2245 | | | Soil I: sandy loam | OECD TG 106 | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | 4C | × | × | | | Read across Subs Key Adsorption / desorption.002 |
| 7 USHPV | logKoc | 1.967 | 92.68298234 | | | - | - | - | - | - | estimated by calculation | | 4C | × | × | | | p.9 |

基本情報

| | |
|------------|--|
| PACS_F等 | 41000 |
| PACS_Name等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA_IN | Thioperoxydicarbonic diamide (((H2N)C(S))2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

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 | | | | | BCF | | 168.7 L/kg (wet)[28以 上の値を用 いて推定 (2C) 1 | 168.7 | BCFBAFWIN | | | | (Q)SAR | | 2C | ○ | × | | | |
| 2 NITEカテゴリー アプローチ | | | | | logBCF | | 2.36 | 230 | 式1-1: log BCF = 1.05 × log Pow - 1.71 log P = 3.88 | | | | その他(推計値) | カテゴリーII-A | 2C | | ○ | 技術ガイダンスIII(b)による | | |
| 3 Baseline model | | | | | logBCF | | 0.51 | 3.24 | Baseline model v. 02.09 | | | | (Q)SAR | | 2C | | × | 技術ガイダンスIII(b)では不 要 | | |

| | |
|-------------|--|
| PACS F 等 | 41000 |
| PACS Name 等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA IN | Thioperoxydicarbonic diamide ([[H2N]C(S)]2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

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 |
|------|----|---|------|------------|----|-------|-----|-------------|--------------------------|------|---------|-------------------|----|----|--------|
|------|----|---|------|------------|----|-------|-----|-------------|--------------------------|------|---------|-------------------|----|----|--------|

基本情報

| | |
|-------------|--|
| PACS F 等 | 41000 |
| PACS Name 等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA_IN | Thioperoxydicarbonic diamide (((H2N)C(S))2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

環境中運命

収集データ

| 情報源名 | 相 | 機序 | 分解速度定数 | 反応速度定数 | ラジカル濃度 | 半減期 | 分解度 | 統一表記半減期[day] | 測定条件温度 | pH | 試験方法等 | BIOWIN | GLP | reliability | 情報源におけるキースタディの該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | キースタディー該非 (評価Ⅱ) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|-------------|----|------------|----------|--|-------------------------------|---------------------|-----|--------------|--------|----|--|--------------|-----|-------------------------------|------------------|--|---------------------------------|-----------------|----|--|---|
| 1 EPI Suite | 水域 | 生分解 | | | | | | | | | BIOWIN | Weeks-Months | | | | (Q)SAR | Biowin3 Ultimate Biodegradation | × | | | |
| 2 EPI Suite | 大気 | OHラジカルとの反応 | | 3.924139E-10 cm ³ /molec ule/sec | | | | 0.041 | 25 °C | | AOPWIN | | | | | (Q)SAR | | ○ | | | |
| 3 HSDB | 大気 | OHラジカルとの反応 | | 3.9E-10 cm ³ /molec ule/sec | 5E+5 molecule/cm ³ | 0.04 日 | | 4.11E-02 | 25 °C | | | | | | | estimated by calculation | a structure estimation method | × | | SRC | Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation: |
| 4 | 水域 | 加水分解 | | | | | | | | | | | | | | - | | × | | SRC (反応速度) Lyman WJ et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Washington, DC: Amer Chem Soc pp. 7-4, 7-5 (1990) | Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation: |
| 5 | 大気 | 直接光分解 | | | | | | | | | | | | | | - | | × | | Sadtler Res Lab; Sadtler Standard UV Spectra (NA) SRC | Environmental Fate & Exposure: > Environmental Abiotic Degradation: |
| 6 PhysProp | 大気 | OHラジカルとの反応 | | 0.00000000 039241 cm ³ /molec ule/sec | | | | | 25 °C | | | | | | | estimated by calculation | | × | | MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1993) | Atmospheric OH Rate Constant |
| 7 ECHA | 水域 | 加水分解 | 2.42 1/日 | | | 6.9 時間 | | | 25 °C | 9 | その他.US EPA Ref.: 161-1, Hydrolysis Studies | | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 1991 | Read-across Subs Key Hydrolysis.002 |
| 8 | 大気 | OHラジカルとの反応 | | | | 58.875 分 | | | | | AOPWIN | | | 2: reliable with restrictions | key study | estimated by calculation | | × | | other company data, Unnamed, 2010 | Phototransformation in air |
| 9 | 土壌 | 生分解 (好氣的) | | | | 3.7 日[Soil No.: #1] | | | 20 °C | | その他.EU Method C.23 (Aerobic and Anaerobic Transformati on in Soil) | | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 2000 | Read-across Subs Key Biodegradation in soil.002 |
| 10 | 土壌 | 生分解 (好氣的) | | | | 5.5 日[Soil No.: #2] | | | 20 °C | | その他.EU Method C.23 (Aerobic and Anaerobic Transformati on in Soil) | | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 2000 | Read-across Subs Key Biodegradation in soil.002 |

| | |
|------------|---|
| PACS_F等 | 41000 |
| PACS_Name等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA_IN | Thioperoxydicarbonic diamide ([H2N]C(S)]2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

▲環境中運命

収集データ

| 情報源名 | 相 | 機序 | 分解速度定数 | 反応速度定数 | ラジカル濃度 | 半減期 | 分解度 | 統一表記半減期[day] | 測定条件温度 | pH | 試験方法等 | BIOWIN | GLP | reliability | 情報源におけるキースタディの該否 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | キースタディー該否 (評価II) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|------|----|-----------|----------|--------|--------|--------------------------------------|-----|--------------|---------|----|--|--------|-------------------------|-------------------------------|------------------|--|---------|------------------|----|---|---|
| 11 | 土壌 | 生分解 (好氣的) | | | | 6.8 日[Soil No.: #3] | | | 20 °C | | その他.EU Method C.23 (Aerobic and Anaerobic Transformation in Soil) | | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 2000 | Read-across Subs Key Biodegradation in soil.002 |
| 12 | 土壌 | 生分解 (好氣的) | | | | 9.8 日[Soil No.: #1] | | | 10 °C | | その他.EU Method C.23 (Aerobic and Anaerobic Transformation in Soil) | | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 2000 | Read-across Subs Key Biodegradation in soil.002 |
| 13 | 水域 | 加水分解 | | | | [less than one day to several weeks] | | | | 5 | HYDROWIN | | | 2: reliable with restrictions | supporting study | estimated by calculation | | × | | other company data, Unnamed, 2010 | Calc Supporting Hydrolysis.001 |
| 14 | 水域 | 加水分解 | | | | [less than one day to several days] | | | | 7 | HYDROWIN | | | 2: reliable with restrictions | supporting study | estimated by calculation | | × | | other company data, Unnamed, 2010 | Calc Supporting Hydrolysis.001 |
| 15 | 水域 | 加水分解 | | | | <1 日[less than one day] | | | | 9 | HYDROWIN | | | 2: reliable with restrictions | supporting study | estimated by calculation | | × | | other company data, Unnamed, 2010 | Calc Supporting Hydrolysis.001 |
| 16 | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | 1.9 日[pond] | | | 20±2 °C | | その他.BBA (Biologische Bundesanstalt /Federal Biological Research Centre) Guidelines, Part IV, Section 5-1 (December 1990): Abbaubarkeit und Verbleib von Pflanzenschutzmitteln im Wasser/Sediment-System. | | yes (incl. certificate) | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 1992 study report, Unnamed, 1999 | Read-across Subs Key Biodegradation in water and sediment: simulation tests.001 |
| 17 | 水域 | 加水分解 | 0.01 1/日 | | | 68.5 日 | | | 25 °C | 5 | その他.US EPA Ref.: 161-1, Hydrolysis Studies | | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 1991 | Read-across Subs Key Hydrolysis.002 |

| | |
|------------|--|
| PACS_F等 | 41000 |
| PACS_Name等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA_IN | Thioperoxydicarbonic diamide ([[H2N]C(S)]2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

▲環境中運命

収集データ

| 情報源名 | 相 | 機序 | 分解速度定数 | 反応速度定数 | ラジカル濃度 | 半減期 | 分解度 | 統一表記半減期[day] | 測定条件温度 | pH | 試験方法等 | BIOWIN | GLP | reliability | 情報源におけるキースタディの該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | キースタディー該非 (評価II) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|------|----|-----------|---------|--------|--------|--------------|--|--------------|---------|----|--|--------|-------------------------|-------------------------------|------------------|--|---------|------------------|----|---|---|
| 18 | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | 0.7 日 | | | 20±2 °C | | その他,BBA (Biologische Bundesanstalt /Federal Biological Research Centre) Guidelines, Part IV, Section 5-1 (December 1990): Abbaubarkeit und Verbleib von Pflanzenschutzmitteln im Wasser/Sedi | | yes (incl. certificate) | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 1995 | Read-across Subs Key Biodegradation in water and sediment: simulation tests.002 |
| 19 | 水域 | 加水分解 | 0.2 1/日 | | | 3.5 日 | | | 25 °C | 7 | その他,US EPA Ref.: 161-1, Hydrolysis Studies | | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 1991 | Read-across Subs Key Hydrolysis.002 |
| 20 | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | 1.9 日[river] | | | | | その他,BBA (Biologische Bundesanstalt /Federal Biological Research Centre) Guidelines, Part IV, Section 5-1 (December 1990): Abbaubarkeit und Verbleib von Pflanzenschutzmitteln im Wasser/Sedi | | yes (incl. certificate) | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 1992 study report, Unnamed, 1999 | Read-across Subs Key Biodegradation in water and sediment: simulation tests.001 |
| 21 | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | 40 % [O2 consumption] 28 d [10.2 mg/L] | | | | その他,OECD Guideline 301 D (Ready Biodegradability: Closed | | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 1985 | Biodegradation in water: screening tests |

| | |
|------------|--|
| PACS_F等 | 41000 |
| PACS_Name等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA_IN | Thioperoxydicarbonic diamide ([H2N]C(S))2S2, N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

環境中運命

収集データ

| 情報源名 | 相 | 機序 | 分解速度定数 | 反応速度定数 | ラジカル濃度 | 半減期 | 分解度 | 統一表記半減期[day] | 測定条件温度 | pH | 試験方法等 | BIOWIN | GLP | reliability | 情報源におけるキースタディの該非 | 値の種類 | 値の種類の詳細 | キースタディー該非 (評価II) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|------|--------|-----------|--------|--------|--------|--------|-------------------------------------|--------------|---------|----|---|--------|-------------------------|-------------------------------|------------------|--|---------|------------------|----|-----------------------------|--|
| 22 | 水域 | 生分解 (好氣的) | | | | | 20 % [O2 consumption] 28 d [2 mg/L] | | | | その他, OECD Guideline 301 D (Ready Biodegradability: Closed Bottle Test) | | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 1985 | Biodegradation in water: screening tests |
| 23 | 水域 | 光分解 | | | | 8.8 時間 | | | 25 °C | | その他, EPA Guideline Subdivision N 161-2 (Photodegradation Studies in Water) | | yes | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 1990 | Read-across Subs Key Phototransformation in water.002 |
| 24 | 水域 | 光分解 | | | | 4.1 時間 | | | 20 °C | | その他, OECD Guideline draft (Phototransformation of Chemicals in Water - Direct and | | yes (incl. certificate) | 2: reliable with restrictions | key study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 1994 | Read-across Subs Key Phototransformation in water.001 |
| 25 | 土壌 | 生分解 (好氣的) | | | | 2 日 | | | | | その他, US-EPA 540/9-82-021 | | yes | 2: reliable with restrictions | supporting study | read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate) | | × | | study report, Unnamed, 1995 | Read-across Subs Supporting Biodegradation in soil.001 |
| 26 | 既存点検事業 | 水域 | 生分解 | | | | 48 % [28日後のHPLCによる結果] | | 25±1 °C | | OECD TG 301C | | yes (incl. certificate) | | | experimental result | | ○ | | | |
| 27 | 既存点検事業 | 水域 | 生分解 | | | | 54 % [28日後のHPLCによる結果] | | 25±1 °C | | OECD TG 301C | | yes (incl. certificate) | | | experimental result | | ○ | | | |
| 28 | 既存点検事業 | 水域 | 生分解 | | | | 48 % [28日後のHPLCによる結果] | | 25±1 °C | | OECD TG 301C | | yes (incl. certificate) | | | experimental result | | ○ | | | |
| 29 | | 水域 | 生分解 | | | | 0 % [28日後のBODIによる結果] | | 25±1 °C | | OECD TG 301C | | yes (incl. certificate) | | | experimental result | | × | | | |
| 30 | | 水域 | 生分解 | | | | 2 % [28日後のBODIによる結果] | | 25±1 °C | | OECD TG 301C | | yes (incl. certificate) | | | experimental result | | × | | | |
| 31 | | 水域 | 生分解 | | | | 0 % [28日後のBODIによる結果] | | 25±1 °C | | OECD TG 301C | | yes (incl. certificate) | | | experimental result | | × | | | |

参考情報

| | |
|-------------|--|
| PACS F 等 | 41000 |
| PACS Name 等 | テトラエチルチウラムジスルフィド (別名ジスルフィラム) |
| CASRN | 97-77-8 |
| CA_IN | Thioperoxydicarbonic diamide (([H2N]C(S))2S2), N,N,N',N'-tetraethyl- |
| その他番号 | |
| その他名称 | |
| SMILES | CCN(C(=S)SSC(=S)N(CC)CC)CC |

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 | 値の種類の詳細 | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|----------|---------------------------|-----|--------------------|------------------|--------------|-------------------------|---------------------------------|------------------|---------------------|---------|----|----|---|
| 1 ECHA | not readily biodegradable | 40% | O_2 consumption | | OECD TG 301D | | 1: reliable without restriction | key study | experimental result | | | | Read across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.001 |
| 2 | not readily biodegradable | 20% | O_2 consumption | | OECD TG 301D | | 1: reliable without restriction | key study | experimental result | | | | Read across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.001 |
| 3 既存点検事業 | - | 54% | Test mat. analysis | (ジエチルアミン; 二硫化炭素) | OECD TG 301C | yes (incl. certificate) | - | - | experimental result | | | | K0862 |
| 4 | - | 48% | Test mat. analysis | (ジエチルアミン; 二硫化炭素) | OECD TG 301C | yes (incl. certificate) | - | - | experimental result | | | | K0862 |
| 5 | - | 0% | O_2 consumption | (ジエチルアミン; 二硫化炭素) | OECD TG 301C | yes (incl. certificate) | - | - | experimental result | | | | K0862 |
| 6 | - | 2% | O_2 consumption | (ジエチルアミン; 二硫化炭素) | OECD TG 301C | yes (incl. certificate) | - | - | experimental result | | | | K0862 |
| 7 | - | 0% | O_2 consumption | (ジエチルアミン; 二硫化炭素) | OECD TG 301C | yes (incl. certificate) | - | - | experimental result | | | | K0862 |
| 8 | - | 48% | Test mat. analysis | (ジエチルアミン; 二硫化炭素) | OECD TG 301C | yes (incl. certificate) | - | - | experimental result | | | | K0862 |