

(案)

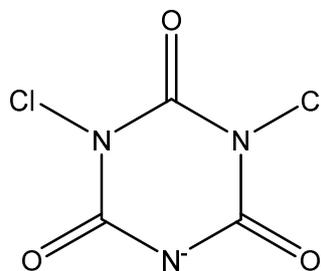
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

生態影響に係る評価

物理化学的性状等の詳細資料

ナトリウム = 3, 5 - ジクロロ - 2, 4, 6 - トリ
オキソ - 1, 3, 5 - トリアジナン - 1 - イド

優先評価化学物質通し番号 159



Na⁺

平成 30 年 3 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.....	3
6	1-3 分解性.....	9
7	2 【付属資料】.....	10
8	2-1 物理化学的性状等一覧.....	10
9	2-2 その他.....	12
10		
11		

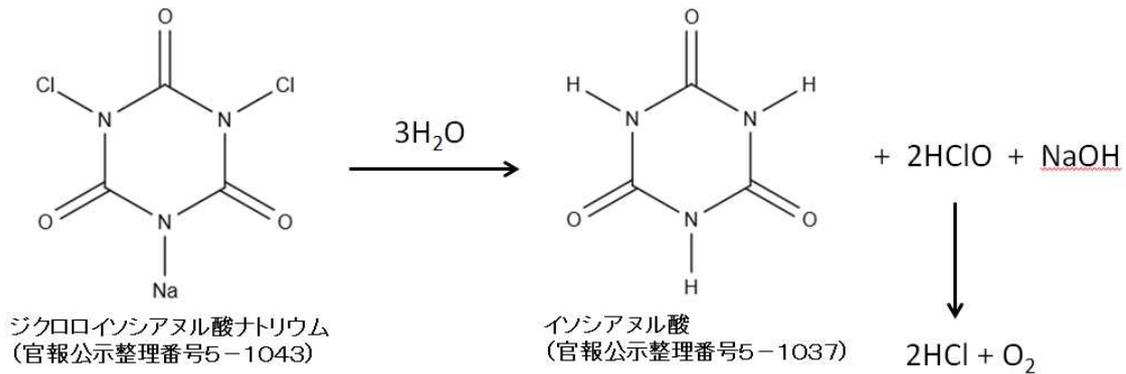
1 1 評価対象物質の性状

2 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
3 タを示す。

5 1-1 評価対象物質の設定

6 ナトリウム = 3, 5 - ジクロロ - 2, 4, 6 - トリオキソ - 1, 3, 5 - トリアジナン -
7 1 - イド (以下「ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム」という。) について、環境中での分
8 解等を考慮し、評価対象物質の設定を行った。

9 ジクロロイソシアヌル酸ナトリウムは水中で速やかに加水分解され、最終的には 1, 3,
10 5 - トリアジナン - 2, 4, 6 - トリオン (以下「イソシアヌル酸」という。) に変化する
11 と考えられる¹。水溶液中での反応式を図 1-1 に示す。



13 図 1-1 優先評価化学物質の水溶液中での反応式

14
15
16 加水分解生成物は他に次亜塩素酸と水酸化ナトリウムがあるが、次亜塩素酸は水溶液中
17 で不安定であり、水中で不均化により塩化水素を放出しながら徐々に分解し、既知見通知で
18 示されたイオンのみに環境中で分解する化学物質である²。また、水酸化ナトリウムも水中
19 で既知見通知で示されたイオンのみに分解する化学物質である。

20 以上のことから、定常状態の濃度を推計する暴露評価、及びその濃度を用いてのリスク評
21 価においては、変化物の一つであるイソシアヌル酸を評価対象物質とする。

22
23
¹ 既存点検分解度試験報告書 (MITI(1991b))

² 「製造数量等の届出を要しない一般化学物質の選定の考え方について」(平成 22 年 4 月 23 日)

1 本優先評価化学物質については、化審法の運用通知³に基づき水和物の届出も行われてい
 2 るが、ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム及びその二水和物ともに蒸気圧 1 Pa 未満、水溶
 3 解度 10,000 mg/L 以上であることから、排出係数の設定に係る蒸気圧区分及び水溶解度区
 4 分は同じである。よって、排出量推計にあたっては、イソシアヌル酸への分子量換算にはジ
 5 クロロイソシアヌル酸ナトリウム及びその二水和物の分子量をそれぞれの取扱量に対し用
 6 いるが、その他の物理化学的性状についてはジクロロイソシアヌル酸ナトリウムの値で代
 7 表できるものとする。

8 したがって、二水和物の物理化学的性状データの精査、及び親化合物の環境中の分解性デ
 9 ータの精査については省略した。

10 排出量推計に係る親化合物の物理化学的性状を表 1 - 1 に示す。

11
12
13 表 1 - 1 排出量推計に係る親化合物の物理化学的性状データ

項目	単位	ジクロロイソシアヌル酸 ナトリウム	ジクロロイソシアヌル酸 ナトリウム 二水和物
分子量	-	219.95	255.98
蒸気圧	Pa	(6.0×10^{-3}) ⁴	6.13×10^{-13} ²
水に対する溶解度	mg/L	<u>170,000</u> ³	35,865 ²

14 1) 平成 29 年度第 2 回 化審法のリスク評価等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
 15 成 29 年 9 月 11 日)で了承された値

16 2) EPI Suite(2012)

17 3) HSDB

18 4) ECHA

19 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。

20

21

3 「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の運用について」の「3-2 構造の一部又は構成成分に第一種特定化学物質、第二種特定化学物質、監視化学物質、優先評価化学物質又は一般化学物質を有するものの取扱い」

1-2 物理化学的性状及び濃縮性

1-2-1 ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム

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 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	評価で用いた値(参考)
分子量	-	219.95	-	219.95
融点		(240) ²⁾	HSDB 記載データの中央値 測定値か推計値かは不明	240
沸点		-	240 ~ 250 で分解	640
蒸気圧	Pa	(6.0 × 10 ⁻³) ⁴⁾	気体飽和法に基づく 20 での測定 の検出限界値 (< 6.0 × 10 ⁻³)	6.0 × 10 ⁻³
水に対する溶解度	mg/L	<u>170,000</u> ²⁾	20 での測定値	226,400 ⁴⁾
1-オクタールと水との間の分配係数(logPow)	-	-0.0556 ³⁾	KOWWIN による推計値	-0.0556 ³⁾
ヘンリー係数	Pa·m ³ /mol	3.14 × 10 ⁻⁷ ³⁾	HENRYWIN による推計値	3.14 × 10 ⁻⁷
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	7.48 ³⁾	KOCWIN による推計値	7.48 ³⁾
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	3.162 ³⁾	BCFBAF による推計値	3.162 ³⁾
生物蓄積係数(BMF)	-	1 ⁵⁾	logPow と BCF から設定	1 ⁵⁾
解離定数(pKa)	-	3.75 ²⁾		- ⁶⁾

1) 平成 29 年度第 2 回 化審法のリスク評価等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 9 月 11 日)で了承された値

2) HSDB

3) EPI Suite(2012)

4) ECHA

5) MHLW, METI, MOE (2014)

6) 評価においては解離定数は考慮しない

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。

融点

評価で採用した値 (240) は、方法の詳細や GLP 適用の有無が不明であるが、「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(以下、「信頼性の定まった情報源」という。)である HSDB に記載されたデータ (230 ~ 250) の中央値をとったものである。既存点検 (MITI (1991a)) においては、「測定不可 (240 ~ 250 で分解) 」とされているが、評価においてもこの値 (240) を参考値として用いる。

1 沸点

2 評価 で採用した値 (640) は MPBPVP (v1.43) を用いた推計値である。融点の項目で
3 記載したように、240~250 で分解していることから、評価 で値を設定しない。

4
5 蒸気圧

6 評価 で採用した値は REACH 登録情報に記載された測定値である。これは、気体飽和
7 法(GLP 準拠) を用いて 20 で測定し検出されなかったことから、測定限界値である
8 6.0×10^{-3} Pa 未満と結論付けたものである。また、MPBPVP (v1.43)を用いた推計では、 6.10
9 $\times 10^{-13}$ Pa であった。他に測定値の情報がないことから、評価 においては気体飽和法に
10 よる測定限界値 (6.0×10^{-3} Pa) を参考値として用いる。

11
12 水に対する溶解度

13 評価 で採用した値 (226,400 mg/L) は REACH 登録情報に記載された 25 での測定値
14 (236,800 mg/L, 248,200 mg/L) を 20 に補正し平均値をとったものである。評価 におい
15 ては、方法の詳細や GLP 準拠の有無が不明であるが、信頼性の定まった情報源である HSDB
16 に記載された 20 での測定値 (170,000 mg/L) を用いる。

17 なお、既存点検 (MITI (1991a)) では、OECD TG 104 による 20~25 での測定値とし
18 て 100 g/L 以上との記載があった。

19
20 logPow

21 評価 で採用した値 (-0.0556) は KOWWIN (v1.68)を用いた推計値である。他に測定値
22 の情報がないことから、評価 においてもこの値(-0.0556) を用いる。

23
24 ヘンリー係数

25 評価 で採用した値 (3.14×10^{-7} Pa \cdot m³/mol) は HENRYWIN (v3.20) の Bond
26 Estimation Method を用いた推計値である。他に測定値の情報がないことから、評価 に
27 おいてもこの値 (3.14×10^{-7} Pa \cdot m³/mol) を用いる。

28
29 Koc

30 評価 で採用した値 (7.48 L/kg) は KOCWIN (v2.00) を用いた推計値(Log Kow
31 Estimation Method)である。他に測定値の情報がないことから、評価 においてもこの値
32 (7.48 L/kg) を用いる。

33
34 BCF

35 評価 で採用した値 (3.162 L/kg) は BCFBAF (v3.01) を用いた推計値(Log Kow
36 Estimation Method)である。他に測定値の情報がないことから、評価 においてもこの値

1 (3.162 L/kg) を用いる。

2

3 BMF

4 評価 で採用した値は、logPow 及び BCF から技術ガイダンスに従って設定したもので
5 ある。また、他の信頼性の定まった情報源から BMF の測定値は得られなかったため、評価
6 においてもこの値 (1) を用いる。

7

8 解離定数

9 評価 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。信頼性の定まった
10 情報源である HSDB では、ジクロロイソシアヌル酸(CAS: 2782-57-2)の解離定数として
11 3.75 が得られた。評価 においてはこの値 ($pK_a = 3.75$) を用いる。

12

13

1 1-2-2 イソシアヌル酸

2 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。

3 本採用値は、平成 29 年度第 1 回化審法三省合同審議会（平成 29 年 6 月 23 日）での 1 ,
4 3 , 5 - トリクロロ - 1 , 3 , 5 - トリアジナン - 2 , 4 , 6 - トリオン（以下「トリクロ
5 ロイソシアヌル酸」という。）のリスク評価（一次）評価 に係る審議において用いられた
6 値である。

9 表 1 - 3 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 で用いた値(参考)
分子量	-	129.07	-	-
融点		330 ²⁾	測定値か推計値か不明	-
沸点		458.3 ³⁾	MPBPVP (v1.43)による推計値	-
蒸気圧	Pa	6.15 × 10 ^{-5 4)}	100 における測定値を 20 に補正した値	-
水に対する溶解度	mg/L	2,520 ⁴⁾	25 における測定値を 20 に補正した値	-
1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow)	-	(0.3) ⁵⁾	基準物質に基づく検量線の限界値 (0.3)	-
ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	6.07 × 10 ^{-10 3)}	HENRYWIN (v3.20) による推計値	-
有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)	L/kg	18.7 ⁶⁾ (非解離種) 37.4 ⁶⁾ (アニオン種) 34.4 ⁶⁾ (pH7.6 における値)	Franco の推計式により計算した値	-
生物濃縮係数(BCF)	L/kg	(0.1) ⁷⁾	濃縮度試験における測定値(0.1)	-
生物蓄積係数(BMF)	-	1 ⁸⁾	logPow と BCF から設定	-
解離定数(pKa)		6.88 ⁴⁾	測定値か推計値か不明	-

10 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
11 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。

12 2) OECD(1999)

13 3) EPI Suite(2012)

14 4) MITI(1997a)

15 5) MITI(1997b)

16 6) Franco and Trapp(2008)

17 7) MITI(1977)

18 8) MHLW, METI, MOE (2014)

19 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。

20
21 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

22
23 融点

24 評価 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

1 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
2 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
3 OECD SIDS に記載されたデータである。

4 5 沸点

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

8 9 蒸気圧

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

12 13 水に対する溶解度

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

16 17 logPow

18 評価 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
19 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ブクターk の対数値から最
20 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
21 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
22 を基準として0.3以下としている。

23 24 ヘンリー係数

25 評価 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
26 値である。

27 28 Koc

29 評価 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
30 (アニオン種))を用いる。

31 32 BCF

33 評価 で使用するデータ(0.1 L/kg (20))は、信頼性の定まった情報源である既存点検に
34 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。

35 36 BMF

1 評価 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
2 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
3 る。

4

5 解離定数

6 評価 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
7 Edition)の値である。

8 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%、
9 43.1%、7.1%、0.8%、0.1%が非解離種として存在する。

10

11

12

1 1-3 分解性

2 下表にモデル推計に採用したイソシアヌル酸の分解に係るデータを示す。親化合物の環
3 境中の分解性に係るデータについてはモデル推計に使用しないため省略した。

4 本採用値は、平成 29 年度第 1 回化審法三省合同審議会(平成 29 年 6 月 23 日)でのトリ
5 クロロイソシアヌル酸のリスク評価(一次)評価に係る審議において用いられた値である。

7 表 1-3 イソシアヌル酸の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	5.4 ²⁾	AOPWIN (V.1.92)により推計。25 °Cでの反 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	10,000 ³⁾	化審法の分解度試験結果から生分解半 減期へ換算
		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	10,000	
		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	40,000	
		加水分解	NA	

8 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
9 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。

10 2) EPI Suite(2012)

11 3) MITI(1975)

12 NA:情報が得られなかったことを示す。

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 ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム

7 Aldlich: Sigma-Aldlich 試薬カタログ (Product Number: 35915)

8 ECHA: Information on Chemicals – Registered substances.

9 <http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances>, (2017-
10 6-13 閲覧).

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

12 FAO(2004): SODIUM DICHLOROISOCYANURATE(NaDCC – anhydrous and
13 dihydrate)Chemical and Technical Assessment (CTA), 61st JECFA

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](http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB), (2017-6-13 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 MITI(1991a): MITI. ジクロロイソシアヌール酸塩 (K, Na) [ジクロロイソシアヌール酸
19 ナトリウム (被験物質番号 K - 748) にて試験実施] の物理化学性状の測定. 試験番号
20 80748K, 既存化学物質点検, 1991.

21 MITI(1991b): MITI. ジクロロイソシアヌール酸塩 (K, Na) [ジクロロイソシアヌール酸
22 ナトリウム (被験物質番号 K - 748) にて試験実施] の微生物による分解度試験. 試験番
23 号 20748, 既存化学物質点検, 1991.

24 MITI(1996): MITI. 1,3,5-トリクロロイソシアヌル酸 (被験物質番号 K-103) の解離定数の
25 測定, 既存化学物質点検, 1996.

26

27

28

- 1 出典)
- 2 イソシアヌル酸
- 3 EPI Suite(2012): US EPA. Estimation Programs Interface Suite. Ver. 4.11, 2012.
- 4 Franco and Trapp(2008): Franco, A. and Trapp, S. Estimation of the Soil-Water Partition Coefficient
- 5 Normalized to Organic Carbon for Ionizable Organic Chemicals, Environ. Toxicol. and Chem.,
- 6 27(10):1995-2004, 2008.
- 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
- 8 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.
- 9 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
- 10 生成物) の分解度試験成績報告書. 既存化学物質点検, 1975.
- 11 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
- 12 生成物) の濃縮度試験成績報告書. 既存化学物質点検, 1977.
- 13 MITI(1996): MITI. 1,3,5-トリクロロイソシアヌル酸 (被験物質番号 K-103) の解離定数の
- 14 測定, 既存化学物質点検, 1996.
- 15 MITI(1997a): MITI. イソシアヌル酸 (被験物質番号 K-103 変化物) の物理化学性状の
- 16 測定. 既存化学物質点検, 1997.
- 17 MITI(1997b): MITI. イソシアヌル酸 (被験物質番号 K-103 変化物) の1-オクタノール
- 18 と水との間の分配係数試験 (HPLC 法). 既存化学物質点検, 1997.
- 19 OECD(1999): OECD SIDS Initial Assessment Report Isocyanuric Acid. 1999
- 20

- 1 2-2 その他
- 2 特になし。