

1  
2  
3  
4  
5  
6  
7  
8  
9  
10  
11  
12  
13  
14  
15  
16  
17  
18  
19  
20  
21  
22  
23  
24  
25  
26

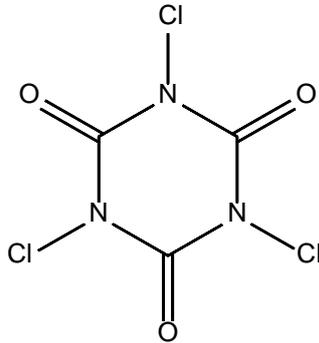
# 優先評価化学物質のリスク評価(一次)

## 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 |                        |    |
| 2 | 1 評価対象物質の性状 .....      | 1  |
| 3 | 1-1 物理化学的性状及び濃縮性 ..... | 1  |
| 4 | 1-2 分解性 .....          | 6  |
| 5 | 2 【付属資料】 .....         | 10 |
| 6 | 2-1 物理化学的性状等一覧 .....   | 10 |
| 7 | 2-2 その他 .....          | 10 |
| 8 |                        |    |
| 9 |                        |    |

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タ  
3 を示す。

4 1-1 物理化学的性状及び濃縮性

5 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

6 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  
7 から変更した値はなかった。  
8

9 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<sup>1)</sup>

10

| 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 <sup>2,3,4)</sup>     | 測定値か推計値か不明   | 246.7 <sup>2)</sup>      |
| 沸点                         | ℃                      | (412.5 <sup>5)</sup> )      | MPBPWIN (v1.43) を用いた推計値<br>(既存点検 <sup>6)</sup> では、「測定不可(285℃で褐色に変色していた)」との記載有) | 412.5 <sup>5)</sup>      |
| 蒸気圧                        | Pa                     | (1.53×10 <sup>-6.5)</sup> ) | MPBPWIN (v1.43) を用いた推計値<br>(既存点検 <sup>6)</sup> では、「測定不可(黒く変色していた)」との記載有)       | 1.53×10 <sup>-6.5)</sup> |
| 水に対する溶解度                   | mg/L                   | (11,202 <sup>3,4)</sup> )   | 25℃における測定値を 20℃に補正した値<br>(既存点検 <sup>6)</sup> では、「加水分解のため測定不可」との記載有)            | 11,202 <sup>3)</sup>     |
| 1-オクタノールと水との間の分配係数(logPow) | —                      | (0.94 <sup>5)</sup> )       | KOWWIN(v1.68) を用いた推計値  | 0.94 <sup>5)</sup>       |
| ヘンリー係数                     | Pa·m <sup>3</sup> /mol | (4.3×10 <sup>-6.5)</sup> )  | HENRYWIN(v3.20) を用いた推計値  | 4.3×10 <sup>-6.5)</sup>  |
| 有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)          | L/kg                   | (26.58 <sup>5)</sup> )      | logPow を用いた KOCWIN (v2.00)による推計値   | 26.58 <sup>5)</sup>      |
| 生物濃縮係数(BCF)                | L/kg                   | (3.16 <sup>5)</sup> )       | BCFBFWIN(v3.01) を用いた推計値  | 3.16 <sup>5)</sup>       |
| 生物蓄積係数(BMF)                | —                      | 1                           | logPow と BCF から設定 <sup>5)</sup>  | 1                        |
| 解離定数(pKa)                  | —                      | — <sup>6)</sup>             | 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  | — <sup>6)</sup>          |

11 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  
12 一会議(平成 28 年 11 月 17 日)で了承された値

13 2) CRC(2015)

14 3) HSDB(2016)

15 4) PhysPro(2016)

16 5) EPI Suite(2012)

17 6) METI(1996)

18  
19  
20 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。  
21

1 ①融点

2 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  
3 定まった情報源<sup>1</sup>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  
4 値 (246.7°C) を用いる。

6 ②沸点

7 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  
8 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  
9 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。

11 ③蒸気圧

12 評価Ⅰでは MPBPWIN (v1.43) を用いた推計値 ( $1.53 \times 10^{-6}$  Pa) を用いた。既存点検においては、  
13 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  
14 ても参考値としてこの値 ( $1.53 \times 10^{-6}$  Pa) を用いる。

16 ④水に対する溶解度

17 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  
18 (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  
19 (25°C))を温度換算した値 (11,202 mg/L (20°C)) を用いる。

21 ⑤logPow

22 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  
23 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  
24 してこの値 (0.94) を用いる。

26 ⑥ヘンリー係数

27 評価Ⅰでは HENRYWIN(v3.20) を用いた推計値 ( $4.3 \times 10^{-6}$  Pa·m<sup>3</sup>/mol) を用いた。評価Ⅱにお  
28 いても参考値としてこの値 ( $4.3 \times 10^{-6}$  Pa·m<sup>3</sup>/mol) を用いる。

30 ⑦Koc

31 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  
32 てこの値 (26.58) を用いる。

34 ⑧BCF

35 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  
36 してこの値(3.16)を用いる。

38 ⑨BMF

39 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  
40 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  
41 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。

---

<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  
2  
3  
4  
5

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 1-1-2 1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン

2 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  
3 及び生物濃縮係数を示す。

4  
5

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<sup>1)</sup>

| 項目                        | 単位                     | 採用値   | 詳細   | 評価Ⅰで用いた値(参考) |
|---------------------------|------------------------|---|--|--------------|
| 分子量                       | —                      | 129.07  | —  | —            |
| 融点                        | ℃                      | 330   | 測定値か推計値か不明 <sup>2)</sup>   | —            |
| 沸点                        | ℃                      | 458.3   | MPBPWIN (v1.43) <sup>3)</sup> を用いた推計値<br>(OECD SIDS では、「Decomposed (分解された)」との記載有り) | —            |
| 蒸気圧                       | Pa                     | 6.15×10 <sup>-5</sup>                                     | 25℃における測定値 <sup>4)</sup> 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 <sup>5)</sup> 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-ブタノンを基準として推計した値(≤0.3) <sup>5)</sup>  | —            |
| ヘンリー係数                    | Pa·m <sup>3</sup> /mol | 6.07×10 <sup>-10</sup>                                    | HENRYWIN(v3.20) <sup>3)</sup> を用いた推計値  | —            |
| 有機炭素補正土壌吸着係数(Koc)         | L/kg                   | 18.7<br>(非解離種)<br>37.4<br>(アニオン種)<br>34.4<br>(pH7.6における値) | Franco らの論文 <sup>5)</sup> 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) <sup>6)</sup>   | —            |
| 生物蓄積係数(BMF)               | —                      | 1   | logPow と BCF から設定 <sup>6)</sup>  | —            |
| 解離定数(pKa)                 | —                      | 6.88  | 測定値か推計値か不明 <sup>6)</sup>   | —            |

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  
7 一会議(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。

8 2) OECD(1999)

9 3) EPI Suite(2012)

10 4) MITI(1996)

11 5) Franco and Trapp, 2008

12 6) MITI(1977)

13 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。

14

15 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

16

17 ①融点

18 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  
19 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  
20 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  
21 SIDS に記載されたデータである。

22

23 ②沸点

24 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、

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

2  
3 ③蒸気圧

4 評価Ⅱで使用するデータ( $6.15 \times 10^{-5}$  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。

6  
7 ④水に対する溶解度

8 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。

10  
11 ⑤logPow

12 評価Ⅱで使用するデータ( $\leq 0.3$ )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。

17  
18 ⑥ヘンリー係数

19 評価Ⅱで使用するデータ ( $6.07 \times 10^{-10}$  Pa $\cdot$ m<sup>3</sup>/mol) は、HENRYWIN(v3.20) を用いた推計値である。

21  
22 ⑦Koc

23 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。

25  
26 ⑧BCF

27 評価Ⅱで使用するデータ( $\leq 0.1$  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。

29  
30 ⑨BMF

31 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。

33  
34 ⑩解離定数

35 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。

36  
37 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 1-2 分解性

2 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

3 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」  
4 の分解に係るデータを示す。

5  
6 表 1-2-1 分解に係るデータのまとめ<sup>1)</sup>

| 項目 |               | 半減期<br>(日) | 詳細  |
|----|---------------|------------|-----|
| 大気 | 大気における総括分解半減期 |            | NA  |
|    | 機序別の<br>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<br>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<br>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<br>半減期   | 生分解        | NA  |
|    |               | 加水分解       | -   |

7 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  
8 一会議(平成 28 年 11 月 17 日)で了承された値

9 2) EPI Suite(2012)

10 3) METI(1975)

11 NA:情報が得られなかったことを示す

12 ※ 速やかに変化

13  
14  
15 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  
16 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。

17  
18 ①大気

19 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、  
20 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。

21 ①-1 OHラジカルとの反応の半減期

22 半減期算出に採用した反応速度定数データ ( $3.00 \times 10^{-12}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s) は AOPWIN (v1.92)  
23 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  $5 \times 10^5$  molecule/cm<sup>3</sup>  
24 とした場合、半減期は 5.4 日と算出される。

25  
26 ②水中

27 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

1 応に関する情報が得られた。

2 ②-1 生分解の半減期

3 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  
4 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  
5 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  
6 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  
7 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。

8 ②-2 加水分解の半減期

9 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  
10 変化するため測定不可」との記載がある。

11

12 ③土壌

13 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  
14 応に関する情報も得られなかった。

15

16 ④底質

17 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  
18 に関する情報も得られなかった。

1 1-2-2 1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン

2 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  
3 を示す。

4  
5

表 1-2-2 分解に係るデータのまとめ<sup>1)</sup>

| 項目 |               | 半減期<br>(日)  | 詳細     |
|----|---------------|-------------|--------|
| 大気 | 大気における総括分解半減期 |             | NA     |
|    | 機序別の<br>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<br>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<br>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<br>半減期   | 生分解         | NA     |
|    |               | 加水分解        | NA     |

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  
7 一会議(平成 28 年 11 月 17 日)で了承された値

8 2) EPI Suite(2012)

9 NA:情報が得られなかったことを示す。

10  
11

12 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  
13 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。

14  
15

①大気

16 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、  
17 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。

18 ①-1 OH ラジカルとの反応の半減期

19 半減期算出に採用した反応速度定数データ ( $3.00 \times 10^{-12}$  cm<sup>3</sup>/molecule/s) は AOPWIN (v1.92)  
20 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  $5 \times 10^5$  molecule/cm<sup>3</sup>  
21 とした場合、半減期は 5.4 日と算出される。

22  
23

②水中

24 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  
25 は得られなかったが、分解度に関する情報が得られた。

26 ②-1 生分解の半減期

27 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  
28 -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、

1 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  
2 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

4 ③土壌

5 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  
6 応に関する情報も得られなかった。

7

8 ④底質

9 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  
10 応に関する情報も得られなかった。

11

12

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

7 CRC(2015): Haynes, W. M., ed. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 96th ed., CRC Press,  
8 2015-2016.

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

12 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  
13 度試験成績報告書., 既存化学物質点検, 1975.

14 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  
15 縮度試験成績報告書. 既存化学物質点検, 1977.

16 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) の物理化学性状の測  
17 定, 既存化学物質点検, 1996.

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

19

20

21 **1, 3, 5-トリアジナン-2, 4, 6-トリオン**

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

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

24 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  
25 縮度試験成績報告書. 既存化学物質点検, 1977.

26 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) の物理化学性状の測  
27 定, 既存化学物質点検, 1996.

28

29 **2-2 その他**

30 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  | SRP 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<br>[°C] | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価 I) | キースタ<br>ディ該非<br>(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<br>[°C] | 101.325 kPa<br>における沸<br>点[°C] | 測定条件<br>圧力 | 試験方法等                  | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価 I) | キースタ<br>ディ該非<br>(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<br>業 | [測定不可<br>(285°Cで<br>褐色に変色<br>していた)] | 単位換算不<br>可   |                               |            | その他,JIS K<br>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<br>[mg/L] | 20°Cにおける<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価 I) | キースタ<br>ディ該非<br>(評価 I) | 備考 | 文献                    | ページ番号等  |
|---------------|--|----------------|----------------------------|------------|----|---|-----|-------------|--------------------------|------------------------|---------|----------------------|------------------------|----|-----------------------|---|
| 1 EPI Suite   | 244<br>mg/L[2C以<br>下の値を用<br>いて推定<br>(4) 1  | 244            | 227.775571                 | 25 °C      |    | WSKOWWIN  |     |             |                          | (Q)SAR                 |         | 4C                   | ×                      |    |                       |   |
| 2 HSDB        | 1.20E+4<br>mg/L[Water<br>solubility =<br>1.2% =<br>1.20X10+4<br>mg/L at 25<br>deg C] | 12000          | 11202.0773                 | 25 °C      |    |   |     |             |                          | -                      |         | 2B                   | ○                      |    |                       | CHEMICAL/PHYSICAL<br>PROPERTIES: ><br>SOLUBILITIES: |
| 3             | 1 g/100<br>g[Solubility<br>in water at<br>25 deg C =<br>1 g/100 g]                   | 10000          | 9335.06438                 | 25 °C      |    |   |     |             |                          |                        |         | 2B                   | ×                      |    |                       | CHEMICAL/PHYSICAL<br>PROPERTIES: ><br>SOLUBILITIES: |
| 4 IUCLID      | 12<br>g/L[slightly<br>soluble]   | 12000          | 12000                      | 20 °C      |    | 3[ca. 3 at 1<br>vol% and<br>20 degree<br>C]                 |     |             |                          |                        |         | 4A                   | ×                      |    |                       | p.11  |
| 5             | 1.1~1.3<br>g/L[slightly<br>soluble]  | 1200           | 1120.20773                 | 25 °C      |    | 4.4[= 4.4<br>at .2 vol%<br>and 25<br>degree C]              |     |             |                          |                        |         | 4A                   | ×                      |    |                       | p.11  |
| 6             | 1.2[単位の記<br>載なし]   | 単位換算不<br>可     |                            | 25 °C      |    | 2.8[= 2.8<br>at 1 vol%<br>and 25<br>degree C]               |     | no          |                          |                        |         | 3                    | ×                      |    |                       | p.11  |
| 7             | 12 g/L   | 12000          | 11202.0773                 | 25 °C      |    | 2.8[= 2.8<br>at 1 other:<br>weight %<br>and 25<br>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<br>result |         | 2B                   | ○                      |    | BURAKEVICH, JV. 1979. |   |
| 10 既存点検事<br>業 | [加水分解の<br>ため測定不<br>可]  | 単位換算不<br>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<br>温度 | pH | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価 I) | キースタ<br>ディ該非<br>(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<br>calculation |         | 4C                   | ×                      |    |                             | CHEMICAL/PHYSICAL<br>PROPERTIES: ><br>OCTANOL/WATER<br>PARTITION<br>COEFFICIENT: |
| 3 PhysProp  | 0.94 | 0.94 |            |    |        |     |             |                          | estimated by<br>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<br>[Pa·m <sup>3</sup> /mol] | 測定条件<br>温度 | pH | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価 I) | キースタ<br>ディ該非<br>(評価 I) | 備考 | 文献                             | ページ番号等   |
|-------------|--|----------------------------------|------------|----|-------------|--------------------------|-----------------------------|---------|----------------------|------------------------|----|--------------------------------|--|
| 1 EPI Suite | 0.0000043 Pa·<br>m <sup>3</sup> /mol       | 0.0000043                        |            |    |             |                          | (Q)SAR                      |         | 2C                   | ○                      |    |                                |  |
| 2 HSDB      | 6.2E-11 atm·m <sup>3</sup> /mol            | 6.28215E-06                      |            |    |             |                          | estimated by<br>calculation |         | 4C                   | ×                      |    |                                | CHEMICAL/PHYSICAL<br>PROPERTIES: > OTHER<br>CHEMICAL/PHYSICAL<br>PROPERTIES: |
| 3 PhysProp  | 0.0000000000619<br>atm·m <sup>3</sup> /mol | 6.27202E-06                      |            |    |             |                          | estimated by<br>calculation |         | 4C                   | ×                      |    | MEYLAN,WM &<br>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<br>[L/kg] | 測定条件<br>温度 | pH | 土壌条件 | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源におけ<br>るキースタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価 I) | キースタ<br>ディ該非<br>(評価 I) | 備考 | 文献 | ページ番号等              |
|-------------|-----|--|----------------|------------|----|------|--------|-----|-------------|--------------------------|-----------------------------|---------|----------------------|------------------------|----|----|---------------------|
| 1 EPI Suite | Koc | 26.58 L/kg[2C<br>以下の値を用<br>いて推定<br>(4) ] | 26.58          |            |    |      | KOCWIN |     |             |                          | (Q)SAR                      |         | 4C                   | ○                      |    |    |                     |
| 2 HSDB      | Koc | 25                                       | 25             |            |    |      |        |     |             |                          | estimated by<br>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<br>番号 | 被験物質<br>設定濃度 | 曝露期間 | 項目  | 項目の種類 | 値  | 統一表記<br>[L/kg] | 試験方法等     | GLP | reliability | 情報源におけ<br>るキースタディ<br>の該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細 | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価I) | キースタ<br>ディ-該非<br>(評価I) | 備考 | 文献 | ページ番号等 |
|-------------|----|-----------|--------------|------|-----|-------|--|----------------|-----------|-----|-------------|--------------------------|--------|---------|---------------------|------------------------|----|----|--------|
| 1 EPI Suite |    | 1         |              |      | BCF |       | 3.162 L/kg<br>(wet)[2C以<br>下の値を用<br>いて推定<br>(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 <sub>2</sub> 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<br>[°C] | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細                         | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価I) | キースタ<br>ディ該非<br>(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<br>September 2008 | 2C                  | ×                     |    |   | -   |
| 3 HSDB      | 融点  | 360 °C   | 360          | -       | -   | -           | -                        | -      |                                 | 2B                  | ×                     |    | layton, G. D. and F. E. Clayton (eds.),<br>Patty's Industrial Hygiene and Toxicology:<br>Volume 2A, 2B, 2C: Toxicology, 3rd ed.<br>New York: John Wiley Sons, 1981-1982.,<br>p. 2766. | CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: ><br>MELTING POINT:   |
| 4 Merck     | 昇華点 | >300 °C[does not melt up to 330°, sublimes and dissociates to isocyanic acid at higher | 300          | -       | -   | -           | -                        | -      |                                 | 2B                  | ×                     |    |   | Monograph Number:<br>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<br>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<br>[°C] | 101.325 kPa<br>における沸<br>点[°C] | 測定条件<br>圧力 | 試験方法等   | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>該非 | 値の種類   | 値の種類の詳細                         | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価 I) | キースタ<br>ディ該非<br>(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<br>September 2008 | 2C                   | ×                      |                                   |   | -  |
| 3 HSDB      | >330 °<br>C[330°C以<br>上でイソシ<br>アヌル酸<br>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 measurabl<br>e]                        | 単位換算不<br>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<br>000163<br>mmHg | 2.17E-09  | 2.17E-09         | 20 °C  | MPBPWIN     | -   | -           | key study        | (Q)SAR                         | MPBPWIN v1.43<br>September 2008 | 2C            | ×                | -  |              | -   |
| 2 HSDB      | 0.0000000<br>000441<br>mmHg | 5.88E-09  | 4.17E-09         | 25 °C  | -           | -   | -           | -                | estimated<br>by<br>calculation | -                               | 4C            | ×                | -  | SRC.         | CHEMICAL/PHYSICAL<br>PROPERTIES: ><br>MOLECULAR WEIGHT: |
| 3 PhysProp  | 0.0000000<br>305 mmHg       | 4.07E-06  | 2.88E-06         | 25 °C  | -           | -   | -           | -                | estimated<br>by<br>calculation | -                               | 4C            | ×                | -  | MPBPVP.      | -   |
| 4 SIDS      | <=0.005 Pa                  | 0.005     | 3.54E-03         | 25 °C  | OECD TG 104 | yes | -           | key study        | experiment<br>al result        | -                               | 1A            | ○                | -  | MITI, Japan. | p.222; SIDS Dossier<br>p.246                            |
| 5 既存点検事業    | <=0.005<br>Pa               | 0.005     | 6.15E-05         | 100 °C | OECD TG 104 | -   | -           | -                | experiment<br>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<br>[mg/L] | 20°Cにおける<br>水溶解度<br>[mg/L] | 測定条件<br>温度 | pH | 試験方法等       | GLP | reliability | 情報源にお<br>けるキースタ<br>ディの該非 | 値の種類                | 値の種類の詳細                        | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価 I) | キースタ<br>ディ該非<br>(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 <sub>2</sub> O] | 単位換算不可         |                            |            |    | -           | -   | -           | -                        | -                   |                                | 3                    | ×                      | sl hot H <sub>2</sub> 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<br>温度 | pH | 試験方法等          | GLP                        | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細                    | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価 I) | キースタ<br>ディ該非<br>(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<br>Sept 2008 | 2C                   | ×                      | -  |   | -  |
| 2 HSDB      | 1.95  | 1.95   |            |    | -              | -                          | -           | -                        | その他(推定<br>値),推定値            | -                          | 4C                   | ×                      | -  | US EPA; Estimation Program<br>Interface (EPI) Suite. Ver.3.12. Nov<br>30, 2004. Available from, as of Jun<br>25, 2007:<br><a href="http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedl.htm">http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedl.htm</a> . | CHEMICAL/PHYSICAL<br>PROPERTIES: ><br>OCTANOL/WATER<br>PARTITION<br>COEFFICIENT: |
| 3 PhysProp  | 0.61  | 0.61   |            |    | -              | -                          | -           | -                        | estimated by<br>calculation | -                          | 4C                   | ×                      | -  | MEYLAN,WM & HOWARD,PH<br>(1995).  | -  |
| 4 SIDS      | <0.3  | 0.3    | 25 °C      |    | OECD TG<br>107 | yes                        | -           | key study                | experimental<br>result      | -                          | 1A                   | ○                      | -  | MITI, Japan.  | p.222; SIDS Dossier<br>p.246   |
| 5 既存点検事業    | <=0.3[回帰<br>式<br>logPow<br>=1.418×log<br>k +0.259<br>被験物質の<br>保持時間は<br>基準物質中<br>で最も保持<br>時間の短い<br>2-ブタノ<br>ンよりもさ<br>らに短かつ<br>た。よっ<br>て、正確な<br>分配係数の<br>算出は不可<br>能なため、<br>2-ブタノ<br>ンを基準と<br>して0.3以<br>下とし<br>た。] | 0.3    | 25±1 °C    |    | OECD TG<br>117 | yes (incl.<br>certificate) | -           | -                        | experimental<br>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 イソシアンル酸) |
| 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<br>[Pa・m <sup>3</sup> /mol] | 測定条件<br>温度 | pH | reliability | 情報源における<br>キースタディ<br>の該非 | 値の種類                        | 値の種類の詳細                        | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価 I) | キースタ<br>ディ該非<br>(評価 I) | 備考 | 文献  | ページ番号等   |
|-------------|---|----------------------------------|------------|----|-------------|--------------------------|-----------------------------|--------------------------------|----------------------|------------------------|----|---|--|
| 1 EPI Suite | 0.000000000607 Pa・<br>m <sup>3</sup> /mol | 6.07E-10                         |            |    | -           | key study                | (Q)SAR                      | HENRYWIN v3.20<br>October 2008 | 2C                   | ○                      |    |   |  |
| 2 HSDB      | 8.74E-15 atm・<br>m <sup>3</sup> /mol      | 8.86E-10                         |            |    | -           | -                        | estimated by<br>calculation |                                | 4C                   | ×                      |    | US EPA; Estimation Program<br>Interface (EPI) Suite. Ver.3.12.<br>Nov 30, 2004. Available from, as<br>of Jun 25, 2007:<br><a href="http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedl.htm">http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedl.htm</a> . | CHEMICAL/PHYSICAL<br>PROPERTIES: > OTHER<br>CHEMICAL/PHYSICAL<br>PROPERTIES: |
| 3           | 8.7E-15 atm・m <sup>3</sup> /mol           | 8.82E-10                         |            |    | -           | -                        | estimated by<br>calculation |                                | 4C                   | ×                      |    | SRC.  | ENVIRONMENTAL FATE<br>& EXPOSURE: ><br>ENVIRONMENTAL FATE:                   |
| 4 PhysProp  | 1.36E-18 atm・<br>m <sup>3</sup> /mol      | 1.38E-13                         |            |    | -           | -                        | estimated by<br>calculation |                                | 4C                   | ×                      |    | MEYLAN,WM & HOWARD,PH<br>(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<br>[L/kg]                    | 測定条件<br>温度 | pH | 土壌条件 | 試験方法等  | GLP | reliability | 情報源におけ<br>るキースタディ<br>の該非 | 値の種類              | 値の種類の詳細                       | 信頼性ラ<br>ンク<br>(評価 I) | キースタ<br>ディ該非<br>(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<br>February 2009 | 2C                   | ×                      | -  |  | -  |
| 2 HSDB      | Koc | 58                                | 58                                |            |    | -    | -      | -   | -           | -                        | その他(推定<br>値), 推定値 | -                             | 4C                   | ×                      | -  | Yalkowsky SH, He Y, eds;<br>Handbook of aqueous solubility<br>data. Boca Raton, FL: CRC<br>Press p. 48 (2003). | ENVIRONMENTAL FATE<br>& EXPOSURE: > SOIL<br>ADSORPTION/MOBILITY: |
| 3 Franco    | Koc | 18.7L/kg[2C以<br>下の値を用いて<br>推定(4)] | 18.7<br>(非解離種)<br>37.4<br>(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<br>温度 | pH | 試験方法等 | GLP | reliability | 情報源における<br>キースタディの<br>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<br>_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<br>キースタディの<br>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 <sub>2</sub> consumption |       | OECD TG 301C | yes | -           | key study        | -    |         | -  | MITI, Japan . | p.222; SIDS Dossier p.249 |