

(案)

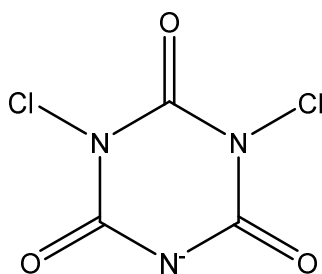
優先評価化学物質のリスク評価（一次）

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.....	3
4	1-1 評価対象物質の設定.....	3
5	1-2 物理化学的性状及び濃縮性.....	5
6	1-3 分解性.....	11
7	2 【付属資料】.....	12
8	2-1 物理化学的性状等一覧.....	12
9	2-2 その他.....	14
10		
11		

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 評価対象物質の設定

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 (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、環境中での分解等を考慮し、評価対象物質の設定を行った。

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, 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。) に変化すると考えられる¹。水溶液中での反応式を図 1-1 に示す。

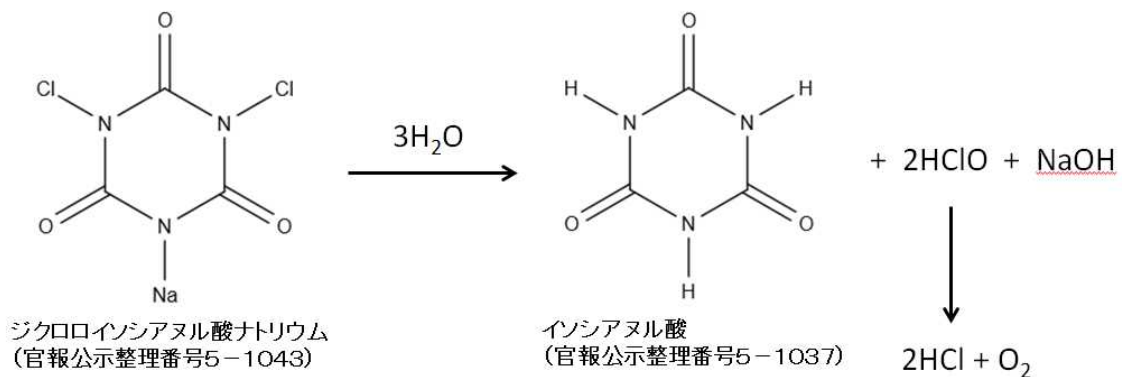


図 1-1 優先評価化学物質の水溶液中での反応式

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。

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。

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
 5 ジ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
 6 用いるが、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
 7 代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
 9 デ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 1-2 物理化学的性状及び濃縮性

2 1-2-1 ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム

3 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
4 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。

5
6 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	170,000 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⁾

7 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
8 成 29 年 9 月 11 日)で了承された値

9 2) HSDB

10 3) EPI Suite(2012)

11 4) ECHA

12 5) MHLW, METI, MOE (2014)

13 6) 評価 においては解離定数は考慮しない

14 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。

15
16 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

17
18 融点

19 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
20 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 .
21 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。)
22 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
23 (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
24 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
10 た情報源である 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
5 ロロイソシアヌル酸」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
6 れた値である。

9 表 1 - 3 分解に係るデータのまとめ(親化合物(NPE))

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。

21 上記性状項目について、精査概要を以下に示す。

22 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
6 る。

7
8 表 1-4 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⁾
		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⁾
		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

9 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
10 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。

11 2) EPI Suite(2012)

12 3) MITI(1975)

13 NA:情報が得られなかったことを示す。

14

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 Aldrich: Sigma-Aldrich 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>,
10 (2017-6-13 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.

15 <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ナ
19 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ナ
22 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. 試験番号
23 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生
- 10 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生
- 12 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)の物理化学性状の測
- 16 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-オクタノールと
- 18 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。

情報源略称	詳細等
CCD	Hawley's Condensed Chemical Dictionary, 15th, John Wiley & Sons, 2007
CRC	CRC Handbook of Chemistry and Physics on DVD, Version 2013, CRC-Press
ECHA	Information on Chemicals – Registered substances.
EPI Suite	U.S.EPA EPI Suite
HSDB	Hazardous Substances Data Bank (HSDB)
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	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	2893-78-9

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1	EPI Suite	融点	276 °C	276	MPBPWIN	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 September 2008	2C	×	-		-
2		融点	276.00 °C	276	MPBPWIN	-	-	(Q)SAR	Weighted Value	2C	×	-			
3	HSDB	融点	230~250 °C	240	-	-	-	-	-	2B	○	○	-	Lewis, R.J. Sr. (ed) Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials. 11th Edition. Wiley-Interscience, Wiley & Sons, Inc. Hoboken, N.J. 2004. p. 3244	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: >MELTING POINT:
4		融点	2400 °C	2400						4A	×				p.10
5		融点	240 °C	240						4A	×				p.10
6		融点	240~250 °C	245						4A	×				p.10
7	ECHA	分解点	252 °C	252	EU Method A.1	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result	1A	×		study report, 2007		Exp Key Melting point/freezing point.001
8	既存点検事業	融点	[測定不可 (240~250°Cで分解)]	単位換算不可	-	-	-	-	-	3	×		-	日産化学工業株式会社添付資料.	K0748
9		分解点	240~250 °C [測定不可 (240~250°Cで分解)]	245						4A	×		-	日産化学工業株式会社添付資料	

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	ナトリウム=3, 5-ジクロロ-2, 4, 6-トリオキソ-1, 3, 5-トリアジナシ-1-イド (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	2893-78-9

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	635.72 °C	635.72	635.72	1 atm	MPBPWIN	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 September 2008	2C	○	○	-	-	-
2	635.72 °C	635.72			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method	2C	○	○			
3 ECHA	[Data waiving other justification]	単位換算不 可									3	×				NS NS Boiling point.001

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	2893-78-9

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	4.6E-15 mmHg	6.13E-13	6.13E-13	20 °C	MPBPWIN	-	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 September 2008	2C	○	○	-	-
2	0.0000000 0000174 Pa[2C以下 の値を用い て推定 (4)]	1.74E-12	1.74E-12	20 °C					(Q)SAR		4C	×				
3 PhysProp	1.46E-14 mmHg	1.95E-12	1.38E-12	25 °C	-	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	×		-	NEELY,WB & BLAU,GE (1985).	
4	1.46E-14 mmHg	1.95E-12	1.38E-12	25 °C					estimated by calculation		4C	×		-	NEELY,WB & BLAU,GE (1985)	Vapor Pressure:
5 ECHA	<0.006 Pa	0.006	0.006	20 °C	その他 gas saturation method	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		4A	○	○		study report, 1991	Exp Key Vapour pressure.001

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	2893-78-9

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
3 HSDB	227 g/L	227000	211905.961	25 °C								2B	×	×		Ashford, R.D. Ashford's Dictionary of Industrial Chemicals. London, England: Wavelength Publications Ltd., 1994., p. 810.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
4 HSDB	170000 mg/L	170000	170000	20 °C								2B	×	○		Wojtowicz J; Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. (2005). NY, NY: John Wiley & Sons; Cyanuric and Isocyanuric Acids. Online Posting Date: June 18, 2004.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
5	30 g/100 g	300000	280051.931	25 °C								2B	×	×		Ura Y, Sakata G; Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 7th ed. (2005). NY, NY: John Wiley & Sons; Chloroamines. Online Posting Date: June 15, 2000.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
6	227 g/L	227000	211905.961	25 °C								2B	×	×		Ashford, R.D. Ashford's Dictionary of Industrial Chemicals. London, England: Wavelength Publications Ltd., 1994., p. 810.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
7	1.7E+5 mg/L	170000	170000	20 °C								2B	×	×		Wojtowicz J; Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. (2005). NY, NY: John Wiley & Sons; Cyanuric and Isocyanuric Acids. Online Posting Date: June 18, 2004.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
8	30.0 g/100g	300000	280051.931	25 °C								2B	×	×		Ura Y, Sakata G; Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 7th ed. (2005). NY, NY: John Wiley & Sons; Chloroamines. Online Posting Date: June 15, 2000.	CHEMICAL/PHYSICAL PROPERTIES: > SOLUBILITIES:
15 ECHA	236.8 g/L [the mean value reported for the solubility by available chlorine titration]	236800	221054.324	25 °C		EPA OPPTS 830.7840	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	×		study report, 2008	Exp Key Water solubility.001
16	248.2 g/L [the mean value reported by the HPLC method]	248200	231696.298	25 °C		EPA OPPTS 830.7840	yes	1: reliable without restriction	key study	experimental result		1A	○	×		study report, 2008	Exp Key Water solubility.001
17 既存点検事業	≥ 100 g/L	100000	96590.0332	20~25 °C		OECD TG 105	-	-	-	experimental result		1B	○	×			K0748
18	≥ 100 g/L	100000	96590.0332	20~25 °C		OECD TG 105				experimental result		1B	×	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	2893-78-9

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	-0.0556	-0.0556			KOWWIN	-	-	key study	(Q)SAR	KOWWIN v1.67a Sept 2008	2C	○	○	-		-
2 EPI Suite	-0.0556	-0.0556			KOWWIN				(Q)SAR		2C	○	○			
3 PhysProp	-0.06	-0.06			-	-	-	-	estimated by calculation	-	4C	×	×	-	MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1995).	-
4	-0.06	-0.06							estimated by calculation		4C	×	×		MEYLAN,WM & HOWARD,PH (1995)	Log P (octanol-water):
5 ECHA	-0.0556	-0.0556			KOWWIN	no data	2: reliable with restriction s	supporting study	(Q)SAR	KOWWIN v1.67	4C	×	×		study report, 2007	QSAR Supporting Partition coefficient.002

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	2893-78-9

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	7.438 L/kg	7.438			-	KOCWIN	-	-	key study	(Q)SAR	KOCWIN v2.00 February 2009	2C	○	×	-		-
2 EPI Suite	Koc	7.48 L/kg[2C以 下の値を用い て推定 (4)]	7.48								(Q)SAR		4C	○	○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	2893-78-9

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa・m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	0.000000216 Pa・ m ³ /mol	0.000000216			-	key study	(Q)SAR	HENRYWIN v3.20 October 2008	2C	○	×	-		-
2	2.16E-007 Pa・ m ³ /mol	0.000000216					その他, Experimental Data from PhysProp Database		4A	×	×			
3 EPI Suite	3.14E-007 Pa・ m ³ /mol	0.000000314					(Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	○	○			
4 PhysProp	0.00000000000031 atm・m ³ /mol	3.14108E-07			-	-	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	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	2893-78-9

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
EPI Suite		1					3.162 L/kg (wet)[2C以 下の値を用 いて推定 (4)]	3.162					(Q)SAR		4C	○	○			

参考情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	2893-78-9

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	(イソシアヌル酸)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		-		K0748
2		0%	Test mat. analysis	(イソシアヌル酸)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		-		K0748
3		0%	Test mat. analysis	(イソシアヌル酸)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		-		K0748
4		0%	Test mat. analysis	(イソシアヌル酸)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		-		K0748
5		0%	O_2 consumption	(イソシアヌル酸)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		-		K0748
6		0%	O_2 consumption	(イソシアヌル酸)	化審法TG	yes (incl. certificate)	-	-	experimental result		-		K0748

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	51580-86-0

融点

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [°C]	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 Aldrich	融点	240~250 °C	245	-	-	-	-	-		2B	○	○	-		Product Number: 35915
2 EPI Suite	融点	276 °C	276	MPBPWIN	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 September 2008	2C	×	×	-		-
3	融点	276.00 °C	276	MPBPWIN				(Q)SAR	Weighted Value	2C	×	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	51580-86-0

沸点

収集データ

情報源名	沸点	統一表記 [°C]	101.325 kPa における沸 点[°C]	測定条件 圧力	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	635.72 °C	635.72	635.72	1 atm	MPBPWIN	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 September 2008	2C	○	○	-		-
2	635.72 °C	635.72			MPBPWIN				(Q)SAR	Adapted Stein and Brown Method	2C	○	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	51580-86-0

蒸気圧

収集データ

情報源名	蒸気圧	統一表記 [Pa]	20°Cにおける蒸気圧 [Pa]	測定条件 温度	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディの 該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価 I)	キースタ ディ-該非 (評価 I)	キースタ ディ-該非 (評価 II)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	4.6E-15 mmHg	6.13E-13	6.13E-13	20 °C	MPBPWIN	-	-	key study	(Q)SAR	MPBPWIN v1.43 September 2008	2C	○	○	-		
2	0.0000000 0000151 Pa]2C以下 の値を用い て推定 (4) 1	1.51E-12	1.51E-12	20 °C					(Q)SAR		4C	○	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	51580-86-0

水溶解度

収集データ

情報源名	水溶解度	統一表記 [mg/L]	20°Cにおける 水溶解度 [mg/L]	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	38420 mg/L	38420	35865.3173	25 °C		WSKOWWIN	-	-	key study	(Q)SAR	WSKOWWIN v1.41a September 2008	2C	○	○			
2	2366 mg/L[2C以 下の値を用 いて推定 (4)]	2366	2208.67623	25 °C						(Q)SAR		4C	○	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	51580-86-0

logPow

収集データ

情報源名	値	統一表記	測定条件 温度	pH	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	-0.0556	-0.0556			KOWWIN	-	-	key study	(Q)SAR	KOWWIN v1.67a Sept 2008	2C	○	○	-		-
2	-0.0556	-0.0556			KOWWIN				(Q)SAR		2C	○	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	51580-86-0

Koc

収集データ

情報源名	項目	値	統一表記 [L/kg]	測定条件 温度	pH	土壌条件	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	Koc	7.438 L/kg	7.438			-	KOCWIN	-	-	key study	(Q)SAR	KOCWIN v2.00 February 2009	2C	○	○	-		-
2	Koc	7.48 L/kg[2C以 下の値を用い て推定 (4)]	7.48								(Q)SAR		4C	○	×			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	51580-86-0

ヘンリー係数

収集データ

情報源名	ヘンリー係数	統一表記 [Pa·m ³ /mol]	測定条件 温度	pH	reliability	情報源における キースタディ の該非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite	0.000000216 Pa· m ³ /mol	0.000000216			-	key study	(Q)SAR	HENRYWIN v3.20 October 2008	2C	○	×			
2	2.16E-007 Pa· m ³ /mol	0.000000216					その他, Experimental Data from PhysProp Database		4A	×	×			
3 EPI Suite	3.14E-007 Pa· m ³ /mol	0.000000314					(Q)SAR	Bond Estimation Method	2C	○	○			

基本情報

優先評価化学物質通し番号	159
物質名称	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 (別名ジクロロイソシアヌル酸ナトリウム)
CAS番号	51580-86-0

蓄積性

収集データ

情報源名	判定	濃度区 番号	被験物質 設定濃度	暴露期間	項目	項目の種類	値	統一表記 [L/kg]	試験方法等	GLP	reliability	情報源におけ るキースタディ の是非	値の種類	値の種類の詳細	信頼性ラ ンク (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅰ)	キースタ ディ-該非 (評価Ⅱ)	備考	文献	ページ番号等
1 EPI Suite		1					3.162 L/kg (wet)(2C以 下の値を用 いて推定 (4))	3.162					(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	experimental 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	-	-	-	experimental 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 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 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