

(案)

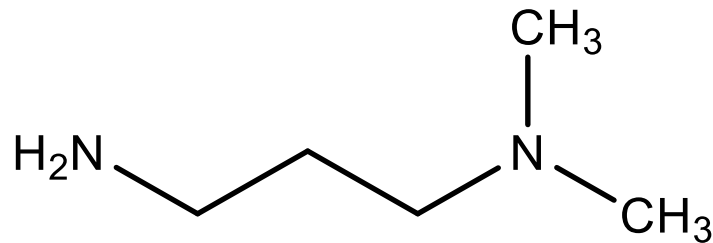
優先評価化学物質のリスク評価 (一次)

生態影響に係る評価 II

物理化学的性状等の詳細資料

N, N-ジメチルプロパン-1, 3-ジイルジアミン

優先評価化学物質通し番号 99



令和元年 7 月

経済産業省

目 次

1		
2		
3	1 評価対象物質の性状	1
4	1-1 物理化学的性状及び濃縮性	1
5	1-2 分解性	4
6	2 【付属資料】	6
7	2-1 物理化学的性状等一覧	6
8	2-2 その他	6
9		
10		

1 評価対象物質の性状

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タを示す。

1-1 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、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 1-1 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*

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	—	102.18	—	102.18
融点	°C	-60 ¹⁾	測定値か推計値かは不明	-60 ¹⁾
沸点	°C	135 ²⁾	標準圧力(101.3 kPa)での測定値	135 ²⁾
蒸気圧	Pa	800 ²⁾	20°Cにおける値。測定値か推計値かは不明	800 ²⁾
水に対する溶解度	mg/L	<u>(1 × 10⁶)</u>	水に任意の割合で混和 ²⁾	9.33 × 10 ⁵ ¹⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	-0.352 ²⁾	OECD TG 107による測定値	-0.352 ²⁾
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	5.19 × 10 ⁻⁴	HENRYWIN(v. 3.20) ³⁾ のBond Estimation法による推計値	5.19 × 10 ⁻⁴
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	<u>37</u> (非解離種) <u>32</u> (カチオン種)	Francoらの論文 ⁴⁾ に記載の式により計算	4.398 ³⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	(3.16)	BCFBAF(v. 3.01) ³⁾ による推計値	3.16
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPowとBCFから設定 ⁵⁾	1
解離定数(pKa)	—	pK ₁ =10.3 pK ₂ =8.0	ACD/Percepta ⁶⁾ による推計値	— ⁷⁾

※平成28年度第2回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議(平成28年11月17日)で了承された値

1) PhysProp

2) OECD SIDS

3) EPI Suite

4) Franco and Trapp, 2008

5) MHLW, METI, MOE(2014)

6) ACD/Labs(2015)

7) 評価Ⅰにおいては解離定数は考慮しない

括弧内の値は参考値であることを示す。

1 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

2 ① 融点

3 評価Ⅰで採用した値は、PhysProp に記載のある値 (-60℃) である。他の信頼性の定まった
4 情報源¹においては、凝固点が-70℃ (HSDB) という記載があったが、評価Ⅱにおいても
5 評価Ⅰと同じ値 (-60℃) を用いる。

7 ② 沸点

8 評価Ⅰで採用した値は、OECD SIDS に記載された標準圧力 (101.3kPa) での測定値
9 (135℃) である。他の信頼性の定まった情報源等にある記載も、129℃ (CRC)、123℃
10 (HSDB)、133℃ (PhysProp) とほぼ同程度であることから、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同
11 じ値 (135℃) を用いる。

13 ③ 蒸気圧

14 評価Ⅰで採用した値は、OECD SIDS に記載された 20℃での値 (800 Pa) である。他の
15 信頼性の定まった情報源等には、30℃における値が 1,330 Pa (20℃に補正した場合は 678
16 Pa) (PhysProp)、20℃における値が 667 Pa (Aldrich) という記載があったが、評価Ⅱにお
17 いても SIDS のキースタディーである 800 Pa を用いる。

19 ④ 水に対する溶解度

20 評価Ⅰで採用した値は、PhysProp に記載された 25℃での測定値 (1×10^6 mg/L) を 20℃
21 に補正した値 (9.33×10^5 mg/L) である。他の信頼性の定まった情報源等には、20℃におい
22 ては「水に混和 (miscible)」と記載されていたため、評価Ⅱでは、本物質の水に対する溶
23 解度を 1×10^6 mg/L (参考値) とする。

25 ⑤ logPow

26 評価Ⅰで採用した値は、OECD SIDS に記載された OECD TG 107 によって測定された
27 値 (-0.352) である。他に測定値の情報がないことから、評価Ⅱでもこの値 (-0.352) を採用
28 する。

30 ⑥ ヘンリー係数

31 評価Ⅰで採用した値 (5.19×10^{-4} Pa·m³/mol) は、HENRYWIN の Bond Estimation 法に
32 よる推計値である。信頼性の定まった情報源等に記載があるのは推計値のみで、測定値はな
33 いため、評価Ⅱにおいても評価Ⅰと同じ値 (5.19×10^{-4} Pa·m³/mol) を用いる。

¹ 「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. 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報源のこと

1 ⑦ Koc

2 評価Ⅰで採用した値は、KOCWIN (v2.00) による logPow を用いた推計値 (4.398 L/kg)
3 である。他の信頼性の定まった情報源に測定値はなかったため、Franco らの論文 (Franco
4 and Trapp, 2008) に記載の式により推定を行った結果、37 L/kg (非解離種)、32 L/kg (カチ
5 オン種) であった。評価Ⅱではこれらの値を用いる。

6

7 ⑧ BCF

8 評価Ⅰで採用した値は、BCFBAF (v3.01) による推計値 (3.16 L/kg) である。本物質の
9 ような解離性物質については、BCFBAF の予測精度が低いことが分かっているが、他に
10 BCF に関する情報が得られないため、評価Ⅱではこの値を参考値として用いる。なお、
11 OECD の SIDS には本物質の生物濃縮性について、「logPow が-0.352 と低いとため、生物濃
12 縮性も低いと考えられる」と記載されている。

13

14 ⑨ BMF

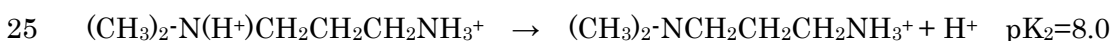
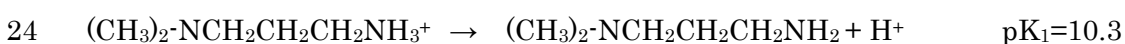
15 評価Ⅰで採用した値は、logPow 及び BCF から化審法における優先評価化学物質に関す
16 るリスク評価の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。) に従って設定したもの
17 である。BMF の測定値は得られなかったため、評価Ⅱにおいてもこの値 (1) を用いる。

18

19 ⑩ 解離定数

20 本物質は塩基性物質であり、ACD/Percepta による推計では酸解離定数が、pK₁=10.3、
21 pK₂=8.0 である。環境水中の pH では、2 価又は 1 価の陽イオンとして存在している。非解
22 離種の存在率は、pH=7 で 0%、pH=8 で 0%、pH=9 で 4%と推定される。

23



26

1-2 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*

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
		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	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	5
		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
		加水分解	NA

※平成 28 年度第 2 回優先評価化学物質のリスク評価に用いる物理化学的性状、分解性、蓄積性等のレビュー会議（平成 28 年 11 月 17 日）で了承された値

1) PhysProp

2) OECD SIDS

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ても、オゾンとの反応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。

①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

OECD SIDS には、OH ラジカルとの半減期は 3.2 時間とあるが、詳細は不明である。PhysProp に 25°C での大気中における OH ラジカルとの反応速度定数の推計値 ($1.12 \times 10^{10} \text{ cm}^3/\text{molecule/s}$) が記載されている。評価Ⅱにおいては大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの $5 \times 10^5 \text{ molecule/cm}^3$ として算出した半減期 (0.14 日) を用いる。

②水中

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、生分解の半減期に関する情

1 報が得られた。

2 ② -1 生分解の半減期

3 OECD TG 301D(クローズドボトル法) 相当の生分解性試験の結果、非順化汚泥を用いた
4 場合、20 日後の分解度が 65%であった (OECD SIDS)。そのため、技術ガイダンスに従
5 い、生分解による半減期を 5 日とする。

6 また、産業排水の活性汚泥を用いた OECD TG 302D の試験では、15 日後の分解度が
7 100%であった (OECD SIDS)。

8

9 ③土壌

10 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
11 る情報も得られなかった。

12 ③ -1 生分解の半減期

13 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は、技術ガイダン
14 スに従って、水中の生分解半減期と同じ 5 日とする。

15

16 ④底質

17 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
18 る情報も得られなかった。

19 ④ -1 生分解の半減期

20 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
21 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。

22

1 **2 【付属資料】**

2 **2-1 物理化学的性状等一覧**

3 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

4

5 出典)

6 ACD/Labs (2015): Advanced Chemistry Development, Inc. ACD/Percepta 14.0.0 (Build
7 2203).

8 Aldrich: Sigma-Aldrich 試薬カタログ.

9 CRC Handbook of Chemistry and Physics, CRC-Press.

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

11 Franco and Trapp (2008), Estimation of the soil-water partition coefficient normalized to
12 organic carbon for ionizable organic chemicals, Environmental Toxicology and Chemistry,
13 Vol.27, No.10, pp 1995-2004

14 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. [http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB)
15 bin/sis/htmlgen?HSDB, (2016-04-08 閲覧).

16 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
17 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.

18 OECD(2000): OECD. SIDS Initial Assessment Profile, 3-
19 AMINOPROPYLDIMETHYLAMINE

20 PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2016-07-08 閱
21 覧).

22

23 **2-2 その他**

24 特になし。

25