

(案)

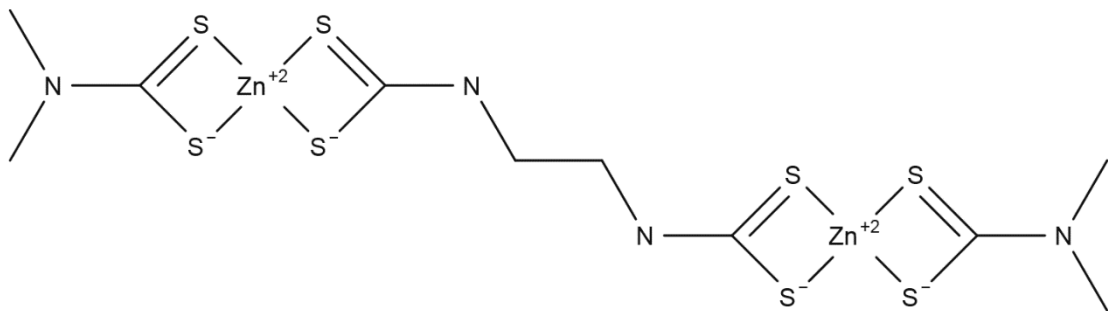
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

ビス（N，N-ジメチルジチオカルバミン酸）
N，N'-エチレンビス（チオカルバモイルチオ亜鉛）
（別名ポリカーバメート）

優先評価化学物質通し番号 42



令和 2 年 1 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 評価対象物質の設定	1
5	1-2 物理化学的性状及び濃縮性（ポリカーバメート）	3
6	1-3 分解性（ポリカーバメート）	5
7	1-4 物理化学的性状及び濃縮性（イミダゾリジン-2-チオン）	7
8	1-5 分解性（イミダゾリジン-2-チオン）	9
9	2 【付属資料】	11
10	2-1 物理化学的性状等一覧	11
11	2-2 その他	12
12		
13		
14		
15		

16 1 評価対象物質の性状

17 本章では、優先評価化学物質「ビス（N，N－ジメチルジチオカルバミン酸）N，N’－
18 エチレンビス（チオカルバモイルチオ亜鉛）（別名ポリカーバメート）」のリスク評価に用い
19 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。

20

21 1-1 評価対象物質の設定

22 ビス（N，N－ジメチルジチオカルバミン酸）N，N’－エチレンビス（チオカルバモイ
23 ルチオ亜鉛）（別名ポリカーバメート）（以下「ポリカーバメート」という。）は、化審法の分
24 解度試験¹が実施されている。報告書では、「ポリカーバメート」は各種溶媒への溶解性が悪
25 く、また、速やかに変化するため、適切な分析条件を確立することができなかったとの記載
26 がある。また、試験条件下において、ポリカーバメートは全て変化し、イミダゾリジン－2
27 ーチオン（CAS： 96-45-7）、ジメチルジチオカルバミン酸（CAS： 79-45-8）、ジメチルア
28 ミン（CAS： 124-40-3、優先評価化学物質：16）、二硫化炭素（CAS： 75-15-0、優先評価
29 化学物質：1）及び亜鉛を含む不明変化物（大部分は不溶性変化物）を生成し、これらの変
30 化物は微生物による分解がされずに残留したとの記載がある。

31 一方、変化物であるイミダゾリジン－2－チオン、ジメチルアミン及び二硫化炭素の三物
32 質については、それぞれ当該物質の既存点検が実施されている。

33 変化物であるイミダゾリジン－2－チオンを対象にした分解度試験²結果によれば、酸素
34 消費量分解度：0%、TOC 分解度：0%、LC 分解度：1.2%であり、実環境においても変化物
35 であるイミダゾリジン－2－チオンは残留しないと考えるににくい。

36 変化物のジメチルアミンについては、良分解判定³されており、ポリカーバメートの分解
37 度試験でジメチルアミンが残留しているが、実環境では変化物のジメチルアミンは残留し
38 ないと考えられる。

39 変化物の二硫化炭素についても、良分解判定⁴されており、ポリカーバメートの分解度試
40 験で二硫化炭素が残留しているが、実環境では変化物の二硫化炭素は残留しないと考えら
41 れる。

42 変化物のジメチルジチオカルバミン酸については、分解度試験の情報がないが、ジメチル
43 ジチオカルバミン酸ナトリウム塩（128-04-1）について分解度試験の情報⁵があり、良分解
44 判定されているジメチルアミンと二硫化炭素に変化したとの情報があった。そのため、実環
45 境では変化物のジメチルジチオカルバミン酸は残留しないと考えられる。また、亜鉛を含む
46 不明変化物（大部分は不溶性変化物）についても分解度試験の情報がないが、どのような形

¹ 2006 METI

² 1978 MITI

³ 1998 MITI

⁴ 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）

⁵ 1990 MITI

47 態であるか不明であり、物質の同定ができないため評価の対象としないこととする。

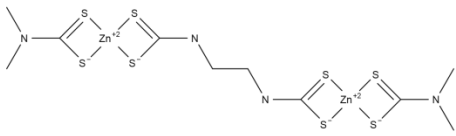
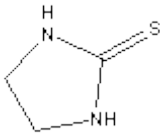
48

49 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
50 用による化学的变化を生じにくいものとされている点⁶を踏まえて、評価対象物質には親化
51 合物であるポリカーバメートと、変化物の一つであるイミダゾリジン-2-チオンを設定
52 する。

53

54

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	ビス(N, N-ジメチルジチオカルバミン酸)N, N'-エチレンビス(チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名ポリカーバメート)	イミダゾリジン-2-チオン
分子式	C ₁₀ H ₁₈ N ₄ S ₈ Zn ₂	C ₃ H ₆ N ₂ S
優先評価化学物質通し番号	42	—
CAS 登録番号	64440-88-6	96-45-7

55

56

57

58

⁶ 化審法第二条第3項一(ロ)または二(ロ)「当該化学物質が自然的作用による化学的变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变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变化を生じにくいものに限る。)であること。」

59 1-2 物理化学的性状及び濃縮性（ポリカーバメート）

60 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、評価Ⅱにお
61 いて精査した結果、評価Ⅰから変更した箇所はなかった。

62

63 表 1-2 モデル推計に採用した物理化学的性状等データのまとめ

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	—	581.61	—	581.61
融点	°C	143.4 ¹⁾	測定値 (OECD TG 102)	143.4 ¹⁾
沸点	°C	— (測定不可) ¹⁾	230°C付近で褐色に変化	—
蒸気圧	Pa	1.53×10^{-10} ²⁾	MPBPVPによる推計値	1.53×10^{-10} ²⁾
水に対する溶解度	mg/L	2.7 ¹⁾	20°Cでの測定値	2.7 ¹⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	1.53 ²⁾	KOWWINによる推計値	1.53 ²⁾
ヘンリー係数	Pa·m ³ /mol	8.82×10^{-13} ²⁾	HENRYWINによる推計値	8.82×10^{-13} ²⁾
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	824 ²⁾	KOCWINによる推計値	824 ²⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	4.748 ²⁾	BCFBAFWINによる推計値	4.748 ²⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	1 ³⁾	logPowとBCFから設定	1 ³⁾
解離定数(pKa)	—	—	解離性の基を有さない物質	—

64 1) METI(2004)

3) MHLW, METI, MOE(2014)

65 2) EPI Suite(2012)

66

67 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

68 ①融点

69 評価Ⅰで採用した値は、METI(2004)に記載されたOECD TG 102による測定値
70 (143.4°C)である。評価Ⅱにおいてもこの値(143.4°C)を用いる。

71

72 ②沸点

73 既存点検METI(2004)においてOECD TG 103に従い測定しているが、230°C付近で褐
74 色に変化してしまったため、測定不可との記載がある。そのため、評価Ⅱにおいても数値を
75 設定しない。

76

77 ③蒸気圧

78 評価Ⅰで採用した値は、EPI SuiteのMPBPWINで推計された25°Cでの蒸気圧($2.16 \times$
79 10^{-10} Pa)を20°Cに補正したものである。評価Ⅱにおいても、この値(1.53×10^{-10} Pa)を用
80 いる。

81

82 ④水に対する溶解度

83 評価Ⅰで採用した値は、既存点検METI(2004)に提供者からの添付資料情報として記載
84 のある値(2.7mg/L)である。それ以上の資料は見つけることができなかったため、評価Ⅱにお

85 いても、この値 (2.7 mg/L) を用いる。

86

87 ⑤logPow

88 評価Ⅰで採用した値は、EPI Suite の KOWWIN の推計値 (1.53) である、評価Ⅱにおい
89 てもこの値 (1.53) を用いる。

90

91 ⑥ヘンリー係数

92 評価Ⅰで採用した値は、EPI Suite の HENRYWIN の推計値 (8.82×10^{-13} Pa·m³/mol)
93 である。評価Ⅱにおいてもこの値 (8.82×10^{-13} Pa·m³/mol) を用いる。

94

95 ⑦Koc

96 評価Ⅰで採用した値は、EPI Suite の KOCWIN の推計値(824 L/kg)である。評価Ⅱにお
97 いてもこの値 (824 L/kg) を用いる。

98

99 ⑧BCF

100 評価Ⅰで採用した値は、EPI Suite の推計値 (4.748 L/kg) である。評価Ⅱにおいてもこ
101 の値 (4.748 L/kg) を用いる。

102

103 ⑨BMF

104 評価Ⅰで採用した値は、logPow (1.53) 及び BCF (4.748L/kg) から化審法における優先
105 評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」という。) に
106 従っ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においてもこの
107 値 (1) を用いる。

108

109 ⑩解離定数

110 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。評価Ⅱにおいても
111 本物質は解離性を考慮しないこととする。

112

113

114

115 1-3 分解性（ポリカーバメート）

116 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

117

118

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	0.05	AOPWIN (V. 1.92) ¹⁾ 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 5×10^5 molecule/cm ³ 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	NA	殺菌剤 ²⁾
		加水分解	NA	すぐに変化 ²⁾
		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	NA	
		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	NA	
		加水分解	NA	

119

1) EPI Suite(2012)

120

2) METI(2004)

NA:情報が得られなかったことを示す

121

122 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
123 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。

124

125 ①大気

126 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
127 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。

128 ① -1 OH ラジカルとの反応の半減期

129 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
130 ため、AOPWIN (v1.92) により推計された 2.84×10^{-10} cm³/molecule/s を半減期算出に採用
131 する。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの 5×10^5 molecule/cm³ とした場合、半減
132 期は 0.05 日と算出される。評価Ⅱではこの値 (0.05 日) を用いる。

133

134 ② 水中

135 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、METI(2004) において、「ポリ
136 カーバメート」は各種溶媒への溶解性が悪く、また、速やかに変化するため、適切な分析
137 条件を確立することができなかったとの記載がある、また、試験条件下において、ポリカー

138 バメートは全て変化し、イミダゾリジン-2-チオン、ジメチルジチオカルバミン酸、ジメ
139 チルアミン、二硫化炭素及び亜鉛を含む不明変化物（大部分は不溶性変化物）を生成し、こ
140 れらの変化物は微生物による分解がされずに残留したとの記載がある。

141 ② -1 生分解の半減期

142 水中での生分解半減期に関するデータは得られなかった。また、METI (2004) において
143 は、試験濃度以上溶解しなかったため DOC 分解度は算出されておらず、参考までに示され
144 ている BOD 分解度については、値がマイナス（平均-16）となっていた。

145 ② -2 加水分解の半減期

146 METI (2004) において、ポリカーバメートは全て変化し、イミダゾリジン-2-チオン、
147 ジメチルジチオカルバミン酸、ジメチルアミン、二硫化炭素及び亜鉛を含む不明変化物（大
148 部分は不溶性変化物）を生成し、これらの変化物は微生物による分解がされずに残留したと
149 の記載があった。

150

151 ③ 土壌

152 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。

153

154 ④ 底質

155 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
156 る情報も得られなかった。

157

158 1-4 物理化学的性状及び濃縮性（イミダゾリジン-2-チオン）

159 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。

161 表 1-4 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	—	102.16	—	—
融点	°C	198 ¹⁾	測定値	—
沸点	°C	240 ¹⁾	101.3 kPa での測定値	—
蒸気圧	Pa	0.0468 ²⁾	測定値である融点及び沸点を用いた 20°C での推定値	—
水に対する溶解度	mg/L	27,400 ¹⁾	20°C での測定値	—
1-オクタノールと水との間の分配係数 (logPow)	—	-0.67 ¹⁾	測定値	—
ヘンリー係数	Pa·m ³ /mol	0.034 ²⁾	推計値	—
有機炭素補正土壌吸着係数 (Koc)	L/kg	13 ³⁾	土壌 (silt loam soil) での推定値	—
生物濃縮係数 (BCF)	L/kg	1.8 ⁴⁾	濃縮度試験における測定値	—
生物蓄積係数 (BMF)	—	1 ⁵⁾	logPow と BCF から設定	—
解離定数 (pKa)	—	1.6		—

162 1) ECHA

4) MITI (1982)

163 2) EPI Suite (2012)

5) MHLW, METI, MOE (2014)

164 3) HSDB

166 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

167 ① 融点

168 EHCA に記載された OECD TG 102 の測定値(198°C)を用いる。なお、CCD (2007)、EHC、
169 HSDB、Merck、MOE (2004)、NITE (2008)、PhysProp 等にも 196 ~204°C との記載がある。

171 ② 沸点

172 EHCA に記載された OECD TG 103 の測定値(240°C)を用いる。なお、PhysProp には
173 347.18 °C との記載があるが、測定値かどうか不明である。

175 ③ 蒸気圧

176 測定値である融点、沸点を用いて EPI Suite の MPBPWIN の 20°C の推定値である蒸気
177 圧の値 (0.0468 Pa) を用いる。

179 ④ 水に対する溶解度

180 EHCA に記載された OECD TG 105 の 20°C での測定値(27,400 mg/L) を用いる。なお、
181 EHC、HSDB、Merck、PhysProp には、20,000 mg/L との記載があるが TG 等については
182 不明である。

183

184 ⑤ logPow

185 EHCAに記載された OECD TG 107 の測定値(-0.67) を用いる。なお、EHC、HSDB、
186 PhysProp にも、-0.66~-0.67 との記載があるが TG 等については不明である。

187

188 ⑥ ヘンリー係数

189 EPI Suite の HENRYWIN の推計値 (0.034 Pa・m³/mol) を用いる。

190

191 ⑦ Koc

192 HSDBに記載されている土壌 (silt loam soil) での推定値 (13 L/kg) を用いる。

193

194 ⑧ BCF

195 既存点検結果である MITI (1982) の第二濃度区の値 (1.8 L/kg) を用いる。

196

197 ⑨ BMF

198 BMF の測定値は得られなかったため、logPow (-0.67) 及び BCF (1.8 L/kg) から化審法にお
199 ける優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス (以下、「技術ガイダンス」と
200 いう。) に従った値 (1) を用いる。

201

202 ⑩ 解離定数

203 SPARC (2016)での推計値(1.6)を用いる。pKa=1.6 であるため、水中では pH 1.0、2.0、3.0、
204 4.0、5.0 においてそれぞれ 20%、72%、96%、100%、100%が非解離種として存在すると判
205 断された。

206

207

208

209

210 1-5 分解性（イミダゾリジン-2-チオン）

211 下表にモデル推計に採用した分解に係るデータを示す。

212

213

表 1-5 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	0.13	AOPWIN (V. 1.92) ¹⁾ 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 5×10^5 molecule/cm ³ として算出 ¹⁾
		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	NA	
		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	28	未馴化の好気的な条件下での最大値 ²⁾
		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	112	水中生分解半減期の4倍と仮定
		加水分解	NA	

214 1) EPI Suite (2012)

215 2) Howard (1991)

NA: 情報が得られなかったことを示す

216

217 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
218 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。

219

220 ①大気

221 大気中での総括分解半減期に関する情報について、情報は得られなかった。また、機序別
222 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。

223 ① -1 OH ラジカルとの反応の半減期

224 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
225 ため、AOPWIN (v1.92) により推計された 1.26×10^{-10} cm³/molecule/s を半減期算出に採用
226 する。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスの 5×10^5 molecule/cm³ とした場合、半減
227 期は 0.13 日と算出される。評価Ⅱでは、この値 (0.13 日) を採用したなお、PhysProp に
228 おいても OH ラジカルとの反応についての記載があり、25°Cにおける反応速度定数は、 1.40
229 $\times 10^{-10}$ cm³/molecule/s (半減期は 0.12 日) とされている。また、Howard (1991)には、光
230 酸化反応による推計値として 0.5 から 4.7 時間 (0.02~0.18 日) との記載があった。

231

232 ②水中

233 水中での総括分解半減期に関する情報は得られなかったが、生分解と加水分解の機序別
234 の半減期に関する情報が得られた。

235 ② -1 生分解の半減期

236 水中での生分解半減期に関するデータは得られなかったため、評価Ⅱにおける水中での
237 生分解の半減期は設定しない。

238 なお、MITI (1978)において、被験物質濃度 100 mg/L、活性汚泥濃度 30 mg/L で 14 日
239 間試験（環保業第 5 号・薬発第 615 号・49 基局第 392 号 微生物等による化学物質の分解
240 試験）を行った結果、BOD 分解度、TOC 分解度、GC 分解度はそれぞれ 0%、0%、1.5%
241 であった。一方、Howard (1991)において、未馴化の好気的な土壌サンプルを用いた試験結
242 果から水中での生分解の半減期を 672 時間と算出している。

243 ② -2 加水分解の半減期

244 NITE (2008)において、2-イミダゾリジンチオンは pH 5~9、90℃の条件下では水中で安
245 定であり、3 か月間、加水分解されない(Cruickshank and Jarrow, 1973) との記載がある。

246 ② -3 光分解の半減期

247 水中での光分解半減期に関するデータは得られなかった。2-イミダゾリジンチオンの 0.5
248 ~50 mg/L 水溶液は、夏季の太陽光照射により光分解されなかったが、シリカゲルと溶存
249 酸素が存在すると、2-イミダゾリジンチオンの水溶液は太陽光により急速に光分解されて 2-
250 イミダゾリドン(別名：エチレンウレア、エチレン尿素)などを生じた(Cruickshank and
251 Jarrow, 1973; Ross and Crosby, 1973)との記載がある。

252

253 ③土壌

254 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、生分解の機序別の半減期
255 に関する情報が得られた。

256 ③ -1 生分解の半減期

257 Howard (1991)において、未馴化の微生物を用いた分解半減期は、好気的な条件下では 7
258 ~28 日、嫌気的な条件下では 28~112 日とされている。評価Ⅱでは、未馴化の好気的な条
259 件下での最大値である 28 日を採用した。

260

261 ④底質

262 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
263 る情報も得られなかった。

264 ④ -1 生分解の半減期

265 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、技術ガイド
266 スに従って、水中の生分解半減期の 4 倍である 112 日とする。

267

268 **2 【付属資料】**

269 **2-1 物理化学的性状等一覧**

270 収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

271

272 出典)

273 CCD (2007): Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th Edition

274 Cruickshank and Jarrow, 1973: Cruickshank, P.A. and Jarrow, H.C. (1973) Ethylenethiourea

275 degradation. J. Agr. Food Chem., 21,333-335.

276 ECHA: Information on Chemicals – Registered substances. [https://echa.europa.eu/information-on-](https://echa.europa.eu/information-on-chemicals)
277 chemicals (2019-6-13 閲覧).

278 EHC: ENVIRONMENTAL HEALTH CRITERIA 78

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

280 Howard (1991): Howard, P. H. et al. Handbook of Environmental Degradation Rates. Lewis
281 publishers, 1991.

282 HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. [http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB)
283 bin/sis/htmlgen?HSDB, (2019-06-13 閲覧).

284 Merck (2016): The Merck Index online

285 METI (2004): ビス(N,N-ジメチルジチオカルバミン酸)N,N-エチレンビス(チオカルバモイルチオ亜
286 鉛) (被験物質番号 K-863) の物理化学的性状の測定 報告書. 既存化学物質点検, 2004.

287 METI (2006): ビス(N,N-ジメチルジチオカルバミン酸)N,N-エチレンビス(チオカルバモイルチオ亜
288 鉛) (被験物質番号 K-863) の微生物による分解度試験 最終報告書. 既存化学物質点検,
289 2006.

290 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
291 ダンス, V. 暴露評価～排出源ごとの暴露シナリオ～. Ver. 1.0, 2014.

292 MITI (1978): 2-メルカプトイミダゾリン (試料 No.K-378) の分解度試験成績報告書. 既存化学物
293 質点検, 1978.

294 MITI (1982): 2-メルカプトイミダゾリン (試料 No.K-378) の濃縮度試験報告書. 既存化学物質点
295 検, 1982.

296 MITI (1990): ジアルキル(C=1~4)ジチオカルバミン酸アルカリ塩(Na,K)[ジメチルジチオカルバミ
297 ン酸ナトリウム (被験物質番号.K-926)試験実施]の微生物による分解度試験報告書. 既存化
298 学物質点検, 1990.

299 MITI (1998): ジメチルアミン (被験物質番号 No.K-41) の微生物による分解度試験報告書. 既
300 存化学物質点検, 1998.

301 MOE (2004): 化学物質の環境リスク評価 第3巻, 2-イミダゾリジンチオン. 2004.

302 NITE (2008): 化学物質の初期リスク評価書, 2-イミダゾリジンチオン. Ver. 1.0, No. 147, 2008.

303 Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2019-06-13 閲覧).

304 Ross and Crosby, 1973: Ross, R.D. and Crosby, D.G. (1973) Photolysis of ethylenethiourea. J. Agr.
305 Food Chem., 21, 335-337.

306 SPARC (2016): ARChem's physicochemical calculator <http://www.archemcalc.com/sparc.html>

307

308

309 **2-2 その他**

310 特になし。

311

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
EHC	WHO/IPCS:「環境保健クライテリア(EHC)」
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
Howard Deg	Handbook of Environmental Degradation Rates
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
Merck	The Merck Index, 15th Ed, Merck & Co, RSC Publishing
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
SPARC	SPARC Performs Automated Reasoning in Chemistry
既存点検事業	化審法既存点検事業の試験結果
REACH登録情報	REACH登録情報

PACS_F等	42000
PACS_Name等	ビス(N, N-ジメチルジチオカルバミン酸)N, N'-エチレンビス(チオカルバモイルチオ亜鉛)(別名ポリカーバメート)
CASRN	64440-88-6
CA_IN	Zinc, bis(dimethylcarbamdithioato- κ S, κ S')[μ -[[1,2-ethanediy]bis[carbomodithioato- κ S, κ S]](2-)]di- (9CI)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(C(=S)S[Zn]SC(=S)NCCNC(=S)S[Zn]SC(=S)N(C)C)C

分子量

収集データ

	情報源名	値	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	581.54			
2		581.54			
3	既存点検事業	581.61		-	K0863
4		581.61		-	K0863

PACS_F 等	42000
PACS_Name 等	ビス (N, N-ジメチルジチオカルバミン酸) N, N'-エチレンビス (チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名ポリカーバメート)
CASRN	64440-88-6
CA_IN	Zinc, bis(dimethylcarbamoedithioato-kS,kS')[μ-[1,2-ethanediy]bis(carbamodithioato-kS,kS')](2-)]di- (9CI)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(C(=S)S[Zn]SC(=S)NCCNC(=S)S[Zn]SC(=S)N(C)C)C

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価 I)	キースタ ディ-該非 (評価 I)	キースタ ディ-該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	融点	267.52 °C	267.52	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
2 既存点検事 業	融点	143.4 °C	143.4	OECD TG 102	-	-	-	experimental result		1B	○	×			K0863

PACS_F 等	42000
PACS_Name 等	ビス (N, N-ジメチルジチオカルバミン酸) N, N'-エチレンビス (チオカルバモイルチオ並鉛) (別名ポリカーバメート)
CASRN	64440-88-6
CA_IN	Zinc, bis(dimethylcarbamodithioato-κS,κS')μ-[[1,2-ethanediy]bis(carbamodithioato-κS,κS')](2-)]di- (9CI)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(C(=S)S[Zn]SC(=S)NCCNC(=S)S[Zn]SC(=S)N(C)C)C

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPaにおける 沸点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価 I)	キースタ ディ-該非 (評価 I)	キースタ ディ-該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	617.58 °C	617.58			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	○	×			
2 既存点検事 業	[測定付加 (230°C付 近で褐色に 変化)]	単位換算 不可			OECD TG 103	-	-	-	-		3	×	×			K0863

PACS_F 等	42000
PACS_Name 等	ビス (N, N-ジメチルジチオカルバミン酸) N, N'-エチレンビス (チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名ポリカーバメート)
CASRN	64440-88-6
CA_IN	Zinc, bis(dimethylcarbomodithioato-κS,κS')[[μ-[[1,2-ethanediylbis(carbamodithioato-κS,κS')]](2-)]di- (9CI)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(C(=S)S[Zn]SC(=S)NCCNC(=S)S[Zn]SC(=S)N(C)C)C

▲ 蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ランク (評価 I)	キースタディ-該非 (評価 I)	キースタディ-該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	2.16E-10 Pa[2C以下の値を用いて推定 (4)]	2.16E-10	1.53E-10	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		4C	○	×			

PACS_F 等	42000
PACS_Name 等	ビス (N, N-ジメチルジチオカルハミン酸) N, N'-エチレンビス (チオカルハモイルチオ亜鉛) (別名ホリカーバメート)
CASRN	64440-88-6
CA_IN	Zinc, bis(dimethylcarbamdithioato-κS,κS')[[μ-[[1,2-ethanediybis[carbamdithioato-κS,κS'][(2-)]]]di- (9CI)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(C(=S)S[Zn]SC(=S)NCCNC(=S)S[Zn]SC(=S)N(C)C)C

▲ 水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20℃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	815.6 mg/L[2C以下 の値を用い て推定 (4) 1	815.6	761.367851	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		4C	×	×			
2 既存点検事業	2.7 mg/L	2.7				-	-	-	-	-		4A	○	×	提供者 (アグリード) 添付資料.		K0863

PACS_F 等	42000
PACS_Name 等	ビス（N， N-ジメチルジチオカルバミン酸）N， N'-エチレンビス（チオカルバモイルチオ亜鉛）（別名ポリカーバメート）
CASRN	64440-88-6
CA_IN	Zinc, bis(dimethylcarbamodithioato-κS,κS')[μ-[[1,2-ethanediylbis(carbamodithioato-κS,κS')](2-))]di- (9CI)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(C(=S)S[Zn]SC(=S)NCCNC(=S)S[Zn]SC(=S)N(C)C)C

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源にお けるキースタ ディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	1.53	1.53			KOWWIN				(Q)SAR		2C	○	×			

PACS_F 等	42000
PACS_Name 等	ビス (N, N-ジメチルジチオカルバミン酸) N, N'-エチレンビス (チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名ポリカーバメート)
CASRN	64440-88-6
CA_IN	Zinc, bis(dimethylcarbamodithioato-κS,κS')][μ-[1,2-ethanediylbis(carbamodithioato-κS,κS')](2-)]di- (9CI)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(C(=S)S[Zn]SC(=S)NCCNC(=S)S[Zn]SC(=S)N(C)C)C

↑ Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	824 L/kg[2C以 下の値を用い て推定 (4)]	824				KOCWIN				(Q)SAR		4C	○	×			

PACS_F 等	42000
PACS_Name 等	ビス (N, N-ジメチルジチオカルバミン酸) N, N'-エチレンビス (チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名ポリカーバメート)
CASRN	64440-88-6
CA_IN	Zinc, bis(dimethylcarbamodithioato-kS,kS')[μ-[1,2-ethanediy]bis(carbamodithioato-kS,kS')] (2-)]di- (9CI)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(C(=S)S[Zn]SC(=S)NCCNC(=S)S[Zn]SC(=S)N(C)C)C

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	8.82E-13 Pa・ m ³ /mol	8.82E-13	20 °C				(Q)SAR		2C	○	×			

PACS_F 等	42000
PACS_Name 等	ビス (N, N'-ジメチルジチオカルバミン酸) N, N'-エチレンビス (チオカルハモイルチオ亜鉛) (別名ホリカーバメート)
CASRN	64440-88-6
CA_IN	Zinc, bis(dimethylcarbamodithioato-kS,kS')μ-[1,2-ethanediy]bis[carbamodithioato-kS,kS'][(2-)]di- (θCl)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(C(=S)S[Zn]SC(=S)NCCNC(=S)S[Zn]SC(=S)N(C)C)C

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区番号	被験物質設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるキースタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラック (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		4.748 L/kg (wet)[2C以下の値を用いて推定(4)]	4.748	BCFBAFWIN				(Q)SAR		4C	○	×			

PACS_F 等	42000
PACS_Name 等	ビス (N, N-ジメチルジチオカルバミン酸) N, N'-エチレンビス (チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名ポリカーバメート)
CASRN	64440-88-6
CA_IN	Zinc, bis(dimethylcarbamodithioato-κS,κS')[[μ-[[1,2-ethanediy]bis(carbamodithioato-κS,κS')]](2-)]di- (9CI)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(C(=S)S[Zn]SC(=S)NCCNC(=S)S[Zn]SC(=S)N(C)C)C

解離定数

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
------	----	---	------	------------	----	-------	-----	-------------	--------------------------	------	---------	--------------------	----	----	--------

PACS_F等	42000
PACS_Name等	ビス (N, N-ジメチルジチオカルバミン酸) N, N'-エチレンビス (チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名ポリカーバメート)
CASRN	64440-88-6
CA_IN	Zinc, bis(dimethylcarbamodithioato-kS,kS')μ-[1,2-ethanediylbis(carbamodithioato-kS,kS')](2-)]di- (9CI)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(C(=S)S[Zn]SC(=S)NCCNC(=S)S[Zn]SC(=S)N(C)C)C

▲ 環境中運命

収集データ

情報源名	相	機序	分解速度定数	反応速度定数	ラジカル濃度	半減期	分解度	統一表記 半減期[day]	測定条件温度	ph	試験方法等	BIOWIN	GLP	reliability	情報源における キースタディの該 非	値の種類	値の種類の詳細	キースタディ該 非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	水域	生分解									BIOWIN	Months				(Q)SAR	Biowin3 Ultimate Biodegradation	x			
2	大気	OHラジカルとの反応		284.4272E-12 cm ³ /molec ule/sec					25 °C		AOPWIN					(Q)SAR		x			
3 既存点検事業	水域	生分解					0%[0%(-16%) 分解度の平均値が負の値に算出されたため、平均値を0としカッコ内にその計算値を示した。[BOD分解度]		25±1 °C		OECD TG 301C		yes (incl. certificate)			experimental result		x			

PACS_F 等	42000
PACS_Name 等	ビス (N, N-ジメチルジチオカルバミン酸) N, N'-エチレンビス (チオカルバモイルチオ亜鉛) (別名ポリカーバメート)
CASRN	64440-88-6
CA_IN	Zinc, bis(dimethylcarbamodithioato-kS,kS')[[μ-[[1,2-ethanediybis(carbamodithioato-kS,kS')]](2-)]di- (9Cl)
その他番号	
その他名称	
SMILES	CN(C(=S)S[Zn]SC(=S)NCCNC(=S)S[Zn]SC(=S)N(C)C)C

▲ 分解性

収集データ

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源における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 既存点検事業	-	-21 % [平均 0(-16)% 分解度の平均値が負の値に算出されたため、平均値を0としカッコ内にその計算値を示した。]	O_2 consumption	(2-イミダゾリジンチオン; ジメチルジチオカルバミン酸; ジメチルアミン; 二硫化炭素及び亜鉛を含む不明生成物 (大部分は不溶性変化物))	OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result				K0863
2	-	-15 % [平均 0(-16)% 分解度の平均値が負の値に算出されたため、平均値を0としカッコ内にその計算値を示した。]	O_2 consumption	(2-イミダゾリジンチオン; ジメチルジチオカルバミン酸; ジメチルアミン; 二硫化炭素及び亜鉛を含む不明生成物 (大部分は不溶性変化物))	OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result				K0863
3	-	-13 % [平均 0(-16)% 分解度の平均値が負の値に算出されたため、平均値を0としカッコ内にその計算値を示した。]	O_2 consumption	(2-イミダゾリジンチオン; ジメチルジチオカルバミン酸; ジメチルアミン; 二硫化炭素及び亜鉛を含む不明生成物 (大部分は不溶性変化物))	OECD TG 301C	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result				K0863

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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	102.16			p.1521
2	CCD				
3	CRC	102.158			Physical Constants of Organic Compounds
4	EHC	102.17			PART B 2.2. Physical and Chemical Properties
5	EPI Suite	102.15			
6		102.15			
7		102.15			
8		102.15			
9		102.15			
10	HSDB	102.16		Lide, D.R. CRC Handbook of Chemistry and Physics 88TH Edition 2007-2008. CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, FL 2007, p. 3-300	Chemical/Physical Properties: > Molecular Weight:
11	Merck	102.16			
12	MOE初期評価	102.16			p.1
13	NITE初期リスク評価書	102.15			p.1
14	PhysProp	102.16			Mol Weight
15	REACH登録情報				
16	既存点検事業	102.2			
17					

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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	196~200 °C	198					-		2B	×	×			p.1521
2 CCD	融点	199~204 °C	201.5					-		2B	×	×			
3 CRC	融点	203 °C	203					-		2B	×	×			Physical Constants of Organic Compounds
4 EHC	融点	203~204 °C	203.5					-		2B	×	×			PART B 2.2. Physical and Chemical Properties
5 EPI Suite	融点	69.66 °C	69.66	MPBPWIN				(Q)SAR	Weighted Value	2C	×	×			
6 HSDB	融点	203 °C	203					-		2B	×	×		Lide, D.R. CRC Handbook of Chemistry and Physics 88TH Edition 2007-2008. CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, FL 2007. p. 3-300	Chemical/Physical Properties: > Melting Point:
7 Merck	融点	203~204 °C	203.5					-		2B	×	×			
8 MOE初期評価	融点	199~204 °C	201.5					-		2B	×	×		Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 13th Ed. (1997): John Wiley & Sons, Inc.	p.1
9 NITE初期リス ク評価書	融点	203~204 °C	203.5					-		2B	×	×		IPCS, International Programme on Chemical Safety (2004) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva. (http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dtash/index.htm から引用) Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ	p.1
10 PhysProp	融点	203 °C	203					-		2B	×	×			Melting Pt
11 REACH登録 情報	融点	199 °C[batch 070823044 17]	199	OECD TG 102	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	○	×		study report, 2010, 2010-03-10	Exp Key Melting point/freezing point.001
12	融点	198.9 °C[batch 080623064 68]	198.9	OECD TG 102	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	○	×		study report, 2010, 2010-03-10	Exp Key Melting point/freezing point.001
13	融点	>198 °C[specifications MLPC]	198	OECD TG 102	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	×	×		study report, 2010, 2010-03-10	Exp Key Melting point/freezing point.001
14 既存点検事 業	融点	203~204 °C	203.5					-		4A	×	×		東京化成試薬	
15	融点	198 °C	198					-		4A	×	×		試薬資料	

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

▲ 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 EPI Suite	263.60 °C	263.6			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method	2C	×	×			
2 PhysProp	347.18 °C	347.18							-		4A	×	×			Boiling Pt
3 REACH登録 情報	240 ° C[Decomp. temp.1	240	240.1501	1010 hPa	OECD TG 103	no	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1B	○	×		study report, 2010, 2010-03-10	Exp Key Boiling point.001

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

▲ 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 HSDB	2.0E-6 mmHg	2.67E-04							estimated by calculation	a fragment constant method	4C	×	×		SRC	Environmental Fate & Exposure: > Volatilization from Water/Soil:
2	2.02E-6 mmHg	2.69E-04	1.91E-04	25 °C					estimated by calculation		4C	×	×		US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver. 4.0. Jan, 2009. Available from, as of Dec 17, 2009: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episutedl.htm	Chemical/Physical Properties: > Vapor Pressure:
3 MOE初期評価	5.01E-03 mmHg	0.6679451	0.473508	25 °C					-		2B	○	×		Neely, W.B. and G.E. Blau (1985): Environmental Exposure from Chemicals. CRC Press: 31.	p.1
4 NITE初期リスク評価書	2.7E-04 Pa	0.00027	1.91E-04	25 °C					estimated by calculation		4C	×	○		SRC, Syracuse Research Corporation (2002) PhysProp Database, North Syracuse, NY. (http://esc.syrres.com/interkow/physdemo.htm から引用)	p.2
5 PhysProp	0.00000202 mmHg	2.69E-04	1.91E-04	25 °C					estimated by calculation		4C	×	×		NEELY,WB & BLAU,GE (1985)	Vapor Pressure
6 REACH登録情報	0 Pa[The vapour pressure of ETU (imidazolidine-2-thione) extrapolated at 25 °C is P = 2.7 x 10 ⁻⁴ Pa]	0.00027	1.91E-04	25 °C	OECD TG 104	yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study	外挿 (補外)		4C	×	×		study report, 2011, 2011-12-13	Exp Key Vapour pressure.001

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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	[Slightly soluble in cold water very soluble in hot water]	単位換算不可								-		3	×	×			
2 CRC	[very soluble]	単位換算不可								-		3	×	×			Physical Constants of Organic Compounds
3 EHC	20000 mg/L	20000	17468.289	30 °C						-		2B	×	×			PART B 2.2. Physical and Chemical Properties
4 HSDB	44 g/100mL	440000	199515.521	90 °C						-		4A	×	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2006., p. 651	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
5	9 g/100mL	90000	54991.5948	60 °C						-		4A	×	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2006., p. 651	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
6	2 g/100mL	20000	17468.289	30 °C						-		2B	×	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2006., p. 651	Chemical/Physical Properties: > Solubilities:
7 Merck	44 g/100mL[Sol y in 100 ml water: 44 g]	440000	199515.521	90 °C						-		4A	×	×			
8	9 g/100mL[Sol y in 100 ml water: 9 g]	90000	54991.5948	60 °C						-		4A	×	×			
9	2 g/100mL[Sol y in 100 ml water: 2 g]	20000	17468.289	30 °C						-		2B	×	×			
10 MOE初期評価	20 g/L	20000	17468.289	30 °C						-		2B	×	×		The Merck Index. 13th Ed. (2001): Merck and Co. Inc.	p.1
11 NITE初期リスク評価書	20 g/L	20000	17468.289	30 °C						-		2B	×	×		IPCS, International Programme on Chemical Safety (2004) ICSC, International Chemical Safety Cards, Geneva. (http://www.ilo.org/public/english/protection/safework/cis/products/icsc/dastht/index.htm から引用) Merck (2001) The Merck Index, 13th ed., Merck & Co., Inc., Whitehouse Station, NJ.	p.2
12 PhysProp	20000 mg/L	20000	17468.289	30 °C						experimental result		2B	×	×		MERCK INDEX (1996)	Water Solubility

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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
13 REACH登録 情報	27.4 g/L	27400	27400	20 °C	6.88	OECD TG 105	yes (incl. without restriction)	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	×		study report, 2010, 2010-06-03	Exp Key Water solubility.001
14 既存点検事業	2 g/100mL	20000	17468.289	30 °C						-		4A	×	×			
15	≥1 % [1%以上]	10000								-		4A	×	×			

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

▲ 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 EHC	0.67	0.67							-		2B	×	×			PART A 7.2.3. Bioaccumulation
2 EPI Suite	-0.4907	-0.4907			KOWWIN				(Q)SAR		2C	×	×			
3 HSDB	-0.66	-0.66							-		2B	×	×		Govers H et al; Chemosphere 15: 383-93 (1986)	Chemical/Physical Properties: > Octanol/Water Partition Coefficient:
4 MOE初期評 価	-0.66	-0.66							-		2B	×	×		Govers, H., C. Ruepart, T. Stevens and C.J. van Leeuwen (1986): Experimental determination and prediction of partition coefficients of thioureas and their toxicity to Photobacterium phosphoreum. Chemosphere 15: 383-393	p.1
5 NITE初期リ スク評価書	-0.49	-0.49							estimated by calculation		4C	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2006) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.	p.2
6	-0.66	-0.66							experimental result		2B	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2006) KowWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.	p.2
7 PhysProp	-0.66	-0.66							experimental result		2B	×	×		GOVERS,H ET AL. (1986)	Log P (octanol-water)

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

▲ 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
8 REACH登録 情報	-0.67	-0.67	20 °C[Conc erning pH and tempe rature, no informati on is clea rly given in the do cument, consequ ently we consider that the estimation is done for rele vant nat ural env ironmen tal cond itions (pH = 5 -9 and tem peratu re = 20° C).]	>5~ 9[Conc erning pH and tem peratu re, no informat ion is cle arly giv en in the documen t, consequ ently we consider that the estimation is done for rele vant nat ural env ironmen tal cond itions (pH = 5 -9 and tem peratu re = 20° C).]	OECD TG 107	no data	2: reliable with restriction s	key study	experimental result		1B	○	×		Van Leeuwen CJ, Maas-Diepeveen JL, Niebeek G, Vergouw WHA, Griffioen PS and Luijken MW., 1985, Aquatic toxicological aspects of dithiocarbamates and related compounds. I.Short-term toxicity tests., Aquatic Toxicology, 7 : 145-164.	Exp Key Partition coefficient.001

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

▲ 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 HSDB	Koc	13	13								-		2B	○	×		SRC	Environmental Fate & Exposure: > Soil Adsorption/Mobility: p.2
2 NITE初期リス ク評価書	Koc	7	7								estimated by calculation		4C	×	×		SRC, Syracuse Research Corporation (2006) PckocWin Estimation Software, ver. 1.66, North Syracuse, NY.	

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa·m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	3.40E-002 Pa· m ³ /mol	0.034	25 °C				(Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	×	×			
2	0.0263 Pa·m ³ /mol	0.0263	20 °C				その他, Experimental Data from PhysProp Database		2C	○	×			
3 HSDB	1.36E-11 atm· m ³ /mol	1.37802E-06	25 °C				estimated by calculation		4C	×	×		US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite, Ver. 4.0. Jan, 2009. Available from, as of Dec 17, 2009: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedi.htm	Chemical/Physical Properties: > Other Chemical/Physical Properties:
4	3.4E-7 atm·m ³ /mol	0.0344505					estimated by calculation	a fragment constant estimation method	4C	×	×	SRC		Environmental Fate & Exposure: > Volatilization from Water/Soil:
5 NITE初期リスク評価書	3.40E-02 Pa· m ³ /mol[3.40×10 ⁻² Pa·m ³ /mol (3.36× 10 ⁻⁷ atm·m ³ /mol)]	0.034	25 °C				estimated by calculation		4C	×	×	SRC, Syracuse Research Corporation (2006) HenryWin Estimation Software, ver. 3.10, North Syracuse, NY.	p.2	
6 PhysProp	0.000000000136 atm·m ³ /mol	1.37802E-06	25 °C				estimated by calculation		4C	×	×	VP/WSOL; est VP		Henry's Law Constant
7 REACH登録情報	0.0408 Pa·m ³ /mol	0.0408	20 °C		1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	×	×	study report, 2011, 2011-12-13		Exp Key Henry's Law constant.002

PACS_F等	42003
PACS_Name等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

▲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 HSDB		2	0.1 ppm		BCF	-	<1.8	1.8					experimental result		2B	×	×		NITE; Chemical Risk Information Platform (CHRIP). Biodegradation and Bioconcentration. Tokyo, Japan: Natl Inst Tech Eval. Available from http://www.safe.nite.go.jp/english/db.html as of Feb.15, 2010.	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Bioconcentration:
2		1	1 ppm		BCF	-	<0.2~0.3	0.2					experimental result		2B	×	×		NITE; Chemical Risk Information Platform (CHRIP). Biodegradation and Bioconcentration. Tokyo, Japan: Natl Inst Tech Eval. Available from http://www.safe.nite.go.jp/english/db.html as of Feb.15, 2010.	Environmental Fate & Exposure: > Environmental Bioconcentration:
3 NITE初期リス ク評価書	低濃縮性	2	0.1 mg/L		その他		<1.8	1.8	化審法TG				experimental result		1B	×	×		通商産業省 (1982) 通商産業公報 (1982年12月28日), 3省共同化学物質データベース. (http://www.safe.nite.go.jp/tmdb/ni.do から引用)	p.6
4	低濃縮性	1	1 mg/L		その他		<0.2~ 0.3[0.2未 満~0.3]	0.2	化審法TG				experimental result		1B	×	×		通商産業省 (1982) 通商産業公報 (1982年12月28日), 3省共同化学物質データベース. (http://www.safe.nite.go.jp/tmdb/ni.do から引用)	p.6
5 既存点検事業		2	0.1 ppm		Rawデータ	-	≤1.8	1.8	化審法TG				experimental result		1A	○	×			
6		2	0.1 ppm		Rawデータ	-	≤1.8	1.8	化審法TG				experimental result		1A	○	×			
7		2	0.1 ppm		Rawデータ	-	≤1.8	1.8	化審法TG				experimental result		1A	○	×			
8		2	0.1 ppm		Rawデータ	-	≤1.8	1.8	化審法TG				experimental result		1A	○	×			
9		2	0.1 ppm		Rawデータ	-	≤1.8	1.8	化審法TG				experimental result		1A	○	×			
10		2	0.1 ppm		Rawデータ	-	≤1.8	1.8	化審法TG				experimental result		1A	○	×			
11		2	0.1 ppm		Rawデータ	-	≤1.8	1.8	化審法TG				experimental result		1A	×	×			
12		2	0.1 ppm		Rawデータ	-	≤1.8	1.8	化審法TG				experimental result		1A	×	×			
13		1	1 ppm		Rawデータ	-	≤0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×			
14		1	1 ppm		Rawデータ	-	0.2[参考値]	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×			
15		1	1 ppm		Rawデータ	-	≤0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×			
16		1	1 ppm		Rawデータ	-	0.3[参考値]	0.3	化審法TG				experimental result		1A	×	×			
17		1	1 ppm		Rawデータ	-	≤0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×			
18		1	1 ppm		Rawデータ	-	≤0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×			
19		1	1 ppm		Rawデータ	-	≤0.2	0.2	化審法TG				experimental result		1A	×	×			
20		1	1 ppm		Rawデータ	-	0.3[参考値]	0.3	化審法TG				experimental result		1A	×	×			

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

▲ 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	1.6	1.6	20 °C		SPARC				(Q)SAR	SPARC	×			

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジニチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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	
11	水域	光分解					0 %[Irradiation:24 days, dark]Remaining ETU (%): 100]									
12	土壌	総括分解					43.4 %[4 days after treatment of soil with 2 mg ETU/kg]									
13	土壌	総括分解				<1 週										
14	EPI Suite	大気		OHラジカルとの反応	139.6756E-12 cm^3/molec ule/sec				25 °C		AOPWIN					
15		水域		生分解							BIOWIN	Weeks				
16	Howard Deg	水域		生分解 (嫌 氣的)		2688 時間										その他,Scientific judgement based upon estimated aqueous aerobic biodegradati on_half-life
17		土壌		総括分解		168 時間										その他,Scientific judgement based upon field test data in soil (Rhodes, RC (1977))

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジニチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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
18	水域	加水分解									その他, Scientific judgement based upon zero hydrolysis was observed after 3 months for pHs of 5, 7, and 9 at 90 ° C (Cruickshank, PA and Jarrow, HC (1973)) and zero hydrolysis was observed after 90 days for pHs of 3, 7 and 11 at 90 °C (Ellington, JJ et al. (1987)).				
19	大気	OHラジカルとの反応			3000000 molecule/c m ³	0.5 時間					記載なし				
20	大気	OHラジカルとの反応			300000 molecule/c m ³	4.7 時間					記載なし				
21	水域	光分解									記載なし				
22	水域	生分解 (嫌氣的)				672 時間					その他, Scientific judgement based upon estimated aqueous aerobic biodegradation half-life				

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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
23	水域	生分解 (好氣的)				168 時間					その他,Scientific judgement based upon field test data in soil (Rhodes, RC (1977))				
24	水域	生分解 (好氣的)				672 時間					その他,Scientific judgement based upon field test data in soil (Rhodes, RC (1977))				
25	水域	総括分解				168 時間					その他,Scientific judgement based upon estimated aqueous aerobic biodegradation half-life				
26	水域	総括分解				672 時間					その他,Scientific judgement based upon estimated aqueous aerobic biodegradation half-life				
27	大気	総括分解				4.7 時間					その他,Scientific judgement based upon estimated photooxidation half-life in air				
28	土壌	総括分解				672 時間					その他,Scientific judgement based upon field test data in soil (Rhodes, RC (1977))				

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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
38	大気	直接光分解													
39	水域	生分解 (好氣的)					2.9 % [Following a 5 day incubation of 0.05 mg/L ethylene thiourea in activated sludge, 2.9% of applied amount was degraded]								
40	NITE初期リスク評価書	水域	光分解												
41		土壌	生分解 (好氣的)						23 °C		その他、土壌を用いた好氣的な条件下での分解実験				
42		水域	生分解 (好氣的)				1 % [高速液体クロマトグラフ (HPLC) 測定]				化審法TG				
43		水域	生分解 (好氣的)				0 % [生物化学的酸素消費量 (BOD) 測定]				化審法TG				
44		水域	加水分解						90 °C	5~9					
45		大気	直接光分解												
46		大気	OHラジカルとの反応	1.40E-10 cm ³ /molec ule/sec	5E+05~1E+06 molecule/c m ³	1~3 時間		7.64E-02	25 °C						

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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
47	水域	生分解 (嫌氣的)				28~112 日					,生分解性に関する総説				
48	水域	生分解 (好氣的)				7~28 日					,生分解性に関する総説				
49	土壌	生分解 (嫌氣的)							23 °C		その他,土壌を用いた嫌氣的な条件下での分解実験				
50	水域	生分解 (好氣的)					0 %[全有機炭素(TOC)測定]				化審法TG				
51	PhysProp	大気		OHラジカルとの反応					25 °C						
52	REACH登録情報	土壌	生分解				60 %[After 50 days, ETU degradation was around 60% and 90% under anoxic and oxic conditions respectively. Degradation was mainly microbial in both cases as sterilized soil samples did not allow any ETU degradation.]				その他,laboratory		no	2: reliable with restrictions	supporting study
53		水域	加水分解	0 1/時間			>3 月[> 3 mo]		90 °C	9	記載なし		no	2: reliable with restrictions	key study
54		水域	加水分解	0 1/時間			>3 月[> 3 mo]		90 °C	7	記載なし		no	2: reliable with restrictions	key study
55		水域	加水分解	0 1/時間			>3 月[> 3 mo]		90 °C	5	記載なし		no	2: reliable with restrictions	key study

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジニチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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
56	土壌	生分解					11~26 %[Biodegradation of [14C]ETU was monitored in a surface soil incubated at 21°C for 28 days and in a subsurface soil incubated at 10°C for 109 days. ETU was rapidly mineralized rapidly into 14CO2 in the surface soil, reaching 41.2% after 28 days while it was much slower in the subsurface soil where only between 11 and 26% 14CO2 were measured after 109 days.]				その他,laboratory		no	2: reliable with restrictions	supporting study

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジニチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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
57	土壌	生分解					41.2 %[Biodegradation of [14C]ETU was monitored in a surface soil incubated at 21°C for 28 days and in a subsurface soil incubated at 10°C for 109 days. ETU was rapidly mineralized rapidly into 14CO2 in the surface soil, reaching 41.2% after 28 days while it was much slower in the subsurface soil where only between 11 and 26% 14CO2 were measured after 109 days.]		21 °C		その他,laboratory		no	2: reliable with restrictions	supporting study

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジニチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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
58	土壌	生分解					90 %[After 50 days, ETU degradation was around 60% and 90% under anoxic and oxic conditions respectively. Degradation was mainly microbial in both cases as sterilized soil samples did not allow any ETU degradation.]				その他,laboratory		no	2: reliable with restrictions	supporting study
59	土壌	生分解					30 %[Nevertheless, mineralization did occur significantly at 5°C (approx. 30%).]				その他,laboratory		no	2: reliable with restrictions	supporting study
60	土壌	生分解					40~48 %[Mineralization is faster at 20°C (40-48%) than at 5°C, as would be expected.]		20 °C		その他,laboratory		no	2: reliable with restrictions	supporting study
61	土壌	生分解					<1 週 [Disappearance of more than half of the initial ¹⁴ C]ETU in less than one week]				その他,field trial		no	1: reliable without restriction	key study

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジニチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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
62	水域	光分解					80~90 %[In an aqueous solution of 0.64 mg/L concentration ETU and in presence of photosensitizer, ETU was degraded up to 80-90% within 3 days under UV light and up to 50-90% within 24 days by Summer natural light. In the absence of any photosensitizer, no ETU degradation was observed. No ETU was degraded under darkness either.]				記載なし		no	2: reliable with restrictions	key study
63	水域	生分解					100 %[Radiochem. meas. 3 h] in water with 0.1 M acetone]				記載なし		no	1: reliable without restriction	key study
64	水域	生分解 (好氣的)					0 %[DOC removal] 28 d]		22±2 °C	7.8[pH: 7.8 (6-8.5)]	OECD TG 301F		yes (incl. certificate)	1: reliable without restriction	key study
65	水域	生分解					100 %[Radiochem. meas. 6 h] in distilled water]				記載なし		no	1: reliable without restriction	key study
66	既存点検事業	水域	生分解				1.2 %[LCによる結果]				化審法TG				

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

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
67	水域	生分解					0%[酸素消費量による結果]				化審法TG				
68	水域	生分解					0%[TOC計による結果]				化審法TG				

PACS_F 等	42003
PACS_Name 等	2-イミダゾリジンチオン
CASRN	96-45-7
CA_IN	2-Imidazolidinethione
その他番号	
その他名称	
SMILES	S=C1NCCN1

分解性

収集データ

情報源名	分解性	分解度	算出方法	分解生成物	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけるケーススタディの該非	値の種類	値の種類の詳細	備考	文献	ページ番号等
------	-----	-----	------	-------	-------	-----	-------------	-------------------	------	---------	----	----	--------