

(案)

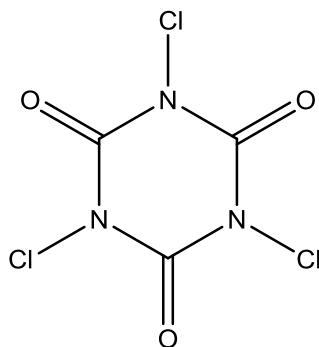
優先評価化学物質のリスク評価(一次)

生態影響に係る評価Ⅱ

物理化学的性状等の詳細資料

1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン

優先評価化学物質通し番号 137



平成 29 年 6 月

経済産業省

目 次

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

1-1-1 1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン

下表にモデル推計に採用した「1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン」の物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。なお、評価Ⅱにおいて精査した結果、評価Ⅰから変更した値はなかった。

表 1-1-1 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¹⁾

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	—	232.4	—	232.4
融点	℃	246.7 ^{2,3,4)}	測定値か推計値か不明	246.7 ²⁾
沸点	℃	(412.5 ⁵⁾)	MPBPWIN (v1.43) を用いた推計値 (既存点検 ⁶⁾ では、「測定不可(285℃で褐色に変色していた)」との記載有)	412.5 ⁵⁾
蒸気圧	Pa	(1.53×10 ^{-6,5)})	MPBPWIN (v1.43) を用いた推計値 (既存点検 ⁶⁾ では、「測定不可(黒く変色していた)」との記載有)	1.53×10 ^{-6,5)}
水に対する溶解度	mg/L	(11,202 ^{3,4)})	25℃における測定値を 20℃に補正した値 (既存点検 ⁶⁾ では、「加水分解のため測定不可」との記載有)	11,202 ³⁾
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	—	(0.94 ⁵⁾)	KOWWIN(v1.68) を用いた推計値	0.94 ⁵⁾
ヘンリー係数	Pa·m ³ /mol	(4.3×10 ^{-6,5)})	HENRYWIN(v3.20) を用いた推計値	4.3×10 ^{-6,5)}
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	(26.58 ⁵⁾)	logPow を用いた KOCWIN (v2.00)による推計値	26.58 ⁵⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	(3.16 ⁵⁾)	BCFBAFWIN(v3.01) を用いた推計値	3.16 ⁵⁾
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ⁵⁾	1
解離定数(pKa)	—	— ⁶⁾	解離性物質(強電解質)と考えられるため、解離定数は測定不可	— ⁶⁾

1) 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

2) CRC(2015)

3) HSDB(2016)

4) PhysPro(2016)

5) EPI Suite(2012)

6) METI(1996)

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

①融点

評価Ⅰで用いたデータ(246.7°C)は、方法の詳細や GLP 適用の有無が不明であるが信頼性の定まった情報源¹である CRC, HSDB, PhysProp に記載されたデータである。評価Ⅱにおいてもこの値 (246.7°C) を用いる。

②沸点

評価Ⅰでは MPBPWIN (v1.43) を用いた推計値 (412.5°C) を用いた。既存点検においては、JIS K 2233-1984 に準じた沸点上昇法による試験の結果、「測定不可(285°Cで褐色に変色していた)」とされているが、評価Ⅱにおいても参考値としてこの値 (412.5°C) を用いる。

③蒸気圧

評価Ⅰでは MPBPWIN (v1.43) を用いた推計値 (1.53×10^{-6} Pa) を用いた。既存点検においては、OECD TG 104 による試験の結果、「測定不可(黒く変色していた)」とされているが、評価Ⅱにおいても参考値としてこの値 (1.53×10^{-6} Pa) を用いる。

④水に対する溶解度

評価Ⅰで用いたデータ(11,202 mg/L (20°C)) は PhysProp に記載された 25°Cにおける測定値 (12,000 mg/L)を温度換算した値である。評価Ⅱにおいても参考値として測定値(12,000 mg/L (25°C))を温度換算した値 (11,202 mg/L (20°C)) を用いる。

⑤logPow

評価Ⅰでは KOWWIN(v1.68) を用いた推計値 (0.94) を用いた。さらに、他の信頼性の定まった情報源(HSDB、PhysProp)に記載されたデータも同様の値であるため、評価Ⅱにおいても参考値としてこの値 (0.94) を用いる。

⑥ヘンリー係数

評価Ⅰでは HENRYWIN(v3.20) を用いた推計値 (4.3×10^{-6} Pa·m³/mol) を用いた。評価Ⅱにおいても参考値としてこの値 (4.3×10^{-6} Pa·m³/mol) を用いる。

⑦Koc

評価Ⅰでは KOCWIN(v2.00) を用いた推計値 (26.58) を用いた。評価Ⅱにおいても参考値としてこの値 (26.58) を用いる。

⑧BCF

評価Ⅰでは BCFBAFWIN(v3.01) を用いた推計値 (3.16) を用いた。評価Ⅱにおいても参考値としてこの値(3.16)を用いる。

⑨BMF

評価Ⅰで採用したBMF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。) に従って設定した値である。評価Ⅱにおいても、BMFの測定値は得られなかったため、評価Ⅰと同じ値 (1) を用いる。

¹ 「化審法における物理化学的性状・生分解性・生物濃縮性データの信頼性評価等について」の「3. 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報源のこと

⑨解離定数

既存点検によると、「被験物質は解離性物質(強電解質)と判断される。よって、解離定数は測定不可とする。」とあった。そのため、解離定数は設定していない。

1-1-2 1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン

下表にモデル推計に採用した「1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン」の物理化学的性状及び生物濃縮係数を示す。

表 1-1-2 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¹⁾

項目	単位	採用値	詳細	評価Ⅰで用いた値(参考)
分子量	—	129.07	—	—
融点	℃	330	測定値か推計値か不明 ²⁾	—
沸点	℃	458.3	MPBPWIN (v1.43) ³⁾ を用いた推計値 (OECD SIDS では、「Decomposed (分解された)」との記載有り)	—
蒸気圧	Pa	6.15×10 ⁻⁵	25℃における測定値 ⁴⁾ を 20℃に補正した値	—
水に対する溶解度	mg/L	2520	25℃における測定値 ⁵⁾ を 20℃に補正した値	—
1-オクタールと水との間の分配係数(logPow)	—	(0.3)	2-ブタンを基準として推計した値(≦0.3) ⁵⁾	—
ヘンリー係数	Pa·m ³ /mol	6.07×10 ⁻¹⁰	HENRYWIN(v3.20) ³⁾ を用いた推計値	—
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	18.7 (非解離種) 37.4 (アニオン種) 34.4 (pH7.6における値)	Francoらの論文 ⁵⁾ に記載の式により計算	—
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	(0.1)	濃縮度試験における測定値(≦0.1) ⁶⁾	—
生物蓄積係数(BMF)	—	1	logPow と BCF から設定 ⁶⁾	—
解離定数(pKa)	—	6.88	測定値か推計値か不明 ⁶⁾	—

1) 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。ただし、Koc の pH7.6 における値は別途計算した。

2) OECD(1999)

3) EPI Suite(2012)

4) MITI(1996)

5) Franco and Trapp, 2008

6) MITI(1977)

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。

上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

①融点

評価Ⅱで使用するデータ(330 ℃)は、方法の詳細や GLP 適用の有無が不明であるが、信頼性の定まった情報源(「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「3.1 信頼性の定まった情報源」に記載のある情報源。以下同じ。)である OECD SIDS に記載されたデータである。

②沸点

評価Ⅱで使用するデータ(458.3 ℃)は、MPBPWIN (v1.43) を用いた推計値である。なお、

OECD SIDS では「Decomposed(分解された)」との記載がある。

③蒸気圧

評価Ⅱで使用するデータ(6.15×10^{-5} Pa(20°C))は、信頼性の定まった情報源である既存点検に記載された OECD TG 104 による測定値($< 5.0 \times 10^{-3}$ Pa(25°C))を温度換算した値である。

④水に対する溶解度

評価Ⅱで使用するデータ(2520 mg/L (20°C))は、信頼性の定まった情報源である既存点検に記載された OECD TG 105 による測定値(2,700 mg/L (25°C))を温度換算した値である。

⑤logPow

評価Ⅱで使用するデータ(≤ 0.3)は、信頼性の定まった情報源である既存点検に記載された推計値である。既存点検では、基準物質の分配係数とキャパシティファクター k の対数値から最小二乗法により作成した検量線を作成し、被験物質の保持時間は基準物質中で最も保持時間の短い2-ブタノンよりもさらに短かったため、正確な分配係数の算出は不可能なため、2-ブタノンを基準として0.3以下としている。

⑥ヘンリー係数

評価Ⅱで使用するデータ(6.07×10^{-10} Pa \cdot m³/mol)は、HENRYWIN(v3.20)を用いた推計値である。

⑦Koc

評価Ⅱにおいては Franco (2008) の推計式による推計値(18.7 L/kg (非解離種)、37.4 L/kg (アニオン種))を用いる。

⑧BCF

評価Ⅱで使用するデータ(≤ 0.1 L/kg (20°C))は、信頼性の定まった情報源である既存点検に記載のある化審法テストガイドラインの試験結果の値である。

⑨BMF

評価Ⅱで使用するデータ(1)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。)に従って設定した値である。

⑩解離定数

評価Ⅱで使用するデータ(6.88)は、既存点検に記載されている THE MERCK INDEX (12th Edition)の値である。

pKa が 6.88 の場合、pH 5.0、6.0、7.0、8.0、9.0、10.0 の水中では、それぞれ 98.7%、88.4%、43.1%、7.1%、0.8%、0.1% が非解離種として存在する。

1-2 分解性

1-2-1 1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン

下表にモデル推計に採用した「1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン」の分解に係るデータを示す。

表 1-2-1 分解に係るデータのまとめ¹⁾

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	5.4
		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	-※
		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	-
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	-

1) 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

2) EPI Suite(2012)

3) METI(1975)

NA:情報が得られなかったことを示す

※ 速やかに変化

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

半減期算出に採用した反応速度定数データ (3.00×10^{-12} cm³/molecule/s) は AOPWIN (v1.92) を用いた推計値(25°C)である。大気中 OHラジカル濃度を技術ガイダンスより 5×10^5 molecule/cm³ とした場合、半減期は 5.4 日と算出される。

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、生分解と加水分解の機序別の反

応に関する情報が得られた。

②-1 生分解の半減期

化審法の既存点検 (MITI 1975)の分解度試験結果では、「1, 3, 5-トリクロロイソシアヌール酸は水と反応して次のように変化する。」との記載があり、1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン自体の生分解性に関する情報は得ることができなかった。なお、分解生成物である1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオンの分解度試験結果では、BOD による分解度が0%、TOC 計による分解度が7.8%、LC による分解度が5.3%であった。

②-2 加水分解の半減期

化審法の既存点検(METI 1996)の物理化学性状試験では、加水分解の項に「水中で速やかに変化するため測定不可」との記載がある。

③ 土壌

情報収集の結果、土壌中での総括分解半減期の情報は得られなかった。また、機序別の分解反応に関する情報も得られなかった。

④ 底質

情報収集の結果、底質中での総括分解半減期の情報は得られなかった。また、機序別の分解反応に関する情報も得られなかった。

1-2-2 1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン

下表にモデル推計に採用した「1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン」の分解に係るデータを示す。

表 1-2-2 分解に係るデータのまとめ¹⁾

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	5.4
		オゾンとの反応	NA
		硝酸ラジカルとの反応	NA
水中	水中における総括分解半減期		NA
	機序別の半減期	生分解	10,000
		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	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

1) 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

2) EPI Suite(2012)

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

半減期算出に採用した反応速度定数データ (3.00×10^{-12} cm³/molecule/s) は AOPWIN (v1.92) を用いた推計値(25°C)である。大気中 OH ラジカル濃度を技術ガイダンスより 5×10^5 molecule/cm³ とした場合、半減期は 5.4 日と算出される。

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。また、生分解に関して半減期の情報は得られなかったが、分解度に関する情報が得られた。

②-1 生分解の半減期

化審法の既存点検 (MITI 1975)では、「1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン」の分解生成物である「1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン」の分解度試験結果で、

BODによる分解度が0%、TOC計による分解度が7.8%、LCによる分解度が5.3%との記載があった。そのため、技術ガイダンスに従い、生分解による半減期を10,000日とする。

③ 土壌

情報収集の結果、土壌中での総括分解半減期の情報は得られなかった。また、機序別の分解反応に関する情報も得られなかった。

④ 底質

情報収集の結果、底質中での総括分解半減期の情報は得られなかった。また、機序別の分解反応に関する情報も得られなかった。

2 【付属資料】

2-1 物理化学的性状等一覧

収集した物理化学的性状等は別添資料を参照。

出典)

1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン

CRC(2015): Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 96th ed., CRC Press, 2015-2016.

EPI Suite(2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11, 2012.HSDB: US NIH. Hazardous Substances Data Bank. <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>, (2016-03-10 閲覧).

MITI(1975): MITI. イソシアヌール酸(1,3,5-トリクロロイソシアヌール酸の水との反応生成物)分解度試験成績報告書., 既存化学物質点検, 1975.

MITI(1977): MITI. イソシアヌール酸(1,3,5-トリクロロイソシアヌール酸の水との反応生成物)の濃縮度試験成績報告書. 既存化学物質点検, 1977.

MITI(1996): MITI. 1,3,5-トリクロロイソシアヌール酸 (被験物質番号 K-103) の物理化学性状の測定, 既存化学物質点検, 1996.

PhysProp: Syracuse Research Corporation. SRC PhysProp Database. (2016-03-10 閲覧).

1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン

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

OECD(1999): OECD SIDS Initial Assessment Report Isocyanuric Acid. 1999

MITI(1977): MITI. イソシアヌール酸(1,3,5-トリクロロイソシアヌール酸の水との反応生成物)の濃縮度試験成績報告書. 既存化学物質点検, 1977.

MITI(1996): MITI. 1,3,5-トリクロロイソシアヌール酸 (被験物質番号 K-103) の物理化学性状の測定, 既存化学物質点検, 1996.

2-2 その他

特になし。

情報源略称	詳細等
Aldrich	Sigma-Aldrich試薬カタログ
CCD	Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007
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)
IUCLID	IUCLID
Merck	The Merck Index, 14th Ed, Merck & Co, 2006
PhysProp	SRC PhysProp Database, Syracuse Research Corporation, 2009
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

優先評価化学物質通し番号	137
物質名称	1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 トリクロロイソシアムル酸)
CAS番号	87-90-1

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)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	融点	249~251 °C	250							2B	×			p.2477
2 CCD	分解点	225 °C	225							2B	×			
3 CRC	融点	246.7 °C	246.7							2B	○			1 Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
4 EPI Suite	融点	171.73 °C	171.73	MPBPWIN				(Q)SAR		2C	×			
5 HSDB	融点	246.7 °C	246.7							2B	○			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
6 IUCLID	融点	225~230 °C	227.5							4A	×			p.9
7	融点	225~230 °C	227.5							4A	×			p.9
8	融点	225~230 °C	227.5							4A	×			p.9
9	融点	225 °C	225							4A	×			p.9
10	融点	246~247 °C	246.5							4A	×			p.9
11	融点	225 °C	225		no					4A	×			p.9
12 Merck	融点	246~247 °C	246.5							2B	×			
13 PhysProp	融点	246.7 °C	246.7							2B	○			
14 既存点検事業	融点	249~251 °C[522~524K(249~251°C)]	250							4A	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	137
物質名称	1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 トリクロロイソシアヌル酸)
CAS番号	87-90-1

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)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	412.5 °C	412.5			MPBPWIN				(Q)SAR		2C	○			
2 既存点検事 業	[測定不可 (285°Cで 褐色に変色 していた)]	単位換算不 可			その他,JIS K 2233-1984						3	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	137
物質名称	1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 トリクロロイソシアヌル酸)
CAS番号	87-90-1

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)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	0.00000216 Pa[2C以下の値を用いて推定 (4)]	2.16E-06	1.53E-06	25 °C	MPBPWIN				(Q)SAR		4C	○			
2 HSDB	1.6E-8 mmHg	2.13E-06	1.51E-06	25 °C					estimated by calculation		4C	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > VAPOR PRESSURE:
3 PhysProp	0.0000000162 mmHg	2.16E-06	1.53E-06	25 °C					estimated by calculation		4C	×		NEELY,WB & BLAU,GE.1985.	
4 既存点検事業	[測定不可 (黒く変色していた)]	単位換算不可			OECD TG 104						3	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	137
物質名称	1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 トリクロロイソシアヌル酸)
CAS番号	87-90-1

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)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	244 mg/L[2C以 下の値を用 いて推定 (4) 1	244	227.775571	25 °C		WSKOWWIN				(Q)SAR		4C	×			
2 HSDB	1.20E+4 mg/L[Water solubility = 1.2% = 1.20X10+4 mg/L at 25 deg C]	12000	11202.0773	25 °C						-		2B	○			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
3	1 g/100 g[Solubility in water at 25 deg C = 1 g/100 g]	10000	9335.06438	25 °C								2B	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
4 IUCLID	12 g/L[slightly soluble]	12000	12000	20 °C		3[ca. 3 at 1 vol% and 20 degree C]						4A	×			p.11
5	1.1~1.3 g/L[slightly soluble]	1200	1120.20773	25 °C		4.4[= 4.4 at .2 vol% and 25 degree C]						4A	×			p.11
6	1.2[単位の記 載なし]	単位換算不 可		25 °C		2.8[= 2.8 at 1 vol% and 25 degree C]		no				3	×			p.11
7	12 g/L	12000	11202.0773	25 °C		2.8[= 2.8 at 1 other: weight % and 25 degree C]		no data				4A	×			p.11
8 Merck	0.20%	2000	1867.01288	25 °C								2B	×			
9 PhysProp	12000 mg/L	12000	11202.0773	25 °C						experimental result		2B	○		BURAKEVICH, JV. 1979.	
10 既存点検事 業	[加水分解の ため測定不 可]	単位換算不 可										3	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	137
物質名称	1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 トリクロロイソシアヌル酸)
CAS番号	87-90-1

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)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	0.94	0.94			KOWWIN				(Q)SAR		2C	○			
2 HSDB	0.94	0.94							estimated by calculation		4C	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT:
3 PhysProp	0.94	0.94							estimated by calculation		4C	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH.1995.	

基本情報

優先評価化学物質通し番号	137
物質名称	1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 トリクロロイソシアヌル酸)
CAS番号	87-90-1

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)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	0.0000043 Pa· m ³ /mol	0.0000043					(Q)SAR		2C	○			
2 HSDB	6.2E-11 atm·m ³ /mol	6.28215E-06					estimated by calculation		4C	×			CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
3 PhysProp	0.0000000000619 atm·m ³ /mol	6.27202E-06					estimated by calculation		4C	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH.1991.	

基本情報

優先評価化学物質通し番号	137
物質名称	1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 トリクロロイソシアヌル酸)
CAS番号	87-90-1

▲ 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)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	26.58 L/kg[2C 以下の値を用 いて推定 (4)]	26.58				KOCWIN				(Q)SAR		4C	○			
2 HSDB	Koc	25	25								estimated by calculation		4C	x			ENVIRONMENTAL FATE:

基本情報

優先評価化学物質通し番号	137
物質名称	1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 トリクロロイソシアヌル酸)
CAS番号	87-90-1

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	曝露期間	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)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1			BCF		3.162 L/kg (wet)[2C以 下の値を用 いて推定 (4)]	3.162	BCFBAFWIN				(Q)SAR		4C	○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	137
物質名称	1, 3, 5-トリクロロ-1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 トリクロロイソシアヌル酸)
CAS番号	87-90-1

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		0%	O ₂ consumption		化審法TG				experimental result				
2		7.80%	TOC removal		化審法TG				experimental result				
3		5.30%	Test mat. analysis		化審法TG				experimental result				

基本情報

優先評価化学物質通し番号	
物質名称	1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 イソシアヌル酸)
CAS番号	108-80-5

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)	備考	文献	ページ番号等
1 CRC	融点	>330 °C	330	-	-	-	-	-		2B	×			Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
2 EPI Suite	融点	193.1 °C	193.1	MPBPWIN	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 September 2008	2C	×			-
3 HSDB	融点	360 °C	360	-	-	-	-	-		2B	×		layton, G. D. and F. E. Clayton (eds.), Patty's Industrial Hygiene and Toxicology: Volume 2A, 2B, 2C: Toxicology, 3rd ed. New York: John Wiley Sons, 1981-1982., p. 2766.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MELTING POINT:
4 Merck	昇華点	>300 °C[does not melt up to 330°, sublimates and dissociates to isocyanic acid at higher	300	-	-	-	-	-		2B	×			Monograph Number: 0002698
5 PhysProp	融点	360 °C	360	-	-	-	-	-		2B	×			-
6 SIDS	融点	330 °C	330	-	no	-	key study	-		2A	○		Organic Chemical Dictionary.	p.222; SIDS Dossier p.246
7 既存点検事業	融点	330 °C[603K(330°C)]	330	-	-	-	-	-		4A	×		有機化合物辞典(講談社) .	K0103変化物

基本情報

優先評価化学物質通し番号	
物質名称	1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 イソシアヌル酸)
CAS番号	108-80-5

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)	備考	文献	ページ番号等
1 CCD	320 °C	320	320	760 mmHg	-	-	-	-	-		2B	○	decomposes to cyanic acid at 320C		Cyanuric Acid
2 EPI Suite	458.25 °C	458.25	458.25	1 atm	MPBPWIN	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 September 2008	2C	×			-
3 HSDB	>330 °C[330°C以上でイソシアヌル酸に分解]	330			-	-	-	-	-		4A	×		Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 469.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > BOILING POINT:
4 SIDS	[not measurable]	単位換算不可			-	no	-	key study	-		3	×		MITI, Japan.	p.222; SIDS Dossier p.246

基本情報

優先評価化学物質通し番号	
物質名称	1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 イソシアヌル酸)
CAS番号	108-80-5

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)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	0.0000000 000163 mmHg	2.17E-09	2.17E-09	20 °C	MPBPWIN	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 September 2008	2C	×	-		-
2 HSDB	0.0000000 000441 mmHg	5.88E-09	4.17E-09	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	×	-	SRC.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > MOLECULAR WEIGHT:
3 PhysProp	0.0000000 305 mmHg	4.07E-06	2.88E-06	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	×	-	MPBPVP.	-
4 SIDS	<=0.005 Pa	0.005	3.54E-03	25 °C	OECD TG 104	yes	-	key study	experiment al result	-	1A	○	-	MITI, Japan.	p.222; SIDS Dossier p.246
5 既存点検事業	<=0.005 Pa	0.005	6.15E-05	100 °C	OECD TG 104	-	-	-	experiment al result	-	4A	×	-		K0103変化物

基本情報

優先評価化学物質通し番号	
物質名称	1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 イソシアヌル酸)
CAS番号	108-80-5

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)	備考	文献	ページ番号等
1 CCD	[Soluble in hot water]	単位換算不可				-	-	-	-	-		3	×			Cyanuric Acid
2 CRC	[slightly soluble hot H ₂ O]	単位換算不可				-	-	-	-	-		3	×	sl hot H ₂ O		Physical Constants of Organic Compounds (Section 3)
3	0.259 mass %	2596.72552	2424.05999	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×		Yalkowsky, S. H., and He, Y., Handbook of Aqueous Solubility Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 2003.	Aquarius Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
4	2.59 g/Kg	2590	2417.78167	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×		Yalkowsky, S. H., and He, Y., Handbook of Aqueous Solubility Data, CRC Press, Boca Raton, FL, 2003.	Aquarius Solubility and Henry's Law Constants of Organic Compounds (Section 5)
5 EPI Suite	1994 mg/L	1994	1861.41184	25 °C		WSKOWWIN	-	-	key study	(Q)SAR	WSKOWWIN v1.41a September 2008	2C	×			-
6 HSDB	0.2 wt%	2004.00802	1870.75438	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 469.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
7	2.6 wt%	26694.0452	12104.2644	90 °C		-	-	-	-	-		4A	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 469.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
8	2.593 mg/L	2.593				-	-	-	-	-		4A	×		Yalkowsky SH, He Y, eds; Handbook of aqueous solubility data. Boca Raton, FL: CRC Press p. 48 (2003).	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > ENVIRONMENTAL FATE:
9	10 wt%	111111.111	31500.7891	150 °C		-	-	-	-	-		4A	×		O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 469.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
10 Merck	0.20%	2000	1867.01288	25 °C		-	-	-	-	-		2B	×			Monograph Number: 0002698
11	2.60%	26000	11789.5535	90 °C		-	-	-	-	-		4A	×			Monograph Number: 0002698
12	10%	100000	28350.7102	150 °C		-	-	-	-	-		4A	×			Monograph Number: 0002698
13 PhysProp	2000 mg/L	2000	1867.01288	25 °C		-	-	-	-	experimental result		2B	×		BURAKEVICH, JV (1979).	-
14 SIDS	2.7 g/L[Of very high solubility]	2700	2520.46738	25 °C		OECD TG 105	-	-	key study	-		1B	○		MITI, Japan.	p.222; SIDS Dossier p.247
15 既存点検事業	2.7 g/L[変動係数1.8%]	2700	2520.46738	25±1 °C		OECD TG 105	-	-	-	experimental result		1B	○			K0103変化物

基本情報

優先評価化学物質通し番号	
物質名称	1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 イソシアヌル酸)
CAS番号	108-80-5

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)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	1.9525	1.9525			KOWWIN	-	-	key study	(Q)SAR	KOWWIN v1.67a Sept 2008	2C	×	-		-
2 HSDB	1.95	1.95			-	-	-	-	その他(推定 値),推定値	-	4C	×	-	US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver.3.12. Nov 30, 2004. Available from, as of Jun 25, 2007: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedl.htm .	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT:
3 PhysProp	0.61	0.61			-	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	×	-	MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1995).	-
4 SIDS	<0.3	0.3	25 °C		OECD TG 107	yes	-	key study	experimental result	-	1A	○	-	MITI, Japan.	p.222; SIDS Dossier p.246
5 既存点検事業	<=0.3[回歸 式 logPow =1.418×log k +0.259 被験物質の 保持時間は 基準物質中 で最も保持 時間の短い 2-ブタノ ンよりもさ らに短かつ た。よっ て、正確な 分配係数の 算出は不可 能なため、 2-ブタノ ンを基準と して0.3以 下とし た。]	0.3	25±1 °C		OECD TG 117	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result	-	1A	○	-		K0103変化物

基本情報

優先評価化学物質通し番号	
物質名称	1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 イソシアン酸)
CAS番号	108-80-5

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)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	0.000000000607 Pa・ m ³ /mol	6.07E-10			-	key study	(Q)SAR	HENRYWIN v3.20 October 2008	2C	○			
2 HSDB	8.74E-15 atm・ m ³ /mol	8.86E-10			-	-	estimated by calculation		4C	×		US EPA; Estimation Program Interface (EPI) Suite. Ver.3.12. Nov 30, 2004. Available from, as of Jun 25, 2007: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedl.htm .	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > OTHER CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES:
3	8.7E-15 atm・m ³ /mol	8.82E-10			-	-	estimated by calculation		4C	×		SRC.	ENVIRONMENTAL FATE & EXPOSURE: > ENVIRONMENTAL FATE:
4 PhysProp	1.36E-18 atm・ m ³ /mol	1.38E-13			-	-	estimated by calculation		4C	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1991).	

基本情報

優先評価化学物質通し番号	
物質名称	1, 3, 5-トリアジナシン-2, 4, 6-トリオン (別名 イソシアヌル酸)
CAS番号	108-80-5

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)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	96.22 L/kg	96.22			-	KOCWIN	-	-	key study	(Q)SAR	KOCWIN v2.00 February 2009	2C	×	-		-
2 HSDB	Koc	58	58			-	-	-	-	-	その他(推定 値), 推定値	-	4C	×	-	Yalkowsky SH, He Y, eds; Handbook of aqueous solubility data. Boca Raton, FL: CRC Press p. 48 (2003).	ENVIRONMENTAL FATE & EXPOSURE: > SOIL ADSORPTION/MOBILITY:
3 Franco	Koc	18.7L/kg[2C以 下の値を用いて 推定(4)]	18.7 (非解離種) 37.4 (アニオン種)								(Q)SAR		4C	○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	
物質名称	1, 3, 5-トリアジン-2, 4, 6-トリオン (別名 イソシアヌル酸)
CAS番号	108-80-5

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	曝露期間	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)	備考	文献	ページ番号等
1 SIDS	-	2	1 mg/L		BCF	-	<0.5	0.5	OECD TG 305C	yes	-	key study	experimental result	-	1A	○	-	MITI, Japan.	p.222; SIDS Dossier p.249
2	-	1	10 mg/L		BCF	-	<0.1	0.1	OECD TG 305C	yes	-	key study	experimental result	-	1A	×	-	MITI, Japan.	p.222; SIDS Dossier p.249

基本情報

優先評価化学物質通し番号	
物質名称	1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 イソシアヌル酸)
CAS番号	108-80-5

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	備考	文献	ページ番号等
1	CRC	pKa	6.88	算出不可		-	-	-	-	-	-	-		Dissociation Constants of Organic Acids and Bases (Section 5)
2		pKa	11.4	算出不可		-	-	-	-	-	-	-		Dissociation Constants of Organic Acids and Bases (Section 5)
3		pKa	13.5	算出不可		-	-	-	-	-	-	-		Dissociation Constants of Organic Acids and Bases (Section 5)
4	HSDB	pKa	6.88	算出不可		-	-	-	-	-	-	-	O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 469.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > DISSOCIATION CONSTANTS:
5		pKa	11.4	算出不可		-	-	-	-	-	-	-	O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 469.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > DISSOCIATION CONSTANTS:
6		pKa	13.5	算出不可		-	-	-	-	-	-	-	O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. 13th Edition, Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc., 2001., p. 469.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > DISSOCIATION CONSTANTS:
7	Merck	pKa	6.88	算出不可		-	-	-	-	-	-	-		Monograph Number: 0002698
8		pKa	11.4	算出不可		-	-	-	-	-	-	-		Monograph Number: 0002698
9		pKa	13.5	算出不可		-	-	-	-	-	-	-		Monograph Number: 0002698
10	PhysProp	pKa	7.2	算出不可		-	-	-	-	experimental result	-	-	BUDAVARI, S ET AL. (1989).	-
11	SIDS	pK	6.88	算出不可		-	-	-	key study	-	-	-	Merck Index.	p.222; SIDS Dossier p.247
12		pK	11.4	算出不可		-	-	-	key study	-	-	-	Merck Index.	p.222; SIDS Dossier p.247
13		pK	13.5	算出不可		-	-	-	key study	-	-	-	Merck Index.	p.222; SIDS Dossier p.247
14	既存点検事業	pKa	11.4	算出不可		-	-	-	-	-	-	-	THE MERCK INDEX (12th Edition).	K0103変化物
15		pKa	13.5	算出不可		-	-	-	-	-	-	-	THE MERCK INDEX (12th Edition).	K0103変化物
16		pKa	6.88	算出不可		-	-	-	-	-	-	-	THE MERCK INDEX (12th Edition).	K0103変化物

基本情報

優先評価化学物質通し番号	
物質名称	1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 イソシアヌル酸)
CAS番号	108-80-5

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

優先評価化学物質通し番号	
物質名称	1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン (別名 イソシアヌル酸)
CAS番号	108-80-5

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 SIDS	その他	5.30%	Test mat. analysis		OECD TG 301C	yes	-	key study	-		-	MITI, Japan .	p.222; SIDS Dossier p.249
2	その他	7.80%	TOC removal		OECD TG 301C	yes	-	key study	-		-	MITI, Japan .	p.222; SIDS Dossier p.249
3	その他	0%	O ₂ consumption		OECD TG 301C	yes	-	key study	-		-	MITI, Japan .	p.222; SIDS Dossier p.249