

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

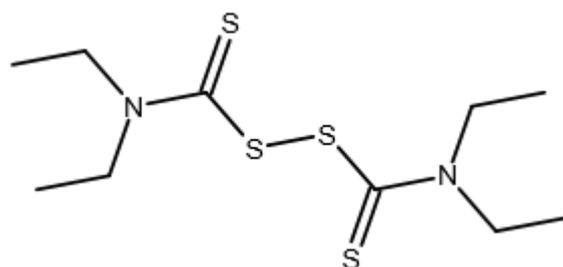
# 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

## 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（NO<sub>2</sub>）：69%、70%、68%、（NH<sub>3</sub>）：  
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<sup>1</sup>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<sup>2</sup>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

---

<sup>1</sup> 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）

<sup>2</sup> 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。」

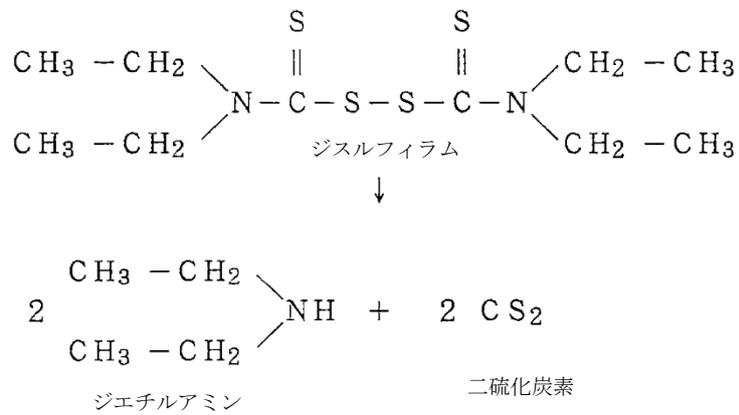
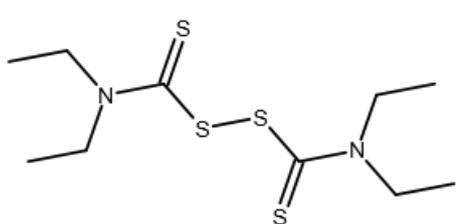


図 1-1 ジスルフィラムの生分解試験による生成物

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	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> S <sub>4</sub>
優先評価化学物質通し番号	41
CAS 登録番号	97-77-8

59  
60  
61  
62  
63

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

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

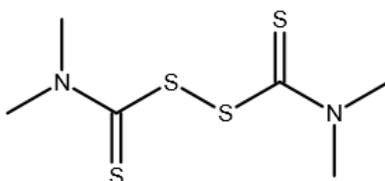
### 95 ③蒸気圧

96 評価Ⅰで採用した値 ( $1.4 \times 10^{-5}$  Pa) は、ECHA に記載された  $25^{\circ}\text{C}$ での測定値 ( $2.0 \times 10^{-5}$   
97 Pa) を  $20^{\circ}\text{C}$ 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  $2.3 \times 10^{-3}$  P  
100 ( $25^{\circ}\text{C}$ ) 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  $71.5^{\circ}\text{C}$ を入力) は  $4.2 \times 10^{-4}$  Pa で  
103 ある。評価Ⅱではこの推計値 ( $4.2 \times 10^{-4}$  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  $8.2 \times 10^{-2}$  Pa、 $6.3$   
105  $\times 10^{-4}$  Pa の値 (ただし  $20^{\circ}\text{C}$ 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  $20^{\circ}\text{C}$ 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 ( $25^{\circ}\text{C}$ 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  $20^{\circ}\text{C}$ 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  $20^{\circ}\text{C}$ 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 ( $1.3 \times 10^{-5}$  mol/L) であるため、 $20^{\circ}\text{C}$ 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  $1.2899\times 10^4 \text{ L/kg}$ 、 $6.359\times 10^3 \text{ L/kg}$ 、 $2.4526\times 10^4$   
133  $\text{L/kg}$ 、 $2.245\times 10^3 \text{ L/kg}$  という記載があった。

134

135 ⑧BCF

136 評価Ⅰで採用した値 ( $170 \text{ L/kg}$ ) 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  $230 \text{ L/kg}$  (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 ーチによる推計値 ( $230 \text{ L/kg}$ ) を用いる。

142

143 ⑨BMF

144 評価Ⅰで採用した値は、logPow (3.88) 及び BCF ( $170 \text{ L/kg}$ ) 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 ( $230 \text{ L/kg}$ ) 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) <sup>1)</sup> 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 $5 \times 10^5$ molecule/cm <sup>3</sup> 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 <sup>2), 3)</sup>
		加水分解	-	加水分解は重要な機序でない <sup>4)</sup>
		光分解	-	直接光分解を受けにくい <sup>4)</sup>
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  $3.9 \times 10^{-10}$  cm<sup>3</sup>/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  $5 \times 10^5$  molecule/cm<sup>3</sup> 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 <sub>2</sub> )	
	(%)	12	48	50	46		
DOC 残留	(mg)	1.5	5.8	6.1	5.6	12.2	
	(%)	95	52	46	52		
被験物質残留 (HPLC)	(mg)	28.5	15.6	13.9	15.6	30.0	
	(%)	0.8	7.6	8.0	7.1		
ジエチルアミン生成 (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	MPBPW N				(Q)SAR		2C	×	×			
5 HSDB	融点	71.5 °C	71.5							2B	○	○			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
6 IUCLD	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 N	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	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: > BOIL NG POINT
4 IUCL D	117 °C	117	151.7829	17 mmHg							4A	×	×			p.5
5 PhysProp	117 °C	117	151.7829	17 mmHg	-	-	-	-	-		2B	○	×			p.1
6 ECHA	117 °C	117	151.7829	17 mmHg			2: reliable with	key study	experimental result		4A	×	×			Exp Key Boiling point 001
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	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 IUCL D	[Not applicable.]	単位換算不可									3	×	×			
4 PhysProp	0.00000661 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
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 N	Thioperoxydicarbonic diamide (((H2N)C(S))2S2), N,N,N',N'-tetraethyl-
その他番号	
その他名称	
SM LES	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 <sup>3</sup> /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 <sup>3</sup> /mol	6.5	20 °C				(Q)SAR		2C	○	×			
2 HSDB	8.3E-5 atm・m <sup>3</sup> /mol	8.409975	25 °C				estimated by calculation		4C	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES
3 PhysProp	0.0000832 atm・ m <sup>3</sup> /mol	8.43024	25 °C		-	-	estimated by calculation		4C	×	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1991).	p.1
4 USHPV	0.0000832 atm・ m <sup>3</sup> /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 <sup>-4</sup> ), 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 N	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	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 N	Thioperoxydicarbonic diamide ([[H2N]C(S)]2S2), N,N,N',N'-tetraethyl-
その他番号	
その他名称	
SM LES	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 <sup>3</sup> /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 <sup>3</sup> /molec ule/sec	5E+5 molecule/cm <sup>3</sup>	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 <sup>3</sup> /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 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
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 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

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
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; ニ 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; ニ 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; ニ 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; ニ 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; ニ 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; ニ 硫化炭素)	OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result				K0862