

(案)

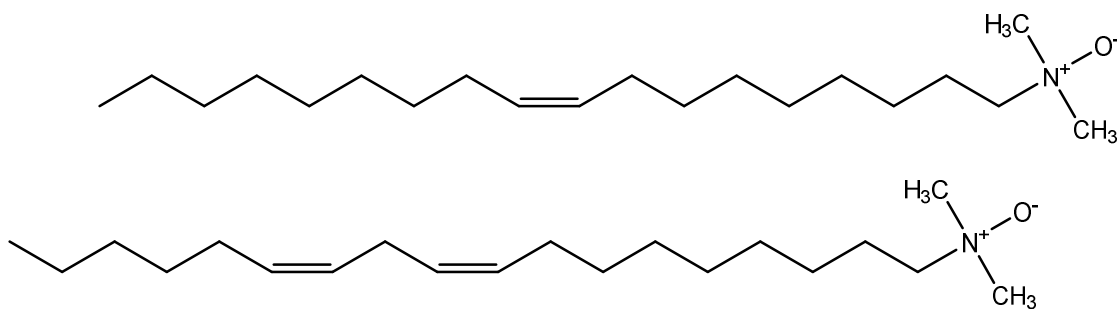
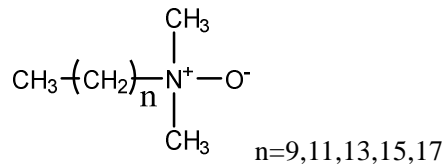
## 優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価

物理化学的性状等の詳細資料

*N,N*-ジメチルアルカン-1-アミン=オキシド(C = 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)、(*Z*)-*N,N*-ジメチルオクタデカ-9-エン-1-アミン=オキシド又は(9*Z*, 12*Z*)-*N,N*-ジメチルオクタデカ-9, 12-ジエン-1-アミン=オキシド

優先評価化学物質通し番号 169



平成 30 年 3 月

経済産業省

# 目 次

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

本章では、5章の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。なお、*N,N*-ジメチルアルカン-1-アミン=オキシド(C=10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)(*Z*)-*N,N*-ジメチルオクタデカ-9-エン-1-アミン=オキシド又は(*9Z*, *12Z*)-*N,N*-ジメチルオクタデカ-9, 12-ジエン-1-アミン=オキシド(以下「AO」という。)はアルキル鎖長及び不飽和度が異なる混合物である。AOは、平成26年4月1日に化審法の優先化学物質に指定され、それに包含される優先番号101の*N,N*-ジメチルドデシルアミン=*N*-オキシド(C<sub>12</sub>AO(以下、C<sub>n</sub>AOのnはアルキル鎖長を示す。))は指定取消となった。

OECD(2006)に記載された各CAS番号に対応するAOのアルキル鎖長の分布は表1のとおりである(化審法における指定範囲に該当する物質のCAS番号のみ記載)。

本評価に用いるAOの物理化学的性状等は、化審法における製造・輸入数量における出荷数量全体のおよそ85%を占める(平成26年度実績)C<sub>12</sub>AO(CAS:1643-20-5)を主に、一部OECD(2006)において代表的な組成のAOとされているC<sub>10-16</sub>AO(CAS:70592-80-2)の値を採用した。

表1 各CAS番号に対応するAOのアルキル鎖長の分布(%)

CAS No.	Chemical Name	Avg. Chain Length	C <sub>8</sub>	C <sub>10</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>14</sub>	C <sub>16</sub>	C <sub>18</sub>	C <sub>20</sub>
1643-20-5	1-Dodecanamine, N, N-dimethyl-, N-oxide	12.0		0-1	98-100	0-1			
70592-80-2	Amines, C10-16-alkyldimethyl, N-oxides	12.9		<1	41-75	22-51	4-9	<1	
68955-55-5	Amines, C12-18-alkyldimethyl, N-oxides	13.5		0-3	50-64	18-26	9-17	6-14	0-2
3332-27-2	1-Tetradecanamine, N, N-dimethyl-, N-oxide	14.0			2-6	86-97	1-10		
2605-79-0	1-Decanamine, N, N-dimethyl-, N-oxide	10.0		96-100	0-4				
61788-90-7	Amine oxides, cocoalkyldimethyl	13.0		<1-3	64-74	21-30	2-13	<1-9	
85408-48-6	Amines, C10-18-alkyldimethyl, N-oxides	13.2		2	58	24	10	6	
85408-49-7	Amines, C12-16-alkyldimethyl, N-oxides	13.4		0-3	40-62	20-50	9-13	5-9	
7128-91-8	1-Hexadecanamine, N, N-dimethyl-, N-oxide	16.0				<3	>94	<2	
2571-88-2	1-Octadecanamine, N, N-dimethyl-, N-oxide	18.0					<5	>94	<5

(OECD2006)より抜粋

1-2 物理化学的性状及び濃縮性

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表 2 に示す。なお、表中の下線部は、評価 において精査した結果、評価 から変更した値を示している。

表 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<sup>1)</sup>

項目	単位	採用値	詳細	評価 I で用いた値(参考)
分子量	-	229.4	C <sub>12</sub> AO の値	229.4
融点		(132) <sup>2)</sup>	C <sub>12</sub> AO の測定値の平均値	132 <sup>2)</sup>
沸点		- <sup>2)</sup>	90-200 で分解	426.6 <sup>2,3)</sup>
蒸気圧	Pa	5.88 × 10 <sup>-6 4)</sup>	C <sub>12</sub> AO の 25 の測定値を 20 に補正	5.88 × 10 <sup>-6 4)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	4.1 × 10 <sup>5 2)</sup>	C <sub>12</sub> AO の室温の測定値	9.7 × 10 <sup>4 5)</sup>
1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)	-	2.7 <sup>2)</sup>	C <sub>10-16</sub> AO の臨界ミセル濃度 <sup>6)</sup> とオクタノール溶解度 <sup>1)</sup> を用いて算出した logPow の推計値	4.67 <sup>2,4)</sup>
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	5.18 × 10 <sup>-6 3)</sup>	HENRYWIN (V.3.20)による 20 における C <sub>12</sub> AO の推計値	5.18 × 10 <sup>-6 3)</sup>
土壌吸着係数 (Kd)	L/kg	25.5 <sup>2)</sup>	C <sub>10-16</sub> AO の pH7.9 における Kd の測定値の平均値 <sup>1)</sup>	Koc:2772 <sup>3)</sup>
生物濃縮係数 (BCF)	L/kg	28.1 <sup>2,3)</sup>	BCFBFWIN (v.3.01)による C <sub>12</sub> AO の推計値	24 <sup>3)</sup>
生物蓄積係数 (BMF)	-	1 <sup>7)</sup>	logPow と BCF から設定	2
解離定数 (pKa)	-	4.1 <sup>2)</sup>	C <sub>10-16</sub> AO の測定値	- <sup>8)</sup>

1) 平成 28 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、蓄積性等のレビュー会議 (平成 29 年 3 月 2 日) で了承された値

2) OECD (2006)

7) MHLW, METI, MOE (2014)

3) EPI Suite (2012)

8) 評価 I においては解離定数は考慮しない

4) MOE (2004)

-: 値を設定しないことを示す

5) MITI (1995a)

括弧内はモデルを動かすための参考値であることを示す。

6) Mukerjee et al (1971)

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

融点

評価 では OECD (2006) に記載された C<sub>12</sub>AO の測定値 (130 ~ 134 ) の平均値(132 ) を用いた。他の信頼性の定まった情報源がないことから、評価 においても OECD (2006) に記載された C<sub>12</sub>AO の測定値 (130 ~ 134 ) を採用し、参考値として C<sub>12</sub>AO の測定値の平均値(132 ) を用いる。

沸点

評価 では MPBPWIN (v1.43) による C<sub>12</sub>AO の推計値 (426.6 ) を用いた。OECD (2006) には、90-200 で分解が起こるとしており、評価 においては沸点を設定しない。

蒸気圧

評価 では MOE (2004) に記載された C<sub>12</sub>AO の 25 における測定値(8.30 × 10<sup>-6</sup> Pa) を 20 の

1 値に補正したもの ( $5.88 \times 10^{-6}$  Pa) を用いた。他に信頼性の定まった情報源に測定値はないため、  
2 評価 においてもこの値( $5.88 \times 10^{-6}$  Pa)を用いる。

#### 3 4 水に対する溶解度

5 評価 では既存点検事業 MITI (1995a)に記載された C<sub>12</sub>AO の 20 ~ 25 における測定値( 100  
6 g/L)を 20 の値に補正したもの( $9.7 \times 10^4$  mg/L) を用いた。OECD (2006) においては、C<sub>10-16</sub>AO  
7 は室温で  $4.1 \times 10^5$  mg/L まで溶解するとの記載があるため、評価 においてはこの値( $4.1 \times 10^5$   
8 mg/L)を用いる。

#### 9 10 logPow

11 評価 では MOE (2004)に記載された、KOWWIN (v1.68)を用いた C<sub>12</sub>AO の推計値(4.67) を用  
12 いた。OECD (2006)では、界面活性剤について logPow を正確に測定することは不可能であると  
13 されており、KOWWIN による推計値には正確性に限りがあるとの記載もある。そこで、OECD  
14 (2006)では、C<sub>10-16</sub>AO の臨界ミセル濃度(0.070 ~ 3.8 g/L (Mukerjee et al (1971))とオクタノール  
15 への溶解度(33.9 g/L) (OECD (2006))を用いて算出した logPow の推計値(0.95 ~ 2.7)が記載されて  
16 いる。界面活性剤については、logPow の正確な測定が不可能であり、臨界ミセル濃度とオクタノ  
17 ールへの溶解度からの推計では不確実性が残ることから、評価 においては安全側の値として最  
18 大値(2.7)を用いる。

#### 19 20 ヘンリー係数

21 評価 では HENRYWIN (v3.20) を用いた 20 における C<sub>12</sub>AO の推計値 ( $5.18 \times 10^{-6}$  Pa·  
22 m<sup>3</sup>/mol) を用いた。信頼性の定まった情報源に測定値はないため、評価 においてもこの値 ( $5.18$   
23  $\times 10^{-6}$  Pa·m<sup>3</sup>/mol) を用いる。

#### 24 25 土壌吸着係数

26 評価 では KOCWIN (v2.00) を用いた 20 における C<sub>12</sub>AO の炭素補正土壌吸着係数 (K<sub>oc</sub>)  
27 の推計値 (2772 L/kg)を用いた。ただし、KOCWIN の結果には、AO は第四級アンモニウム化合  
28 物であり、第四級アンモニウム化合物の土壌吸着はイオン交換によるメカニズムで生じていると  
29 示唆される、と記載されていた。また、KOCWIN には第四級アンモニウム化合物のトレーニング  
30 セットを含んでいないため、AO の K<sub>oc</sub> の推計は KOCWIN の範囲外であるとの記載が計算結果  
31 にあった。OECD (2006)では、3 種類の土壌タイプで測定された土壌吸着係数 (K<sub>d</sub>) の測定値  
32 (C<sub>12</sub>AO : 8 L/kg、56 L/kg、16 L/kg、C<sub>14</sub>AO : 24 L/kg、17 L/kg、33 L/kg)が記載されており、  
33 K<sub>d</sub> の測定値を表 3 に示す。評価 において淡水域の水及び底質間隙水の pH として 7.6、海水域  
34 の水及び底質間隙水の pH として 8.2 を想定しているため、表 3 より pH7.6 ~ 8.2 の範囲である  
35 Soil type 3 から得られた K<sub>d</sub> の値(18 L/kg 及び 33 L/kg)の算術平均値(25.5 L/kg)を評価 では用  
36 いる。

1

表 3 OECD(2006)に記載された Kd 値

アルキル鎖長	Kd	土壌番号	pH	有機物含有率	粘土含有率
C12	8 L/kg	Soil type 1	6.1	2.70%	3.20%
	56 L/kg	Soil type 2	4.6	0.80%	11%
	18 L/kg	Soil type 3	7.9	2.60%	24%
C14	24 L/kg	Soil type 1	6.1	2.70%	3.20%
	17 L/kg	Soil type 2	4.6	0.80%	11%
	33 L/kg	Soil type 3	7.9	2.60%	24%

2

3 BCF

4 評価 1 では BCFBAFWIN (v3.01)を用いた 20 における C<sub>12</sub>AO の推計値(23.66 L/kg)を用い  
5 た。信頼性の定まった情報源に測定値はないため、評価 1 においては C<sub>12</sub>AO の logPow (2.7) と  
6 BCFBAFWIN を用いた 20 における C<sub>12</sub>AO の推計値 (28.1 L/kg) を用いる。

7

8 BMF

9 評価 2 では logPow と BCF の値から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  
10 術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。)(MHLW, METI, MOE (2014)) に従って設定した  
11 値 (2) を用いた。信頼性の定まった情報源に測定値はないため、評価 2 においては、logPow の  
12 値(2.7)と BCF の値(28.1 L/kg)から技術ガイダンスに従って設定した値(1) を用いる。

13

14 解離定数

15 本物質は弱い塩基性物質である。OECD (2006)には酸性溶液中でカチオン種  $[R(CH_3)_2 N^+ \cdot OH]$ と  
16 して存在し、中性又は塩基性溶液では中性種 $[R(CH_3)_2 NO \cdot H_2O]$ と存在しているとの記載があり、  
17 C<sub>10-16</sub>AO の 25-26.9°C における酸解離定数の測定値(4.1)が記載されている。カチオン種 $[R(CH_3)_2$   
18  $N^+ \cdot OH]$ の存在率は、pH=5 で 11.2%、pH=6 で 1.2%、pH=7 で 0.1%、pH=8 で 0%、pH=9 で 0%と  
19 なり、中性種が環境の pH で主に存在すると考えられる。

1-3 分解性

エラー！参照元が見つかりません。にモデル推計に採用した分解に係るデータを表 4 に示す。

表 4 分解に係るデータのまとめ<sup>1)</sup>

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	0.59 C <sub>12</sub> AO の反応速度定数の推計値 <sup>2,3,4,5)</sup> から OH ラジカル濃度 5 × 10 <sup>5</sup> 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	5 C <sub>12</sub> AO の OECD TG301C 試験結果 <sup>3,4,6)</sup> より、技術ガイダンス <sup>7)</sup> に従い設定
		加水分解	- OECD (2006) において水中で安定とされている
		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 水中生分解の項参照
		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	20 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

1) 平成 28 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、蓄積性等のレビュー会議（平成 29 年 3 月 2 日）で了承された値

2) MOE (2004)

6) MITI (1995b)

3) NITE (2007)

7) MHLW, METI, MOE (2014)

4) OECD (2006)

NA: 情報が得られなかったことを示す

5) EPI-Suite (2012)

-: 無視できると考えられることを示す

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。

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 OH ラジカルとの反応の半減期

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ため、AOPWIN (v1.92) を用いた C<sub>12</sub>AO の反応速度定数の推計値 (2.7×10<sup>-11</sup> cm<sup>3</sup>/ molecule/s) を半減期算出に採用する。この反応速度定数は MOE (2004)、NITE (2007)、OECD (2006) にも記載されている。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンス(MHLW, METI, MOE (2014))より 5×10<sup>5</sup> molecule/cm<sup>3</sup>とした場合、半減期は 0.59 日と算出される。評価 においてはこの値 (0.59 日) を用いる。

1 水中

2 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。また、機序別の半減期について光  
3 分解の反応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の反応に関する情報  
4 が得られた。

5 -1 生分解の半減期

6 MITI (1995b) において被験物質濃度 100 mg/L (C<sub>12</sub>AO)、活性汚泥濃度 30 mg/L で 28 日間  
7 試験を行った結果、BOD 分解度、TOC 分解度及び LC-MS 分解度はそれぞれ 63%、68%及び  
8 100%であった。OECD (2006) 及び日本石鹼洗剤工業会(2001)においても微生物を用いた下水  
9 処理のモデルとなる連続活性汚泥試験で、二酸化炭素発生量測定での分解率が 69~76%、  
10 C<sub>12</sub>AO としての除去率が 99.8%以上であることなどから、好気的な条件下では生分解されやす  
11 いとしている。また、OECD (2006)には、様々な鎖長の AO の分解度試験結果が表 5 の通りま  
12 とめられており、嫌気性条件下でも分解するとの記載がある。MITI (1995b)において易分解性  
13 試験における分解度が 60%以上であることから、技術ガイダンスより表層水における生分解半  
14 減期は 5 日と算出される。評価 においてはこの値(5 日)を用いる。

15  
16 表 5 OECD (2006)に記載された分解度試験の結果

CAS 番号	アルキ ル鎖長	平均 鎖長	試験方法	28 日間におけ る分解度	判定結果	参考文献
2605-79- 0	C10	C10	OECD 301E	97% DOC	Readily biodegradable	Th. Goldschmidt AG (1997)
70592- 80-2	C10-16	C12.9	OECD 301B	63.1% ThO <sub>2</sub> (26 日間)	Ultimately biodegradable	The Procter & Gamble Company (1977B)
61788- 90-7	C12-14	C13.0	OECD 301D	93% ThO <sub>2</sub>	Readily biodegradable	Akzo Chemie (1987)
85408- 49-7	C12-16	C13.4	OECD 301D	48% ThO <sub>2</sub> (30 日間)	Inherently biodegradable	Henkel KGaA (2000)
68955- 55-5	C12-18	C13.5	OECD 301D	82% ThO <sub>2</sub>	Readily biodegradable	Akzo Nobel Chemicals (19901)

17  
18 なお、下水処理場での活性汚泥による除去率については、OECD (2006)において C<sub>12</sub>AO 及  
19 び C<sub>10-16</sub>AO の OECD 303A 試験結果(除去率：>99.8%)及び C<sub>10-16</sub>AO の米国、オランダにおけ  
20 る除去率の測定値(米国：>96%、オランダ：>94.9~99.5%)の記載があった。NITE (2007) に  
21 においても、除去率の測定値(>99%)の記載があった。

22 -2 加水分解の半減期

23 OECD (2006) において水中(pH4-9)では安定と記載されている。

24  
25 土壌

26 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が、生分解と加水分解の機序別の  
27 反応に関する情報が得られた。

28 -1 生分解の半減期

29 土壌中での生分解半減期の測定値が得られなかったため、評価 においては技術ガイダンス  
30 に従い、水中における生分解半減期と同じ値(5 日)を用いる。

31 -2 加水分解の半減期

32 OECD (2006) において水中(pH4-9)では安定と記載されている。



1

2 底質

3 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が、生分解と加水分解の機序別の  
4 反応に関する情報が得られた。

5 -1 生分解の半減期

6 底質での生分解半減期の測定値が得られなかったため、評価 においては技術ガイダンスに  
7 従い、水中における生分解半減期に「4」を乗じた値(20 日)を用いる。

8 -2 加水分解の半減期

9 OECD (2006) において水中(pH4-9)では安定と記載されている。

10

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

7 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  
8 ダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

9 MITI(1995a): MITI. アルキルアルキル(又はアルケニル, アルキル又はアルケニルのうち少  
10 くとも1個はC 8 ~ 24で他はC 1 ~ 5)アミンオキサイド [N, N-ジメチルドデシルア  
11 ミンN-オキシド(被験物質番号 K-1180)にて試験実施] の物理化学性状の測定, 既存化学  
12 物質点検, 1995.

13 MITI(1995b): MITI. アルキルアルキル(又はアルケニル, アルキル又はアルケニルのうち少  
14 くとも1個はC 8 ~ 24で他はC 1 ~ 5)アミンオキサイド [N, N-ジメチルドデシルア  
15 ミンN-オキシド(被験物質番号 K-1180)にて試験実施] の微生物による分解度試験, 既存  
16 化学物質点検, 1995.

17 MOE(2004): MOE. 化学物質の生態リスク初期評価 第3巻, [17]N, N-ジメチルドデシル  
18 アミン = N = オキシド. 2004.

19 Mukerjee P and Mysels K. (1971). Critical Micelle Concentrations of Aqueous Surfactant  
20 Systems. Office of Standard Reference Data National Bureau of Standards Washington,  
21 D.C. (NSRDS-NBS 36).

22 NITE(2007): NITE. 化学物質の初期リスク評価書, N, N-ジメチルドデシルアミンN-オ  
23 キシド. Ver. 1.0, No. 21, 2007.

24 OECD(2006): OECD. SIDS Initial Assessment Report For SIAM 22, Amine Oxides. 2006.

25 日本石鹼洗剤工業会(2001): 日本石鹼洗剤工業会. 界面活性剤のヒト健康影響および環境影響  
26 に関するリスク評価. N,N-ジメチルドデシルアミン = N-オキシドのヒト健康影響および環境影  
27 響に関するリスク評価. 2001

28

29 2-2 その他

30 特になし。

情報源略称	詳細等
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, Version 2013, CRC-Press
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
MOE初期評価	環境省環境リスク評価室:「化学物質の環境リスク評価」
NITE初期リスク評価書	(独)製品評価技術基盤機構:「化学物質の初期リスク評価書」
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
REACH登録情報	REACH登録情報
SIDS	OECD: SIDSレポート
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果

基本情報

優先通し番号	169
物質名称	N, N - ジメチルアルカン - 1 - アミン=オキシド (C = 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)、(Z) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9 - エン - 1 - アミン=オキシド又は (9Z, 12Z) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9, 12 - ジエン - 1 - アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [ ]	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)	キースタ ディ該非 (評価)	キースタ ディ該非 (評価)	備考	文献	ページ番号等
1 CRC	融点	130.5 °C	130.5					-		2B	×	×			Physical Constants of Organic Compounds
2 EPI Suite	融点	167.95 °C	167.95	MPBPWIN				(Q)SAR	Weighted Value	2C	×	×			
3 HSDB	融点	130.5 °C	130.5					-		2B	×	×		Lide, D.R. CRC Handbook of Chemistry and Physics 86TH Edition 2005-2006. CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, FL 2005, p. 3-198	Chemical/Physical Properties: > Melting Point:
4 MOE初期評価	融点	132 ~ 133 °C	132.5					-		2B	×	×		Howard, P.H. and W.M. Meylan ed. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers, p596.	
5	融点	132 ~ 133 °C	132.5					-		2B	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY. ( <a href="http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm">http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm</a> から引用)	p.1
6 PhysProp	融点	130.5 °C	130.5					-		2B	×	×			Melting Pt
7 REACH登録情報	融点	130 ~ 134 °C	132	その他,other: method not specified, however a capillary method was used for shorter chain length amine oxides	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		publication / Devinsky F, Leitmanova A, Lacko I & Krasnec L / 1985 / Amine Oxides-XIII: Iodine complexes with non-aromatic amine oxides / Tetrahedron, 41(23), 5707-5709	Exp Key Melting point/freezing point.001
8 SIDS	融点	167.95 °C	167.95	その他,EPIWIN	その他,n/a	2: reliable with restrictions		estimated by calculation	All estimates apply to the pure, dry substance and not their solutions in water.	4C	×	×			Dossier p.62-63
9 SIDS	融点	130 ~ 134 °C	132		その他,n/a	2: reliable with restrictions	key study	-		2A				Devinsky F, Leitmanova A, Lacko I, Krasnec L, 1985. Amine Oxides -XIII: Iodine complexes with non-aromatic amine oxides. Tetrahedron 41(23): 5707-5709.	p.14; SIDS Dossier p.63-64
10	融点	C10 AO 133 - 136 C12 AO 130 - 134 C14 AO 125 - 129 C16 AO 126 - 130	130.5		n/a	2A: Reliable with restrictions	key study			2A	×	×		Devinsky et al, 1985 Devinsky, F, Leitmanova, A, Lacko, I and Krasnec, L., 1985. Amine Oxides-XIII: Iodine complex with non-aromatic amine oxides. Tetrahedron. 41(23)5707-5709.	p.14; SIDS Dossier

基本情報

優先通し番号	169
物質名称	N, N - ジメチルアルカン - 1 - アミン=オキシド (C = 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)、(Z) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9 - エン - 1 - アミン=オキシド又は (9Z, 12Z) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9, 12 - ジエン - 1 - アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [ ]	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)	キースタ ディ-該非 (評価)	キースタ ディ-該非 (評価)	備考	文献	ページ番号等
11 既存点検事 業	融点	132 ~ 133 ° C[405 ~ 406K ( 132 ~ 133 )]	132.5					-		4A	x	x		The Sigma-Aldrich Library of Regulatory and Safety Data (Volume 1)	

基本情報

優先通し番号	169
物質名称	N, N - ジメチルアルカン - 1 - アミン=オキシド (C = 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)、(Z) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9 - エン - 1 - アミン=オキシド又は (9Z, 12Z) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9, 12 - ジエン - 1 - アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [ ]	101.325 kPa における沸 点[ ]	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)	キースタ ディ該非 (評価)	キースタ ディ該非 (評価)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	426.62 °C	426.62			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method	2C		x			
2 MOE初期評 価	426.62 °C	426.62							estimated by calculation		4C	x	x		U.S. Environmental Protection Agency, MPBPWINTM v1.41	p.1
3 SIDS	426.62 °C	426.62			その他,EPIWIN	その他,n/a	2: reliable with restrictions		estimated by calculation	All estimates apply to the pure, dry substance and not their solutions in water.	4C	x	x			Dossier p.62-63
4 SIDS	[Amine oxides undergo thermal decomposi tion between 90 and 200°C.]	単位換算不 可			その他	no	2: reliable with restrictions	key study	-		3	x			Kirk Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 2001, 4th edition, CD-ROM, John Wiley and Sons, ISBN: 0-471- 15158-0	p.14; SIDS Dossier p.64

基本情報

優先通し番号	169
物質名称	N,N-ジメチルアルカン-1-アミン=オキシド(C=10,12,14,16,18、直鎖型)、(Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9-エン-1-アミン=オキシド又は(9Z,12Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9,12-ジエン-1-アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20 における蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価)	キースタ ディー該非 (評価)	キースタ ディー該非 (評価)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	0.0000218 Pa[2C以下の値を用いて推定(4)]	2.18E-05	1.55E-05	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		4C	x	x			
2 HSDB	6.2E-8 mmHg	8.27E-06	5.86E-06	25 °C					estimated by calculation		4C	x	x		US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 3.20. February, 2007. Available from, as of Jun 17, 2008: <a href="http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.html">http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.html</a>	Chemical/Physical Properties: > Vapor Pressure:
3 MOE初期評価	8.30E-06 Pa[6.23x10^-8mmHg(=8.30x10^-6Pa)]	8.3E-06	5.88E-06	25 °C					-		2B				HOWARD, P.H. and MEYLAN, W.M., ed. (1997) Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals, Boca Raton, New York, London, Tokyo, CRC Lewis Publishers, p.596.	p.1
4 PhysProp	0.0000000623 mmHg	8.31E-06	5.89E-06	25 °C					estimated by calculation		4C	x	x		NEELY,WB & BLAU,GE (1985)	Vapor Pressure
5 REACH登録情報	0.000021 Pa	0.000021	1.49E-05	25 °C	MPBPWIN	no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	x	x		study report / 2012	Calc Key Vapour pressure.001
6 SIDS	2.09E-5 Pa	2.09E-05			その他,EPIWIN	その他,n/a	2: reliable with restrictions	-	(Q)SAR	EPIWIN, Version 3.0.	4C	x	x		EPIWIN: Physical/chemical property estimation methods, Version 3.0, from Syracuse Research Corporation, Syracuse, NY.	SIDS Dossier p.62-63

基本情報

優先通し番号	169
物質名称	N,N-ジメチルアルカン-1-アミン=オキシド(C=10,12,14,16,18、直鎖型)、(Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9-エン-1-アミン=オキシド又は(9Z,12Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9,12-ジエン-1-アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20 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)	キースタ ディ-該非 (評価)	キースタ ディ-該非 (評価)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	0.7576 mg/L[2C以 下の値を用 いて推定 (4)]	0.7576	0.70722448	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		4C	×	×			
2 HSDB	190000 mg/L	190000	177366.223	25 °C						-		2B	×	×		Brown SL et al.; Research Program on Hazard Priority Ranking of Manufactured Chemicals (Chemicals 61-79). NTIS PB-263 164. Menlo Park, CA: Stanford Research Institute (1975)	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
3 MOE初期評 価	190 g/L	190000	177366.223	25 °C						-		2B	×	×		U.S. Environmental Protection Agency, WSKOWWINTM v1.41	p.1
4 NITE初期リ スク評価書	190 g/L[可溶 化状態での 値と考えら れる。]	190000	177366.223	25 °C						-		2B	×	×		Brown, S.L., Chan, F.Y., Jones, J.L., Liu, D.H. and Mc. Caleb., K.E. (1975) Research program on hazard priority ranking of manufactured chemicals (chemicals 61-79). NTIS PB-263 164. Stanford Res. Inst., Menlo Park, CA.	p.2
5 PhysProp	190000 mg/L	190000	177366.223	25 °C						experiment al result		2B	×	×		BROWN,SL ET AL. (1975C)	Water Solubility
6 SIDS	3.13 mg/L	3.13				その他,EPIWIN	その 他,n/a	2: reliable with restrictions	-	(Q)SAR	EPIWIN, Version 3.0.	4C	×	×		EPIWIN: Physical/chemical property estimation methods, Version 3.0, from Syracuse Research Corporation, Syracuse, NY.	SIDS Dossier p.62-63
7 SIDS	409.5 g/L	409500	409500	room temp	No pH adjustment	other	no	2A: reliable with restrictions	key study	experiment al result	10 g test substance/15 ml deionized water, stirred 24 h at room temp., centrifuged at 2,500 rpm to separate undissolved material from the solution. Analyze solution by Disulfine Blue Active Substances method	2A	×		C10-16AO	The Procter & Gamble Company, 2002C. Determination of the n-Octanol/Water partition coefficient (HPLC method). Test substance ID TSIN GTS02902.	p.14; SIDS Dossier p.165
8 既存点検事 業	100 g/L[確認 値]	100000	96590.0332	20 - 25 °C		OECD TG 105				experiment al result		1B		×			



基本情報

優先通し番号	169
物質名称	N,N-ジメチルアルカン-1-アミン=オキシド (C=10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)、(Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9-エン-1-アミン=オキシド又は(9Z, 12Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9, 12-ジエン-1-アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

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)	キースタ ディ-該非 (評価)	キースタ ディ-該非 (評価)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	4.67	4.67			KOWWIN				(Q)SAR		2C		x			
2 HSDB	4.67	4.67							estimated by calculation		4C	x	x		US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 3.20. February, 2007. Available from, as of Jun 17, 2008: <a href="http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.dll">http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.dll</a>	Chemical/Physical Properties: > Octanol/Water Partition Coefficient:
3 MOE初期評価	4.67	4.67							-		2B		x		U.S. Environmental Protection Agency, KOWWIN v1.67	p.1
4 PhysProp	4.67	4.67							estimated by calculation		4C	x	x		MEYLAN, WM & HOWARD, PH (1995)	Log P (octanol-water)
5 SIDS	4.67	4.67			その他, EPIWIN	その他, n/a	2: reliable with restrictions	-	(Q)SAR	EPIWIN, Version 3.0.	4C	x	x		EPIWIN: Physical/chemical property estimation methods, Version 3.0, from Syracuse Research Corporation, Syracuse, NY.	SIDS Dossier p.62-63
6	-1.08	-1.08	room temp.	No pH adjustments were made.	other (calculated)	no	2A: Acceptable,		calculated	Log Pow was estimated as the quotient of the solubilities of the test substance in n-octanol (33.9 g/l) and in water (409.5 g/l).	2A	x	x	The accurate measurement of Kow is difficult if not impossible for surface active substances, because they tend to accumulate at the octanol/water interface, forming octanol-water emulsions.	The Procter & Gamble Company, 2002C. Determination of the n-Octanol/Water partition coefficient (HPLC method). Test substance ID TSIN GTS02902.	p.13-14; SIDS Dossier p.163-164
7 SIDS	0.95-2.7	2.7	room temp.	No pH adjustments were made.	other (calculated)	no	2A: Acceptable,	Key study	calculated	predicted by comparing published Critical Micellar Concentration (CMC) values of C10 to C14 AOs, in water, with measured octanol solubility values	2A	x		LogKow values between 0.95-2.7 have also been predicted by comparing published Critical Micellar Concentration (CMC) values of C10 to C14 AOs, in water, with measured octanol solubility values; CMC's can be considered as a conservative measure of water solubility for surface active substances (published CMC values were obtained from Mukerjee & Mysels, 1971)	The Procter & Gamble Company, 2002C. Determination of the n-Octanol/Water partition coefficient (HPLC method). Test substance ID TSIN GTS02902. Mukerjee P and Mysels K., 1971. Critical Micelle Concentrations of Aqueous Surfactant Systems. Office of Standard Reference Data National Bureau of Standards Washington, D.C. (NSRDS-NBS 36).	p.13-14; SIDS Dossier p.163-164

基本情報

優先通し番号	169
物質名称	N,N-ジメチルアルカン-1-アミン=オキシド (C=10,12,14,16,18、直鎖型)、(Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9-エン-1-アミン=オキシド又は(9Z,12Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9,12-ジエン-1-アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

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)	キースタディー該非 (評価)	キースタディー該非 (評価)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	2772 L/kg[2B以上の値を用いて推定(2C)]	2772								(Q)SAR		2C		*	WARNING - The entered chemical is a Quaternary Ammonium Compound (QAC). Adsorption of QACs seem to occur mainly by an ion-exchange mechanism and depends on cation-exchange capacity of the sorbent and variety of other parameters (Boethling, 1994). The training set for the Koc estimation of this program did not include any QACs. Therefore, the Koc estimate is outside the program's prediction domain.		
2 HSDB	Koc	5.5	5.5								estimated by calculation	determined from a water solubility of 190,000 mg/L	4C	*	*		SRC	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Fate:
3 NITE初期リスク評価書	Koc	19000	19000								estimated by calculation		4C	*	*		SRC, Syracuse Research Corporation (2003) PckocWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY	p.2
4 SIDS	logKoc	4.271	18663.79691				その他,EPIWIN	その他,n/a	2: reliable with restrictions	-	(Q)SAR	EPIWIN, Version 3.0.	4C	*	*		EPIWIN: Physical/chemical property estimation methods, Version 3.0, from Syracuse Research Corporation, Syracuse, NY.	SIDS Dossier p.62-63
5	Kd	8	511	24	6.1	Soil type 1: pH 6.1; 2.7% organic matter; 3.2% clay	OECD Guideline 106		1A	-	測定値		1A	*	*	C12AO	The Procter & Gamble Company, 2002A. Determination of the adsorption of TSIN GTS02902 onto Three Soils	SIDS Dossier p.178-179
6	Kd	56	12068	24	4.6	Soil type 2: pH 4.6; 0.8% organic matter; 11% clay	OECD Guideline 106		1A	-	測定値		1A	*	*	C12AO	The Procter & Gamble Company, 2002A. Determination of the adsorption of TSIN GTS02902 onto Three Soils	SIDS Dossier p.178-179
7 SIDS	Kd	18	1194	24	7.9	Soil type 3: pH 7.9; 2.6% organic matter; 24% clay	OECD Guideline 106		1A	-	測定値		1A	*	*	C12AO	The Procter & Gamble Company, 2002A. Determination of the adsorption of TSIN GTS02902 onto Three Soils	SIDS Dossier p.178-179
8	Kd	24	1532	24	6.1	Soil type 1: pH 6.1; 2.7% organic matter; 3.2% clay	OECD Guideline 106		1A	-	測定値		1A	*	*	C14AO	The Procter & Gamble Company, 2002A. Determination of the adsorption of TSIN GTS02902 onto Three Soils	SIDS Dossier p.178-179

基本情報

優先通し番号	169
物質名称	N,N-ジメチルアルカン-1-アミン=オキシド(C=10,12,14,16,18、直鎖型)、(Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9-エン-1-アミン=オキシド又は(9Z,12Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9,12-ジエン-1-アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

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)	キースタ ディ-該非 (評価)	キースタ ディ-該非 (評価)	備考	文献	ページ番号等
9	Kd	17	3664	24	4.6	Soil type 2: pH 4.6; 0.8% organic matter; 11% clay	OECD Guideline 106		1A	-	測定値		1A	x	x	C14AO	The Procter & Gamble Company, 2002A. Determination of the adsorption of TSIN GTS02902 onto Three Soils	SIDS Dossier p.178-179
10	SIDS	Kd	33	2188	24	7.9	Soil type 3: pH 7.9; 2.6% organic matter; 24% clay	OECD Guideline 106		1A	測定値		1A	x		C14AO	The Procter & Gamble Company, 2002A. Determination of the adsorption of TSIN GTS02902 onto Three Soils	SIDS Dossier p.178-179

基本情報

優先通し番号	169
物質名称	N,N-ジメチルアルカン-1-アミン=オキシド(C=10,12,14,16,18、直鎖型)、(Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9-エン-1-アミン=オキシド又は(9Z,12Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9,12-ジエン-1-アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

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)	キースタ ディ-該非 (評価)	キースタ ディ-該非 (評価)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	5.18E-006 Pa・m <sup>3</sup> /mol	0.00000518					その他, Experimental Data from PhysProp Database		2C					
2	6.70E-006 Pa・m <sup>3</sup> /mol	0.0000067					(Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	x	x			
3 HSDB	6.6E-11 atm・m <sup>3</sup> /mol	6.68745E-06					estimated by calculation		4C	x	x		US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 3.20. February, 2007. Available from, as of Jun 17, 2008: <a href="http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episutedl.htm">http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episutedl.htm</a>	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
4 NITE初期リスク評価書	6.70E-06 Pa・m <sup>3</sup> /mol[6.70×10 <sup>-6</sup> Pa・m <sup>3</sup> /mol (6.61×10 <sup>-11</sup> atm・m <sup>3</sup> /mol)]	0.0000067					estimated by calculation		4C	x	x		SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY. ( <a href="http://esc.syrres.com/interkow/p_hysdemo.htm">http://esc.syrres.com/interkow/p_hysdemo.htm</a> から引用)	p.2
5 PhysProp	0.0000000000661 atm・m <sup>3</sup> /mol	6.69758E-06					estimated by calculation		4C	x	x		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1991)	Henry's Law Constant
6 REACH登録情報	0.000000012 Pa・m <sup>3</sup> /mol	0.000000012			2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	x	x		study report / 2012	Calc Key Henry's Law constant.001
7 SIDS	1.513E-8 atm・m <sup>3</sup> /mol	0.001533047			2: reliable with restrictions	-	(Q)SAR	EPIWIN, Version 3.0.	4C	x	x		EPIWIN: Physical/chemical property estimation methods, Version 3.0, from Syracuse Research Corporation, Syracuse, NY.	SIDS Dossier p.62-63

基本情報

優先通し番号	169
物質名称	N, N - ジメチルアルカン - 1 - アミン=オキシド (C = 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)、(Z) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9 - エン - 1 - アミン=オキシド又は (9Z, 12Z) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9, 12 - ジエン - 1 - アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

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)	キースタ ディー該非 (評価)	キースタ ディー該非 (評価)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1					23.66[2B以 上の値を用 いて推定 (2C)]	23.66					(Q)SAR		2C		x			
2 EPI Suite		1					28.1[logPo w2.7を用い て推定]	28.1	BCFBAFWIN				(Q)SAR		2C	x				

基本情報

優先通し番号	169
物質名称	N,N-ジメチルアルカン-1-アミン=オキシド (C=10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)、(Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9-エン-1-アミン=オキシド又は(9Z, 12Z)-N,N-ジメチルオクタデカ-9, 12-ジエン-1-アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

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)	備考	文献	ページ番号等
1 SIDS	pKa	4.1 ± 0.1 (n=3)	4.1	25-26.9°C		OECD Guideline 112		1A	Key study	測定値			C10-16AO	The Procter & Gamble Company, 2002B. Determination of the Dissociation Constant in Water of TSIN GTS02902 (Titration method).	p.14; SIDS Dossier p.161

基本情報

優先通し番号	169
物質名称	N, N - ジメチルアルカン - 1 - アミン=オキシド (C = 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)、(Z) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9 - エン - 1 - アミン=オキシド又は (9Z, 12Z) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9, 12 - ジエン - 1 - アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

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	情報源におけるケーススタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	ケーススタディー該非(評価)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	大気	OHラジカル		$2.7 \times 10^{-11}$ molecule/s	$5 \times 10^5$ molecule/c	0.59		0.59	25 deg C			AOPWIN v1.92				推計					
2 MOE初期評価	大気	OHラジカル		$2.7 \times 10^{-11}$ molecule/s	$5 \times 10^5$ molecule/c	0.59		0.59	25 deg C			AOPWIN v1.91			Key Study	推計				U.S. Environmental Protection Agency, AOPWIN™ v1.91	
3 NITE初期リスク評価書	大気	OHラジカル		$2.7 \times 10^{-11}$ molecule/s	$5 \times 10^5$ molecule/c	0.59		0.59	25 deg C			AOPWIN v1.90			Key Study	推計				SRC, Syracuse Research Corporation (2003) AopWin Estimation Software, ver. 1.90, North Syracuse, NY.	
4 SIDS	大気	OHラジカル				4.71 hour		0.393			その他,EPIWIN	AOPWIN (EPIWIN version 3.1).	その他,n/a	2: reliable with restrictions		estimated by calculation	All estimates apply to the pure, dry substance and not their solutions in water.				p.14; SIDS Dossier p.62-63
5 SIDS	水中	加水分解					no		50 °C	pH 4, 7 and	Directive 92/69/EEC, C.7			1A	Key Study	測定値	There was no significant decrease in concentration of the C12 homologue after 45 days at 50 ° C, at any of the pH levels tested.		C10-16AO	The Procter & Gamble Company, 2002D. Hydrolysis of TSIN GTS02902 as a function of pH.	p.16; SIDS Dossier p.168-169

参考情報

優先通し番号	169
物質名称	N, N - ジメチルアルカン - 1 - アミン=オキシド (C = 10, 12, 14, 16, 18、直鎖型)、(Z) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9 - エン - 1 - アミン=オキシド又は(9Z, 12Z) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9, 12 - ジエン - 1 - アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

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 NITE初期リスク評価書		63%	O_2 consumption		化審法TG				experimental result		1643-20-5 C12AO	通商産業省.通商産業公報1995年12月28日, 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報 (http://www.nite.go.jp から引用) ..1995.	p.6
2		68%	DOC removal		化審法TG				experimental result		1643-20-5 C12AO	通商産業省.通商産業公報1995年12月28日, 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報 (http://www.nite.go.jp から引用) ..1995.	p.6
3		100%	Test mat. analysis		化審法TG				experimental result		1643-20-5 C12AO	通商産業省.通商産業公報1995年12月28日, 製品評価技術基盤機構化学物質管理情報 (http://www.nite.go.jp から引用) ..1995.	p.6
4		84%	O_2 consumption		化審法TG						1643-20-5 C12AO	日本石鹼洗剤工業会.界面活性剤のヒト健康影響及び環境影響に関するリスク評価. N,N-ジメチルデシルアミンN-オキシドのヒト健康影響及び環境影響に関するリスク評価平成13年7月. 2001	p.6
5 既存点検事業		54%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1643-20-5 C12AO		
6 既存点検事業		52%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1643-20-5 C12AO		
7 既存点検事業		82%	O_2 consumption		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1643-20-5 C12AO		
8 既存点検事業		68%	DOC removal		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1643-20-5 C12AO		
9 既存点検事業		54%	DOC removal		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1643-20-5 C12AO		
10 既存点検事業		81%	DOC removal		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1643-20-5 C12AO		
11 既存点検事業		100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1643-20-5 C12AO		
12 既存点検事業		100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1643-20-5 C12AO		
13 既存点検事業		100%	Test mat. analysis		化審法TG	yes (incl. certificate)			experimental result		1643-20-5 C12AO		
14 既存点検事業		92%	DOC removal		その他.逆転条件の開放系試験				experimental result		1643-20-5 C12AO		
15 既存点検事業		84%	DOC removal		その他.逆転条件の開放系試験				experimental result		1643-20-5 C12AO		
16 既存点検事業		100%	Test mat. analysis		その他.逆転条件の開放系試験				experimental result		1643-20-5 C12AO		
17 既存点検事業		100%	Test mat. analysis		その他.逆転条件の開放系試験				experimental result		1643-20-5 C12AO		



参考情報

優先通し番号	169
物質名称	N, N - ジメチルアルカン - 1 - アミン=オキシド ( C = 10 , 12 , 14 , 16 , 18、直鎖型)、( Z ) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9 - エン - 1 - アミン=オキシド又は( 9 Z , 12 Z ) - N, N - ジメチルオクタデカ - 9 , 12 - ジエン - 1 - アミン=オキシド
CAS番号	1643-20-5など

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否	値の種類	値の詳細	備考	文献	ページ番号等
SIDS	readily biodegradable	97%	DOC removal	not measured	OECD Guideline 301 E		1A	Key study	experimental result		2605-79-0 C10AO	Th. Goldschmidt AG, 1997. Biologische Abbaubarkeit im modifizierten OECD Screening Test. Report # 970303GS.	p.18; SIDS Dossier p.263-264
	inherently biodegradabl	63%	CO2 (Carbon Dioxide Evolution)	yes	other	no data	2A	Key study	experimental result		70592-80-2 C10-16AO	The Procter & Gamble Company, 1977. A biodegradability study of dodecyl-dimethylamine oxide (DDAO).	p.18; SIDS Dossier p.184-185
	readily biodegradable	93%	その他,COD		OECD TG 301D	no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		61788-90-7 CcocoAO	Akzo Chemie, 1987. Biodegradability of a number of nitrogen derivatives (MU-30).	p.18; Amine oxides, cocoalkyldimethyl SIDS Dossier p.306-307
	その他	57%	DOC removal		OECD TG 301E	no	4: not assignable	not key study	experimental result		61788-90-7 CcocoAO	Hoechst AG, 1989C. Untersuchung des biologischen Abbaus nach dem OECD-Screening-Test 301 E 12 (modifiziert); Alkyl(C12-18)dimethylaminoxid.	Amine oxides, cocoalkyldimethyl SIDS Dossier p.307-308
	その他	47%	-		OECD TG 301E	no	4: not assignable	not key study	experimental result		61788-90-7 CcocoAO	Hoechst AG, 1993A. CAS RN 61788-90-7. Kurzbericht über die Prüfung der biologischen Abbaubarkeit gemäss dem modifizierten OECD Screening-Test 301E und DIN ISO 7827..	Amine oxides, cocoalkyldimethyl SIDS Dossier p.308-309
	Inherently biodegradable	41-48%	COD	not measured	OECD Guideline 301 D	no	2B	key study	experimental result		85408-49-7 C12-16AO	Henkel KGaA, 2000A. (CAS RN 85408-49-7), Ultimate biodegradability in the closed bottle test.	p.18; SIDS Dossier p.344-345
	readily biodegradable	82%	O2 consumption	not measured	OECD Guideline 301 D	no	2B	key study	experimental result		68955-55-5 C12-18AO	Akzo Nobel Chemicals, 1990I. Biodegradation of CAS RN 68955-55-5.	p.18; SIDS Dossier p.248-249