

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

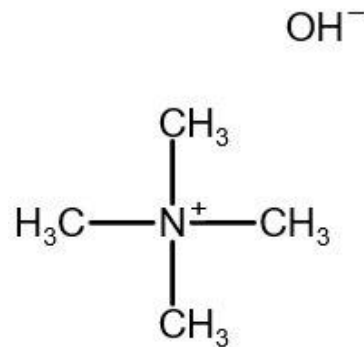
優先評価化学物質のリスク評価(一次)

人健康影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド

優先評価化学物質通し番号 17



令和5年9月

経済産業省

目 次

23		
24		
25	1 評価対象物質の性状.....	1
26	1-1 評価対象物質の設定.....	1
27	1-2 物理化学的性状及び濃縮性.....	3
28	1-3 分解性	7
29	2 【付属資料】	10
30	2-1 物理化学的性状等一覧.....	10
31	2-2 その他	10
32		

33 1 評価対象物質の性状

34 本章では、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
35 タを示す。

36

37 1-1 評価対象物質の設定

38 優先評価化学物質通し番号 17 である「テトラメチルアンモニウム＝ヒドロキシド」（以
39 下、「TMAH」という。）に関して、「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用
40 について」3-1 (2) の規定により、テトラメチルアンモニウム＝ヒドロキシドの構成部分で
41 あるテトラメチルアンモニウムを構造の一部として有するもの（オニウム塩に限る）につい
42 ても優先評価化学物質の規定を適用することとなる。そこで令和 2 年度第 1 回化審法のリ
43 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 2 年 10 月 14
44 日）（以下、レビュー会議）において、以下のように評価対象物質の検討を行った。

45 優先評価化学物質通し番号 17 として化審法の製造・輸入数量等が届出されている物質の
46 CAS 登録番号は、8 種類あった。表 1-1 にそれらの CAS 登録番号及び名称を示す。

47

48

表 1-1 優先評価化学物質通し番号 17 に関する届出物質

No	CAS 登録番号	物質名称
1	75-59-2	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
2	75-57-0 ^(※)	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, chloride (1:1)
3	373-68-2 ^(※)	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, fluoride (1:1)
4	10581-12-1 ^(※)	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, acetate (1:1)
5	58345-96-3 ^(※)	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, carbonic acid (1:1)
6	79723-02-7 ^(※)	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, 1,2-benzenedicarboxylate (1:1)
7	139657-01-5 ^(※)	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, 2-pyridinecarboxylate (1:1)
8	CAS 記載なし	-

49 ※：優先評価化学物質番号 17 の構成部分であるテトラメチルアンモニウムを構造の一部として有するオニウム塩

50

51 レビュー会議において平成 29 年度の環境排出量¹及びその合計に対する割合を評価対象
52 物質の検討に用いた。なお、当該物質の評価対象は人健康であることから、環境排出量は大
53 気と水域への排出量を合計した値とした。平成 29 年度の環境排出量合計に対し、CAS 登録
54 番号：75-59-2 の割合が 99.83%を占めていることがわかった。

¹ 現段階では、詳細用途の排出係数を用いて排出量の推計を行うために必要な蒸気圧及び水溶解度が設定されていないことから、スクリーニング評価用の排出係数を用いた推計を行った。なお、スクリーニング評価用の排出係数は、詳細用途の排出係数を幾何平均して作られているため、環境排出量の傾向は概ね変わらないと考えられる。化審法のリスク評価に用いる排出係数一覧表の公表について（経済産業省、平成 25 年 11 月 1 日）
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/ra_emissionfactor.html#Screening

55

56 分解性に関しては、CAS 登録番号 75-59-2 は化審法の既存点検試験より、分解度が BOD
57 で 96%、TOC で 98%、HPLC で 100%であり、良分解性と判定されていることから、変化物
58 を評価対象物質とする必要はない。

59

60 以上のことから、本評価における TMAH の評価対象物質²は、環境排出量の大半を占める
61 CAS 登録番号 75-59-2 とする。

² 得られる性状(有害性、分解性・生物蓄積性・物理化学的性状等)データによっては、有害性評価と暴露評価において評価対象物質が異なる場合がある。その場合、リスク評価を進める中で、情報収集・整備をしながら評価対象物質を見直すことがありうる。

62 1-2 物理化学的性状及び濃縮性

63 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、表中の下線
64 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。

65

66

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	—	91.15	—	91.15
融点	°C	66.5 ¹⁾	測定範囲の平均値	66.5 ¹⁾
沸点	°C	— ¹⁾	熱分解する	360.42 ¹⁾
蒸気圧	Pa	2.44 × 10 ⁻⁵ 5)	20°Cでの推計値	2.333 ⁴⁾
水に対する溶解度	mg/L	1.0 × 10 ⁶ 1)	水に混和	1.0 × 10 ⁶ 1)
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	-1.4 ¹⁾	20°Cでの測定範囲の上限値	1.4 ¹⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	3.41 × 10 ⁻¹¹ 3)	20°Cでの推計値	3.41 × 10 ⁻¹¹ 3)
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	563 ¹⁾	土壌での測定値	258 ¹⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	3.2 ^{2,3)}	推計値	3.162 ³⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	1 ⁶⁾	logPow と BCF から設定	1 ⁶⁾
酸解離定数(pKa)	—	-1.7 ⁷⁾	水中でイオン解離するが、アンモニウムイオンには酸解離性基はない	- ⁸⁾

67 ※令和2年度第2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
68 (令和2年12月16日)で了承された値

- 69 1) ECHA
70 2) SIDS(2006)
71 3) EPI Suite
72 4) Aldrich

- 5) PhysProp
6) MHLW, METI, MOE(2014)
7) SPARC
8) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない

73

74

75

76 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

77 ① 融点

78 評価Ⅰで採用した値は、ECHA に記載された EU Method A.1 、 OECD TG 102 および EPA
79 OPPTS 830.7200 に従った示差走査熱量測定により得られた値の範囲(63-70℃)の平均値
80 (66.5℃)である。その他の信頼性の定まった情報源には、Merck(2019)に記載されていた値
81 (63 ℃)や SIDS(2006)に記載されていた TMAH 五水和物の値(63 ℃)もある。

82 評価Ⅱにおいては、測定結果として ECHA に記載された示差走査熱量測定により得られ
83 た値の範囲(63-70℃)の平均値である 66.5℃を用いる。

84

85 ② 沸点

86 評価Ⅰで採用した値は、EPI Suite の MPBPWIN(v1.43)による推計値(360.42 ℃)である。そ
87 の他の信頼性の定まった情報源としては、Aldrich に記載された値(100 ℃)がある。しかしな
88 がら、SIDS(2006)には、TMAH 五水和物、三水和物、一水和物が 135-140 ℃で分解して沸点
89 は測定されないと記載がある。また、その他の情報源として、ECHA には、EU Method A.2 、
90 OECD TG 103 および EPA OPPTS 830.7220 に従った示差走査熱量測定では、100 ℃で沸騰せ
91 ず分解が始まったため沸点の測定ができなかったと記載がある。

92 そのため、評価Ⅱにおいては、値を設定しない。

93

94 ③ 蒸気圧

95 評価Ⅰで採用した値は、Aldrich に記載された 20℃での値(2,333 Pa)である。この値は、
96 TMAH 水溶液の蒸気圧であり、TMAH の蒸気圧ではなく水の蒸気圧と考えられる。その他
97 の信頼性の定まった情報源としては、PhysProp には、25 ℃での推計値(3.44×10^{-5} Pa)を 20 ℃
98 に補正した値(2.44×10^{-5} Pa)がある。SIDS(2006)には、MPBWIN による 25 ℃での推計値(1.55
99 $\times 10^{-4}$ Pa)を 20 ℃に補正した値(1.10×10^{-4} Pa)がある。また、その他の情報源として、ECHA
100 には、EU Method A.4 、 OECD TG 104 および EPA OPPTS 830.7950 に従った等温熱重量分析
101 法では、加熱中に分解が始まり蒸気圧の測定ができなかったと記載がある。

102 なお、当該物質の情報ではないが、CAS 登録番号:75-57-0 のテトラメチルアンモニウムク
103 ロリド (以下 TMAC とする) では、ECHA に EU Method A.4 、 OECD TG 104 および EPA
104 OPPTS 830.7950 に従った等温熱重量分析法により得られた、20 ℃での蒸気圧の範囲(<1.30
105 $\times 10^{-8}$ Pa)の記載がある。

106 そのため、評価Ⅱにおいては、TMAH の蒸気圧の測定が困難であることから、TMAC の
107 蒸気圧の範囲($<1.30 \times 10^{-8}$ Pa)も考慮すると、TMAH も同様に非常に蒸気圧が低いと考えられ
108 るので、PhysProp に記載された 25 ℃での推計値を 20 ℃に補正した値である 2.44×10^{-5} Pa
109 を用いる。

110

111 ④ 水に対する溶解度

112 評価Ⅰで採用した値は、ECHA に記載された EU Method A.6 、 OECD TG 105 および EPA
113 OPPTS 830.7840 による 20 °C での水溶解度の範囲($>1.00 \times 10^6$ mg/L)の下限値(1.0×10^6 mg/L)
114 である。また、同情報源には、水に混和すると記載がある。その他の信頼性の定まった情報
115 源としては、PhysProp には、25 °C での推計値(1.00×10^6 mg/L)を 20 °C に補正した値($9.34 \times$
116 10^5 mg/L)がある。SIDS(2006)には、25 °C での推計値(1.00×10^6 mg/L)を 20 °C に補正した値
117 (9.34×10^5 mg/L)がある。

118 そのため、評価Ⅱにおいては、水に混和するとの記載があり、ECHA に記載された EU
119 Method A.6 、 OECD TG 105 および EPA OPPTS 830.7840 による 20 °C での水溶解度の範囲
120 ($>1.00 \times 10^6$ mg/L) があることから、 1.00×10^6 mg/L を用いる。

121

122 ⑤ logPow

123 評価Ⅰで採用した値について、ECHA に記載された EU Method A.8 、 OECD TG 107 およ
124 び EPA OPPTS 830.7550 による 20 °C での logPow の範囲(<-1.4)の上限値は -1.4 であるが、
125 手違いにより実際の推計に用いた値は 1.4 であった。その他の信頼性の定まった情報源とし
126 ては、PhysProp や SIDS(2006)には、推計値(-2.47)がある。

127 評価Ⅱにおいては、測定結果として ECHA に記載された EU Method A.8 、 OECD TG 107
128 および EPA OPPTS 830.7550 による 20 °C での logPow の範囲(<-1.4)の上限値である -1.4 を
129 用いる。

130

131 ⑥ ヘンリー係数

132 評価Ⅰで採用した値は、EPI Suite の HENRYWIN (v3.2.0)による 20 °C での推計値($3.41 \times$
133 10^{-11} Pa \cdot m³/mol)である。その他の信頼性の定まった情報源としては、PhysProp や SIDS(2006)
134 には、25 °C での推計値(4.41×10^{-11} Pa \cdot m³/mol)が記載されている。

135 そのため、評価Ⅱにおいては、EPI Suite による 20 °C での推計値(3.41×10^{-11} Pa \cdot m³/mol)を
136 用いる。

137

138 ⑦ Koc

139 評価Ⅰで採用した値は、ECHA に記載された OECD TG 106 による値(258 L/kg)である。そ
140 の他の信頼性の定まった情報源としては、SIDS(2006)に KOCWIN による推計値(20.7 L/kg)
141 が記載されている。また、その他の情報源として、ECHA には、3 つの異なる土壌(Loamy
142 sand, Sandy loam, Clay)を用いて、10 mg/L 溶液の TMAH 五水和物を使用した場合の Koc が
143 記載されており、それぞれ 35 L/kg, 258 L/kg, 452 L/kg である。更に同じ情報源において、異
144 なる濃度 (0.25, 1.0, 2.5, 10, 25 mg/L) の TMAH 五水和物を使用して、吸着等温式により算
145 出した 3 つの土壌(Loamy sand, Sandy loam, Clay)における Koc が記載されており、それぞれ
146 87.3 L/kg, 585 L/kg, 1017 L/kg である。これらの平均が 563 L/kg である。

147 そのため、評価Ⅱにおいては、ECHA に記載された OECD TG 106 によるもので、吸着等
148 温式により算出した 3 つの土壌における Koc の平均値 (563 L/kg) を用いる。

149

150 ⑧ BCF

151 評価Ⅰで採用した値は、EPI Suite の BCFBAF(v3.01)による推計値(3.162 L/kg)である。そ
152 の他の信頼性の定まった情報源としては、SIDS (2006)にも同値が記載されており、
153 HSDB(2014)には推計値(3 L/kg)の記載がある。

154 そのため、評価Ⅱにおいては、SIDS (2006)にも記載されている推計値を有効数字 2 桁に
155 した(3.2 L/kg) を用いる。

156

157 ⑨ BMF

158 評価Ⅰで採用した値は、logPow (1.4) 及び BCF (3.162 L/kg) から化審法における優先評価
159 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」という。) に従っ
160 て設定した値(1)である。また、他の信頼性の定まった情報源から BMF の測定値は得られな
161 かった。

162 そのため、評価Ⅱにおいては、logPow (-1.4) 及び BCF (3.2 L/kg)から設定した値 (1) を
163 用いる。

164

165 ⑩ 酸解離定数

166 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
167 まった情報源から測定値は得られていない。その他の情報源において、ECHA では、TMAH
168 は水中で完全にテトラメチルアンモニウムイオンとヒドロキシドイオンに解離するとの記
169 載があり、環境条件下では 100%イオンとして存在していると考えられる。また、イオン解
170 離したテトラメチルアンモニウムイオンは 4 級アンモニウムイオンであり、pH0~14 の範
171 囲においてプロトンの放出や受け取りをする酸解離性の基はなく、SPARC でも pH0~14 の
172 範囲において pKa 値は存在しないと記載されている。

173 そのため、評価Ⅱにおいては、水中でイオン解離するが、アンモニウムイオンには酸解
174 離性基はないということで、酸解離定数は存在しない。

175 1-3 分解性

176 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

177

178

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	3
		オゾンとの反応	NA
		硝酸ラジカルとの反応	NA
水中	水中における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	5
		加水分解	-
		光分解	NA
土壌	土壌における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	5
		加水分解	-
	底質	底質における総括分解半減期	
機序別の半減期		生分解	20
		加水分解	-

179 ※令和 2 年度第 2 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
180 (令和 2 年 12 月 16 日) で了承された値

181 1) HSDB(2014)

5) ECHA

182 2) SIDS(2006)

NA: 情報が得られなかったことを示す

183 3) MHLW, METI, MOE(2014)

-: 考慮する必要がないと考えられることを示す

184 4) MITI(2001)

185

186 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
187 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。

188

189 ①大気

190 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
191 ても、オゾン及び硝酸ラジカルとの反応に関する情報は得られなかった。直接光分解につい
192 ては、HSDB(2014)において、TMAH は、290 nm を超える波長の光を吸収せず、大気中での
193 直接光分解は起こりにくいとの記述がある。

194 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

195 大気中における OH ラジカルとの反応速度定数に関しては、HSDB(2014)に、大気中 OH
196 ラジカル濃度が技術ガイダンスと同じ 5×10^5 molecule/cm³ で、反応速度定数は、 5.1×10^{-12}
197 cm³/molecule-sec と記載がある。また、SIDS(2006)には、大気中 OH ラジカル濃度が 1.5×10^6
198 molecule/cm³ で、反応速度定数は、 5.0592×10^{-12} cm³/molecule-sec と記載がある。

199 評価Ⅱでは、大気中 OH ラジカル濃度が技術ガイダンスと同じ 5×10^5 molecule/cm³ で、反
200 応速度定数が 5.1×10^{-12} cm³/molecule-sec で算出した半減期の 3 日を用いる。

201

202 ②水中

203 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、生分解と加水分解の機序別
204 の半減期に関する情報が得られた。

205 ②-1 生分解の半減期

206 MITI (2001)に、OECD TG 301C による報告があり、被験物質濃度 100 mg/L、活性汚泥濃
207 度 30 mg/L で 14 日間試験を行った結果、BOD 分解度、TOC 分解度、GC 分解度はそれぞれ
208 96%、98%、100%であり、良分解性と判定されている。また、ECHA には、OECD TG 301B
209 による報告があり、被験物質濃度 90 mg/L で 14 日間試験を行った結果、分解度は 100%で
210 あった。

211 これらの情報を踏まえ、評価Ⅱでは、MITI (2001)の結果から技術ガイダンスに従って求め
212 た 5 日を、水中での生分解半減期として用いる。

213 ②-2 加水分解の半減期

214 HSDB(2014)に、環境条件下で加水分解する官能基がないため、環境中で加水分解すると
215 は考えにくいと記載がある。従って、加水分解を受けやすい基を有していないと考えられる
216 ことから、加水分解は TMAH の分解に寄与しないと考えられる。

217

218 ③土壌

219 土壌中での総括分解半減期及び機序別の半減期に関する情報は得られなかった。

220 ③-1 生分解の半減期

221 半減期に関するデータは得られなかったため、評価Ⅱでは、土壌中での生分解半減期は技
222 術ガイダンスに従って、水中の生分解半減期と同値である 5 日とする。

223 ③-2 加水分解の半減期

224 HSDB(2014)に、環境条件下で加水分解する官能基がないため、環境中で加水分解すると
225 は考えにくいと記載がある。従って、加水分解を受けやすい基を有していないと考えられる
226 ことから、加水分解は TMAH の分解に寄与しないと考えられる。

227

228 ④底質

229 底質中での総括分解半減期及び機序別の半減期に関する情報は得られなかった。

230 ④-1 生分解の半減期

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

233 ④ -2 加水分解の半減期

234 HSDB(2014)に、環境条件下で加水分解する官能基がないため、環境中で加水分解する
235 とは考えにくいと記載がある。従って、加水分解を受けやすい基を有していないと考えら
236 れることから、加水分解は TMAH の分解に寄与しないと考えられる。

237 **2 【付属資料】**

238 **2-1 物理化学的性状等一覧**

239 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

240

241 Aldrich:<https://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/sial/331635?lang=ja®ion=JP>(2020.11.4
242 閲覧)

243 ECHA:Tetramethylammoniumhydroxide-scientificproperties

244 <https://echa.europa.eu/brief-profile/-/briefprofile/100.000.803>(2020.11.4 閲覧)

245 HSDB: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/source/hsdb/8160>(2020.11.4 閲覧)

246 Merck:<https://www.rsc.org/Merck-Index/monograph/m10641/tetramethylammonium>

247 hydroxide?q=authorize(2019.12.16 閲覧)

248 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.

250 MITI(2001): テトラメチルアンモニウムヒドロキシド (披験物質番号 K-1635) の微生物による分解度試験. 既存化学物質点検, 2001..

252 OECD(2006):SIDS Initial Assessment Report, Tetramethylammonium hydroxide. 2006.

253 PhysProp: SRC PhysProp Database

254 SPARC: SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry(2019.12.13 閲覧)

255

256 **2-2 その他**

257 特になし。

258

情報源略称	詳細等
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
ECHA	Information on Chemicals – Registered substances.
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
Merck	The Merck Index, 15th Ed, Merck & Co, RSC Publishing
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SIDS	OECD: SIDSレポート
SPARC	SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果

基本情報

PACS F 等	17002
PACS Name 等	テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド
CASRN	75-59-2
CA IN	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(O)(C)(C)C

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	91.15			p.2403
2	Merck	91.15		-	Monograph Number: 0009224
3	PhysProp	91.15		-	p.1
4	SIDS	91.15			p.6
5	既存点検事業	91.15	物理化学性状の測定	-	K1635
6	既存点検事業	91.15	微生物による分解度試験	-	K1635

基本情報

PACS F 等	17002
PACS Name 等	テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド
CASRN	75-59-2
CA IN	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(O)(C)(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	125.94 °C	125.94	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2 Merck	融点	63 °C	63	-	-	-	-	-		2B	×	×			Monograph Number: 0009224
3 ECHA	融点	63~70 ° C[Melting range 336- 343 K]	66.5	OECD TG 102	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	○		2013,2013.2.13.	Exp Key Melting point/freezing point.001
4 SIDS	融点	63 °C[a solid pentahydra te]	63			2: reliable with restrictions	key study			2A	×	×			p.7, Dossier p.35
5 既存点検事業	融点	63 °C	63	-	-	-	-	-		4A	×	×		The Merck Index (12th edition).	K1635

基本情報

PACS_F等	17002
PACS_Name等	テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド
CASRN	75-59-2
CA_IN	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(O)(C)(C)C

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	100 °C[ACS reagent]	100									4A	x	x			p.2403
2 EPI Suite	360.42 °C	360.42			MPBPWIN				(O)SAR		2C	○	x			
3 ECHA	100 °C[Decomp. temp: 373 K] It was technically not possible to determine the boiling point. In a differential scanning calorimetry study (in accordance with EC A.2, OECD 103 and EPA OPPTS 830.7220 and in compliance with GLP), decomposition of the substance started at 100°C, before the boiling point was reached.	単位換算不可			OECD TG 103	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	x	○		2013,2013.2.13.	Exp Key Boiling point.001
4 SIDS	[Decomposition at 135-140 °C]	単位換算不可				no data	2: reliable with restrictions	key study			3	x	x			p.7, Dossier p.35
5 既存点検事業	[測定不可 (入手試料が水溶液であるため)]	単位換算不可			-	-	-	-	-		3	x	x			K1635

基本情報

PACS F 等	17002
PACS Name 等	テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド
CASRN	75-59-2
CA IN	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(O)(C)(C)C

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価 I)	キースタディ-該非 (評価 I)	キースタディ-該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	17.5 mmHg[10 wt. % in H2O]	2333.1414	2333.1414	20 °C							2B	○	×			p.2403
2 Aldrich	17.5 mmHg[25 wt. % in H2O]	2333.1414	2333.1414	20 °C							2B	○	×			p.2403
3 Aldrich	17.5 mmHg[25 wt. % in methanol]	2333.1414	2333.1414	20 °C							2B	○	×			p.2403
4 EPI Suite	0.000143 Pa[2C以下の値を用いて推定 (4)]	0.000143	1.01E-04	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		4C	×	×			
5 PhysProp	0.00000258 mmHg	3.44E-05	2.44E-05	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	×	○		NEELY,WB & BLAU,GE (1985).	p.1
6 ECHA	[no vapour pressure could be determined]	単位換算不可			OECD TG 104	yes	1: reliable without restriction	weight of evidence	experimental result		3	×	×		2013,2013.2.13.	Exp WoE Vapour pressure.002
7 SIDS	0.00000155 hPa	0.000155	1.10E-04	25 °C	MPBPWIN		2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation	MPBPWIN v1.41	4C	×	×			p.7, Dossier p.36

基本情報

PACS F 等	17002
PACS Name 等	テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド
CASRN	75-59-2
CA IN	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(O)(C)(C)C

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	48870 mg/L[2B以上 の値を用いて 推定 (2C)]	48870	45620.4596	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2 PhysProp	1000000 mg/L	1000000	933506.438	25 °C		-	-	-	-	estimated by calculation		4C	×	×		NEELY,WB & BLAU,GE (1985).	p.1
3 ECHA	>1000 g/L	1000000	1000000	20 °C	14	OECD TG 105	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	○		2013,2013.2.13.	Exp Key Water solubility.001
4 SIDS	1000 g/L	1000000	933506.438	25 °C		WSKOWWIN		2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation	WSKOW v1.41	4C	×	×			p.7, Dossier p.37
5 既存点検事業	≥275 g/L	275000	275000	20±0.5 °C		その他,入手先 添付資料の純度 27.5%より算出 した	-	-	-	estimated by calculation		4C	×	×			K1635

基本情報

PACS F 等	17002
PACS Name 等	テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド
CASRN	75-59-2
CA IN	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(O)(C)(C)C

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	-2.47	-2.47			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2 PhysProp	-2.47	-2.47			-	-	-	-	experimental result	-	2B	×	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1995).	p.1
3 ECHA	<-1.4[n=6]	-1.4	20 °C	7	OECD TG 107	yes			experimental result		1A	○	○		2013,2013.2.13.	Exp Key Partition coefficient.001
4 SIDS	-2.47	-2.47			KOWWIN		2: reliable with restriction s	key study	estimated by calculation	KOWWIN v1.67	4C	×	×			p.7, Dossier p.36

基本情報

PACS F 等	17002
PACS Name 等	テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド
CASRN	75-59-2
CA IN	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(O)(C)(C)C

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 I)	キースタ ディ該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	40.96 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定 (2C)]	40.96				KOCWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2 ECHA	Koc	452[Speyer 6S (Clay)-48 h]	452	20±2 °C			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	×		2013,2013.2.13.	Exp Key Adsorption / desorption.001
3 ECHA	Koc	258[Speyer 2.3 (Sandy loam)- 48 h]	258	20±2 °C			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	×		2013,2013.2.13.	Exp Key Adsorption / desorption.001
4 ECHA	Koc	35[Speyer 2.2 (Loamy sand)- 48 h]	35	20±2 °C			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	×		2013,2013.2.13.	Exp Key Adsorption / desorption.001
5 ECHA	Koc	1017[Speyer 6S (Clay)-48 h]	1017	20±2 °C			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	×		2013,2013.2.13.	Exp Key Adsorption / desorption.001
6 ECHA	Koc	585[Speyer 2.3 (Sandy loam)- 48 h]	585	20±2 °C			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	×		2013,2013.2.13.	Exp Key Adsorption / desorption.001
7 ECHA	Koc	87.3[Speyer 2.2 (Loamy sand)-48 h]	87.3	20±2 °C			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	×		2013,2013.2.13.	Exp Key Adsorption / desorption.001
8 ECHA	Koc	546 mL/g[The average Koc is 546 mL/g]	563	20±2 °C			OECD TG 106	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	×	○		2013,2013.2.13.	Exp Key Adsorption / desorption.001
9 SIDS	Koc	20.7	20.7				KOCWIN		2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation	PCKOCWIN v1.66	4C	×	×			Dossier p.39-40

基本情報

PACS F 等	17002
PACS Name 等	テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド
CASRN	75-59-2
CA IN	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(O)(C)(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	3.41E-11 Pa· m ³ /mol	3.41E-11	20 °C				(Q)SAR		2C	○	○			
2 PhysProp	4.35E-16 atm· m ³ /mol	4.41E-11	25 °C		-	-	estimated by calculation	-	4C	×	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1991).	p.1
3 SIDS	0.000000000044 Pa· m ³ /mol	4.4E-11	25 °C		2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation	HENRYWIN v3.10	4C	×	×			p.7; SIDS Dossier p.40

基本情報

PACS_F等	17002
PACS_Name等	テトラメチルアンモニウムヒドロキシド
CASRN	75-59-2
CA_IN	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(O)(C)C

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	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		3.162 L/kg (wet)[2B以 上の値を用 いて推定 (2C)]	3.162	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	○	○			
2 SIDS					BCF		3.162 L/kg (wet)	3.162	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	×	○			
3 HSDB					BCF		3 L/kg	3					estimated by calculation		2C	×	×			

基本情報

PACS F 等	17002
PACS Name 等	テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド
CASRN	75-59-2
CA_IN	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(O)(C)(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 ECHA		In accordance with Section 2 of REACH Annex XI, the dissociation constant study was not performed as testing is technically not possible. An expert statement has been issued in accordance with OECD 112 and EPA OPPTS 830.7370 and in compliance with GLP. The test substance is a quaternary ammonium salt which completely dissociates in water. The dissociation of the salt is not an equilibrium and therefore the dissociation constant of the test substance could not be determined.				OECD Guideline 112 EPA OPPTS 830.7370	yes	1 (reliable without restriction)				○		2012	Dissociation constant 001 Key
2 SPARC		There are not pKas in the range 0 - 14 for this molecule. Please use single pKa and use carbon options if needed. OR the molecule had so many ionization sites that the calculation timed out.								estimated by calculation		○			

基本情報

PACS_F等	17002
PACS_Name等	テトラメチルアンモニウム=ヒドロキソド
CASRN	75-59-2
CA_IN	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(O)(C)C

環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記半減期(day)	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	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 SIDS	大気	OHラジカルとの反応		5.0592×10^{-12} cm ³ /molecule/sec	1500000 molecule/cm ³	A half-life of TMAH by the reaction with OH radical in air was calculated to be 2.1 days (50.7 hr; 12-hr/days) with the values of 1.5×10^6 molecule/cm ³ and 5.0592×10^{-12} cm ³ /molecule/sec for the OH radical concentration and the reaction rate constant with radical, respectively.		1.06										×		GERI (Chemicals Evaluation and Research Institute), Japan (2005e). AOPWIN v1.91 calculation, unpublished data.	
2 HSDB	大気	OHラジカルとの反応		5.1×10^{-12}	500000 molecule/cm ³	The rate constant for the vapor-phase reaction of tetramethylammonium hydroxide with photochemically-produced hydroxyl radicals has been estimated as 5.1×10^{-12} cu cm/molecule-sec at 25 °C(SRC) using a structure estimation method. This corresponds to an atmospheric half-life of about 2 days at an atmospheric concentration of 5×10^7 hydroxyl radicals per cu cm.		3.15	25 °C									○		Meylan WM, Howard PH; Chemosphere 26: 2293-99 (1993)	
3 PhyeProp	大気	OHラジカルとの反応		5.06×10^{-12}	500000 molecule/cm ³			3.15	25 °C									×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1993)	
4 EPI Suite	大気	OHラジカルとの反応		112×10^{-12}	1500000 molecule/cm ³			0.095 days (1.143 hr)								estimated by calculation		×			
5 HSDB	大気	直接光分解				Tetramethylammonium hydroxide does not contain chromophores that absorb at wavelengths >290 nm and, therefore, is not expected to be susceptible to direct photolysis by sunlight(SRC).												○		Lyman WJ et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Washington, DC; Amer Chem Soc pp. 7-4, 7-5, 8-12 (1990)	
6 HSDB	水域	加水分解				Tetramethylammonium hydroxide is not expected to undergo hydrolysis in the environment due to the lack of functional groups that hydrolyze under environmental conditions.												○		Lyman WJ et al; Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Washington, DC; Amer Chem Soc pp. 7-4, 7-5, 8-12 (1990)	

参考情報

PACS_F等	17002
PACS_Name等	テトラメチルアンモニウム=ヒドロキシド
CASRN	75-59-2
CA_IN	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, hydroxide (1:1)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(O)(C)(C)C

分解性

収集データ

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるケーススタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
1 ECHA		100%	その他, ammonium-nitrogen analysis by HPLC		OECD TG 301C	yes	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result			2002	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.003
2 ECHA		98%	DOC removal		OECD TG 301C	yes	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result			2002	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.003
3 ECHA		96%	O_2 consumption		OECD TG 301C	yes	2: reliable with restrictions	supporting study	experimental result			2002	Exp Supporting Biodegradation in water: screening tests.003
4 ECHA		100%	CO_2 evolution		OECD TG 301B	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study				2001,2001.10.17.	Exp Key Biodegradation in water: screening tests.001
5 SIDS	readily biodegradable	96%	O_2 consumption		OECD TG 301C	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result				Dossier p.41
6 SIDS	readily biodegradable	98%	TOC removal		OECD TG 301C	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result				Dossier p.41
7 SIDS	readily biodegradable	100%	Test mat. analysis		OECD TG 301C	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result				Dossier p.41
8 既存点検事業	-	98%	TOC removal		化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result				K1635
9 既存点検事業	-	96%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result				K1635
10 既存点検事業	-	100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result				K1635