

(案)

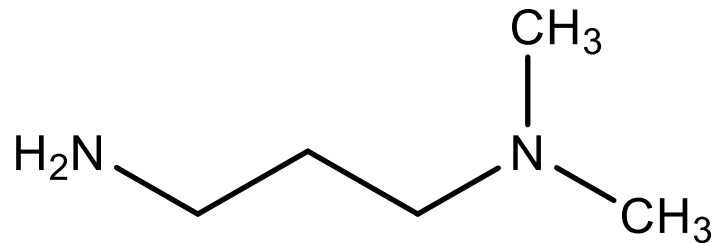
優先評価化学物質のリスク評価 (一次)

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 <sup>1)</sup>	測定値か推計値かは不明	-60 <sup>1)</sup>
沸点	°C	135 <sup>2)</sup>	標準圧力(101.3 kPa)での測定値	135 <sup>2)</sup>
蒸気圧	Pa	800 <sup>2)</sup>	20°Cにおける値。測定値か推計値かは不明	800 <sup>2)</sup>
水に対する溶解度	mg/L	<u>(1 × 10<sup>6</sup>)</u>	水に任意の割合で混和 <sup>2)</sup>	9.33 × 10 <sup>5</sup> <sup>1)</sup>
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	-0.352 <sup>2)</sup>	OECD TG 107による測定値	-0.352 <sup>2)</sup>
ヘンリー係数	Pa・m <sup>3</sup> /mol	5.19 × 10 <sup>-4</sup>	HENRYWIN(v. 3.20) <sup>3)</sup> のBond Estimation法による推計値	5.19 × 10 <sup>-4</sup>
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 <sup>4)</sup> に記載の式により計算	4.398 <sup>3)</sup>
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	(3.16)	BCFBAF(v. 3.01) <sup>3)</sup> による推計値	3.16
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPowとBCFから設定 <sup>5)</sup>	1
解離定数(pKa)	—	pK <sub>1</sub> =10.3 pK <sub>2</sub> =8.0	ACD/Percepta <sup>6)</sup> による推計値	— <sup>7)</sup>

※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情報源<sup>1</sup>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と同じ  
11 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( $1 \times 10^6$  mg/L)を20℃  
21 に補正した値( $9.33 \times 10^5$  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 $1 \times 10^6$  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( $5.19 \times 10^{-4}$  Pa·m<sup>3</sup>/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( $5.19 \times 10^{-4}$  Pa·m<sup>3</sup>/mol)を用いる。

---

<sup>1</sup> 「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

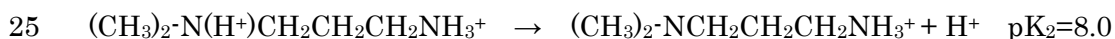
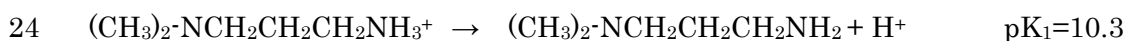
15 評価Ⅰで採用した値は、logPow 及び BCF から化審法における優先評価化学物質に関す  
16 るリスク評価の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。) に従って設定したもの  
17 である。BMF の測定値は得られなかったため、評価Ⅱにおいてもこの値 (1) を用いる。

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、pK<sub>1</sub>=10.3、  
21 pK<sub>2</sub>=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



情報源略称	詳細等
ACD/Percepta	ACD/Labs Percepta
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
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
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
SIDS	OECD: SIDSレポート
SPARC	SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry

基本情報

PACS_F 等	99000
PACS_Name 等	N, N-ジメチルプロパン-1, 3-ジイルジアミン
CASRN	109-55-7
CA_IN	1,3-Propanediamine, N1,N1-dimethyl-
その他番号	
その他名称	

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	-23.31 °C	-23.31	MPBPW N				(Q)SAR		2C	×	×			
2 HSDB	凝固点	-70 °C	-70							2B	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
3 IUCLID	融点	<-60 °C	-60		no data					4A	×	×			p.9
4	融点	<-60 °C	-60		no data					4A	×	×			p.9
5 PhysProp	融点	-60 °C	-60							2B	○	○			
6 ECHA	凝固点	-70 °C [Sets to a glass below freezing point of -70 deg C.]	-70		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		Lewis, R J., Sr (Ed.). Hawley's Condensed Chemical Dictionary. 12th ed..2006, New York, NY: Van Nostrand Rheinhold Co., 1993, p. 413. cited in HSDB 21 Sep 2006.	Exp Key Melting point/freezing point.001
7 SDS	融点	<60 °C	60	その他, D N 51597			key study			2A	×	×			p.4

基本情報

PACS_F 等	99000
PACS_Name 等	N, N-ジメチルプロパン-1, 3-ジイルジアミン
CASRN	109-55-7
CA_IN	1,3-Propanediamine, N1,N1-dimethyl-
その他番号	
その他名称	

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	133 °C	133									4A	×	×			p.1064
2 CRC	129±13 °C	129									4A	×	×			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
3 EPI Suite	134.2 °C	134.2			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
4 HSDB	123 °C	123									4A	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
5 IUCL D	132~140 °C	136				no data					4A	×	×			p 9
6	132~140 °C	136				no data					4A	×	×			p 9
7	135 °C	135	135.00918	1013 hPa							4A	×	×			p 9
8	135 °C	135	135.00918	1013 hPa							4A	×	×			p 9
9 PhysProp	133 °C	133									4A	×	×			
10 ECHA	134.7 °C[measure d]	134.7	135.21719	999.16 mbar		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		1985,1985.6.17.	Exp Key Boiling point 001
11	135.1 °C[standard boiling point (extrapolat ed)]	135.1	135.1	1013 25 hPa		no	2: reliable with restrictions	key study	experimental result		4A	×	×		1985,1985.6.17.	Exp Key Boiling point 001
12 S DS	135 °C	135	135.00918	101.3 kPa	その他,D N 51751			key study			2A	○	○			p.4

基本情報

PACS_F等	99000
PACS_Name等	N, N-ジメチルプロパン-1, 3-ジイルジアミン
CASRN	109-55-7
CA_IN	1,3-Propanediamine, N1,N1-dimethyl-
その他番号	
その他名称	

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	5 mmHg	666.61184	666.61184	20 °C							2B	×	×			p.1064
2	EPI Suite	464 Pa[2B 以上の値を 用いて推定 (2C) ]	464	328.93082	25 °C	MPBPW N				(Q)SAR		2C	×	×			
3	IUCLID	8 hPa	800	800	20 °C					estimated by calculation		4C	×	×			p.10
4		8 hPa	800	800	20 °C					estimated by calculation		4C	×	×			p.10
5		10 hPa	1000	1000	20 °C		no data					4A	×	×			p.10
6		10 hPa	1000	1000	20 °C		no data					4A	×	×			p.10
7		13.3 hPa	1330	676.01061	30 °C							4A	×	×			p.10
8		40 hPa	4000	595.57209	50 °C		no data			estimated by calculation		4C	×	×			p.11
9		40 hPa	4000	595.57209	50 °C		no data			estimated by calculation		4C	×	×			p.11
10	PhysProp	10 mmHg	1333.2237	677.64914	30 °C					experiment al result		2B	×	×			
11	ECHA	5.9 hPa	590	590	20 °C		no	2: reliable with restrictions	key study	experiment al result		4A	×	×		1974,1974.12.16.	Exp Key Vapour pressure 001
12	S DS	8 hPa	800	800	20 °C				key study			2A	○	○			p.4

基本情報

PACS F 等	99000
PACS Name 等	N, N-ジメチルプロパン-1, 3-ジイルジアミン
CASRN	109-55-7
CA IN	1,3-Propanediamine, N1,N1-dimethyl-
その他番号	
その他名称	

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	1000000 mg/L[2B以 上の値を用 いて推定 (2C) ]	1000000	933506.438	25 C		WSKOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2 HSDB	[Sol in water]	単位換算不 可										3	×	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
3 IUCLID	[miscible]	単位換算不 可		20 C	12.2[ca. 12.2 at 100 g/l and 20 degree C]	その他						3	×	×			p.12
4	[miscible]	単位換算不 可		20 C	12.2[ca. 12.2 at 100 g/l and 20 degree C]	その他						3	×	×			p.12
5	[miscible]	単位換算不 可			9.4[= 9.4 at 5 g/l and 20 degree C]	その他	no data					3	×	×			p.12
6	[miscible]	単位換算不 可			9.4[= 9.4 at 5 g/l and 20 degree C]	その他						3	×	×			p.12
7	[miscible]	単位換算不 可			9.4[= 9.4 at 5 g/l and 20 degree C]	その他						3	×	×			p.12
8 PhysProp	1000000 mg/L	1000000	933506.438	25 C						experimenta l result		2B	○	×			
9 ECHA	>1000 g/L[soluble (1000-10000 mg/L)]	1000000			[no data on pH]		no data	2: reliable with restrictions	key study	experimenta l result		4A	×	×		Lewis, R.J., Sr (Ed.).Hawley's Condensed Chemical Dictionary. 12th ed.,1993,New York, NY: Van Nostrand Rheinhold Co., 1993, p. 413. cited in HSDB 21 Sep 2006.	Exp Key Water solubility,001
10 SIDS	[miscible at 20 C]	単位換算不 可		20 C					key study			3	×	○			p.4

基本情報

PACS_F等	99000
PACS_Name等	N,N-ジメチルプロパン-1,3-ジイルジアミン
CASRN	109-55-7
CA_IN	1,3-Propanediamine, N1,N1-dime hyl-
その他番号	
その他名称	

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	-0.45	-0.45			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2 IUCL D	-0.4	-0.4			その他,Medchem Software CLOGP3, Release 3.42 (1986)				estimated by calculation		4C	×	×			p.11
3 IUCL D	-0.352	-0.352	25 °C		OECD TG	no					1B	○	○			p.11
4 IUCL D	-0.352	-0.352	25 °C		OECD TG	no					1B	○	○			p.11
5 IUCL D	-0.352	-0.352	25 °C		OECD TG	no					1B	○	○			p.11
6 PhysProp	-0.45	-0.45							estimated by calculation		4C	×	×		MEYLAN,W.M & HOWARD,PH.1995.	
7 ECHA	-0.352	-0.352	25 °C	[Study was performe d without adjustme nt of pH value.]	OECD TG 107	no	2: reliable with restriction s	key study	experimental result		1B	○	○		1988,1988 2.3.	Exp Key Partition coefficient.001
8 S DS	-0.352	-0.352			OECD TG 107			key study	その他(測定 値)		1B	○	○			p.4

基本情報

PACS F 等	99000
PACS Name 等	N, N-ジメチルプロパン-1, 3-ジイルジアミン
CASRN	109-55-7
CA IN	1,3-Propanediamine, N1,N1-dimethyl-
その他番号	
その他名称	

◀ 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	4 398 L/kg[2B 以上の値を用 いて推定 (2C) ]	4 398				KOCWIN				(Q)SAR		2C	○				
2 ECHA	Koc	73.36	73.36			soil		no	2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×			2007	Calc Key Adsorption / desorption 001
3 Franco	Koc	37 L/kg[2B以 下の値を用いて 推定(2C)]	37(非解離種) 32(カチオン種)								回帰式 非解離種		2C	-	○			

基本情報

PACS_F等	99000
PACS_Name等	N, N-ジメチルプロパン-1, 3-ジイルジアミン
CASRN	109-55-7
CA_IN	1,3-Propanediamine, N1,N1-dimethyl-
その他番号	
その他名称	

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	0.000519 Pa·	0.000519					(Q)SAR		2C	○	○			
2 IUCL D	1.46E-2 Pa·m <sup>3</sup> /mol	0.0146							4A	×	×			p.19
3	3.5E-4 Pa· m <sup>3</sup> /mol[bond contribution log gamma 1 = 6.84]	0.00035							4A	×	×			p.19
4	4.4E-4 Pa· m <sup>3</sup> /mol[group contribution log gamma 1 = 6.74]	0.00044							4A	×	×			p.19
5 PhysProp	0.0000000662 atm· m <sup>3</sup> /mol	0.000670772					estimated by calculation		4C	×	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH.1991.	
6 ECHA	<0.00067 Pa· m <sup>3</sup> /mol[The data refer to the uncharged molecule]	0.00067			2: reliable with restrictions	key study	estimated by calculation		4C	×	×		2008,2008 3 25.	Calc Key Henry's Law constant.001



基本情報

PACS F 等	99000
PACS Name 等	N, N-ジメチルプロパン-1, 3-ジイルジアミン
CASRN	109-55-7
CA N	1,3-Propanediamine, N1,N1-dimethyl-
その他番号	
その他名称	

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	信頼性ラック (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) ]	3.16	BCFBFAWIN				(Q)SAR		2C	○	○			

基本情報

PACS F 等	99000
PACS_Name 等	N, N-ジメチルプロパン-1, 3-ジイルジアミン
CASRN	109-55-7
CA_IN	1,3-Propanediamine, N1,N1-dimethyl-
その他番号	
その他名称	

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 SPARC	pKa	7.95	算出不可							estimated by calculation		×			
2	pKa	10.3	算出不可							estimated by calculation		×			
3 ACD/Percept a	pKa	10.3								推計値		○			
4 ACD/Percept a	pKa	8								推計値		○			

基本情報

PACS_F 等	99000
PACS_Name 等	N, N-ジメチルプロパン-1, 3-ジイルジアミン
CASRN	109-55-7
CA_IN	1,3-Propanediamine, N1,N1-dimethyl-
その他番号	
その他名称	

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
------	---	----	--------	--------	--------	-----	-----	------------------	--------	----	-------	--------	-----	-------------	--------------------------

基本情報

PACS F 等	99000
PACS Name 等	N, N-ジメチルプロパン-1, 3-ジイルジアミン
CASRN	109-55-7
CA IN	1,3-Propanediamine, N1,N1-dimethyl-
その他番号	
その他名称	

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 IUCL D	readily biodegradable	65%			OECD TG 301D	no							p.23
2	readily biodegradable	65%			OECD TG 301D	no							p.23
3		69%			OECD TG 301D	no							p.23
4		69%			OECD TG 301D	no							p.23
5 ECHA		90%	DOC removal		OECD TG 301A (DOC Die Away Test)	yes	1: reliable without restriction	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			2005,2005.9 5.	Read across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.002
6		100%	DOC removal		OECD TG 301A (DOC Die Away Test)	yes	1: reliable without restriction	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			2005,2005.9 5.	Read across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.002
7			Test mat. analysis		OECD TG 301A (DOC Die Away Test)	yes	1: reliable without restriction	key study	read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)			2005,2005.9 5.	Read across Subs Key Biodegradation in water: screening tests.002
8 SIDS	その他	69%			OECD TG 301D			key study	その他 (測定値)				p.4, 7
9 SIDS	その他	65%			OECD TG 301D			key study	その他 (測定値)				p.4, 7