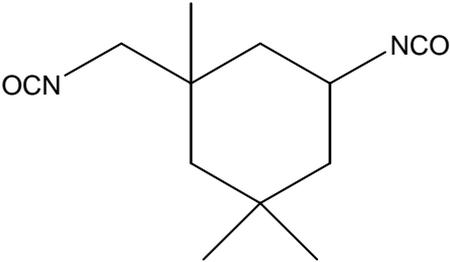


化学物質安全性(ハザード)評価シート

整理番号	2000 - 58	官報公示 整理番号	3 - 2492(化審法) 1 - 27(化学物質管理促進法)	CAS 番号	4098 - 71 - 9
名 称	3-イソシアナトメチル- 3,5,5-トリメチルシクロヘキ シルイソシアネート		構 造 式		
分子式	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₂		分子 量	222.29	
市場で流通している商品(代表例) ¹⁾ 純 度 : 99%以上 不純物 : 不明 添加剤または安定剤 : 不明					
1. 物理・化学的性状データ 外 観 : 無色液体 ²⁾ 融 点 : -60 ²⁾ 沸 点 : 158 (10 mmHg) ²⁾ 引 火 点 : 155 (c.c.) ^{3, 4)} 発 火 点 : 430 ²⁾ 爆発限界 : 文献なし。 比 重 : 1.062 g/mL(20 ²⁾) 蒸気密度 : 7.66(空気 = 1) ²⁾ 蒸 気 圧 : 0.04 Pa(3 × 10 ⁻⁴ mmHg)(20 ²⁾) 分配係数 : log Pow ; 4.75(計算値) ⁵⁾ 加水分解性 : 水と反応して、発熱を伴いイソシアン酸塩と二酸化炭素を生じる 解離定数 : 解離基なし スペクトル : 主要マススペクトルフラグメント m/z 123(基準ピーク, 1.0)、110(0.88)、81(0.38) ⁶⁾ 吸脱着性 : 文献なし 粒度分布 : 該当せず 溶解性 : エーテル、ケトン、エステル、芳香族炭化水素、脂肪族炭化水素に可溶 ²⁾ 換算係数 : 1 ppm = 9.25 mg/m ³ (気体, 20 ²⁾) 1 mg/m ³ = 0.108 ppm					

2. 発生源・暴露レベル

製造量等：平成 10 年度 1,595 t (製造 0 t 輸入 1,595 t)⁸⁾

放出・暴露量：文献なし

用 途：ポリウレタン原料、接着剤、表面処理剤¹⁾

3. 環境運命

1) 分解性

好氣的

家庭下水を用いた OECD テストガイドライン 301E による 28 日間の好気性分解で 62% 分解されたとの報告がある³⁾。

嫌氣的

報告なし。

非生物的

OH ラジカルとの反応性

対流圏大気中では、速度定数 = 8.82×10^{-12} cm³/分子・sec で⁸⁾、OH ラジカル濃度を $5 \times 10^5 \sim 1 \times 10^6$ 分子/cm³ とした時の半減期は 1 ~ 2 日と計算される。

2) 濃縮性

報告なし。

3) 環境分布・モニタリングデータ

報告なし。

4. 生態毒性データ

分類	生物名	LC ₅₀ (mg/L) (暴露時間)	EC ₅₀ (mg/L) (暴露時間)：影響指標	毒性区分 ^{*9)}
藻類	<i>Scenedesmus subspicatus</i> ³⁾ (セネデスマス)		118.7(72-h)：増殖障害	分類基準外
甲殻類	<i>Daphnia magna</i> ³⁾ (オオミジンコ)		83.7(24-h)：遊泳障害	急性カテゴリー3に相当(暴露時間が異なる)
魚類	<i>Leuciscus idus</i> ³⁾ (ウグイ)	1.8(48-h)		<推奨生物種以外>

*：OECD 分類基準に基づく区分

5. ほ乳動物毒性データ

1) 急性毒性^{2, 10, 11, 12)}

	マウス	ラット	ウサギ
経口 LD ₅₀	>2,645 mg/kg	1,000-5,490 mg/kg	-
吸入 LC ₅₀	-	81.1-314.6 ppm(4h)	-
経皮 LD ₅₀	-	>7,000 mg/kg	1,060-4,780 mg/kg
腹腔内 LD ₅₀	-	222 mg/kg	-

	ネコ	モルモット
経口 LD ₅₀	>1,058 mg/kg	-
吸入 LC ₅₀	-	142.8 ppm(1h)
経皮 LD ₅₀	-	-

ラットに経口投与した実験で(用量不明)、自発運動低下、下痢、立毛、振戦、肺及び腹腔内のうっ血がみられている⁹⁾。また、ラットに腹腔内投与した実験で(用量不明)、呼吸困難、振戦、肺及び腹腔内のうっ血がみられている。

ラットを 4 時間吸入暴露した実験で(暴露濃度不明)、鎮静、呼吸困難、鼻部痂皮形成、伏臥位、立毛、強直、削瘦、気管及び気管支内滲出液がみられている¹⁰⁾。

ラットに経皮投与した実験で(用量不明)、鎮静、運動失調、体重減少、投与部位の刺激性、痂皮形成、癒痕形成、消化管粘膜の充血、腎臓の退色及び暗色点がみられている¹⁰⁾。

2) 刺激性・腐食性

ウサギの眼と皮膚に適用した実験で、中等度の刺激性を示す^{2, 10, 13)}。

ウサギの眼に 0.5 mL 適用した実験で、刺激性を、皮膚に 0.5 mL 適用した実験で腐食性を示す¹⁰⁾。

ウサギの眼に 0.05 mL 適用した実験で、強度の結膜、強膜、角膜の障害がみられ、耳介内部に 0.5 mL 適用した実験で、高度の発赤と腫脹がみられている¹⁴⁾。

3) 感作性

雌の B6C3F₁ マウスの皮膚に適用した実験で、感作性を示す^{2, 13, 14)}。

モルモットを用いた Buehler 法及び Maximization 法で感作性を示す¹⁰⁾。

4) 反復投与毒性

(1) 吸入暴露

Wistar ラットを 0.0028、0.0093、0.039、0.37 ppm(0.25、0.84、3.57、33 mg/m³)に 4 時間/日×5 日/週×28 日間暴露した実験では、0.37 ppm で暴露開始 4-10 日後に、0.039 ppm で暴露開始 8 日後に死亡がみられている¹⁰⁾。

Wistar ラットを 0.0028、0.0071、0.015 ppm(0.25、0.64、1.37 mg/m³)に 4 時間/日×5 日/週×4 週間暴露した実験では、0.015 ppm で体重増加抑制、肺水腫がみられている¹⁰⁾。

5) 変異原性・遺伝毒性

試験方法		試験条件	結果*
<i>in vitro</i>	復帰突然変異試験	ネズミチフス菌 TA98、TA100、TA1535、 TA1537、TA1538、S9(+/-)、10-5,000 µg/plate ¹⁰⁾	-
		ネズミチフス菌 TA97、TA98、TA100、 TA1535、TA1537、S9(+/-)、0.3-33 µg/plate ¹⁰⁾	-

* - : 陰性 + : 陽性

6) 発がん性

報告なし。

7) 生殖・発生毒性

報告なし。

6. ヒトへの影響

1) 急性影響

ボランティアにエアロゾルを 1-5 分間暴露した実験で、0.25 mg/m³ から臭いを感知し、0.64 mg/m³ で眼の粘膜にわずかな刺激性を感じ、1.37 mg/m³ で眼と気道への強い刺激性に耐えられなくなったと報告されている¹⁰⁾。

本物質はアレルギー性皮膚炎を引き起こすことが示されており、4 名に行ったパッチテストで強い陽性がみられている^{2, 10, 13)}。

50 歳の塗装工が、本物質を含有する塗料を使い始めてすぐに重症の喘息を起こしている^{2, 10, 13)}。また、車の塗装工が本物質を含有する塗料を使い始めてすぐに胸の痛みと呼吸困難をおこしている^{2, 10, 13)}。

本物質に 1 時間暴露された労働者 4 名のうち 3 名に湿疹がみられている。これらの 4 名のうち本物質を過去に扱った経験のあるのは 1 名のみで、他はトルエンジイソシアネート、メチレンビスフェニルイソシアネートを過去に扱っていることから、交差感作性が示唆されている^{2, 10, 13)}。

イソホロンジアミンにアレルギー反応を示す労働者 2 名とイソホロンジアミンで感作したボランティア 2 名に本物質のパッチテストを行ったところ、4 名とも強い陽性を示しており、本物質とイソホロンジアミンとの交差感作性がみられている¹⁰⁾。

2) 慢性影響

報告なし。

3) 発がん性^{15, 16, 17)}

機 関	分 類	基 準
EPA	-	2000年現在発がん性について評価されていない。
EU	-	2000年現在発がん性について評価されていない。
NTP	/	2000年現在発がん性について評価されていない。
IARC	-	2000年現在発がん性について評価されていない。
ACGIH	-	2000年現在発がん性について評価されていない。
日本産業衛生学会	-	2000年現在発がん性について評価されていない。

ヒトでの発がん性に関する報告はない。

4) 許容濃度^{16, 17)}

機関名	許容濃度	経皮吸収性
ACGIH(2000年)	0.005 ppm(0.045 mg/m ³)	-
日本産業衛生学会(2000年)	記載なし	-

7. 生体内運命

報告なし。

8. 分 類(OECD 分類基準)

区 分	分 類 ^{*9)}
急性毒性	カテゴリー1(吸入のデータによる)
水圏生態毒性	急性カテゴリー3(甲殻類のデータによる)

* 本調査範囲内のデータを適用した場合の分類であり、最終的なものではない。

急性毒性分類：OECDの急性毒性分類カテゴリーに基づき、より強い毒性を示す経路での値を用いて分類

水圏生態毒性分類：OECDの急性毒性分類カテゴリーに基づき、最も強い毒性を示す水圏環境生物種での値を用いて分類

9. 総合評価

1) 危険有害性の要約

ヒトへの影響として眼や気道への強い刺激性及びアレルギー性皮膚炎の報告がある。また、職業暴露において喘息、胸の痛み、呼吸障害がみられており、動物実験においても呼吸困難などの呼吸器症状や刺激性、皮膚感作性が報告されている。変異原性に関しては陰性と報告されているが、報告例数も少なく、発がん性、生殖・発生毒性、生体内運命などに関しては報告例が無く、有害性に関する情報は充分とはいえない。

本物質は環境中に放出された場合、水圏では一部分が生分解される。大気中では OH ラジカルの反応が関与しており、半減期は数日間と計算される。環境省のモニタリングデータはない。

2) 指摘事項

- (1) 眼や皮膚に対する強い刺激性、皮膚感作性を有する。
- (2) 吸入により喘息などの呼吸器障害を起こす。
- (3) 有害性に関する情報が十分とはいえない。
- (4) 化学物質管理促進法の第一種指定化学物質に指定されており、排出量の管理が必要である。

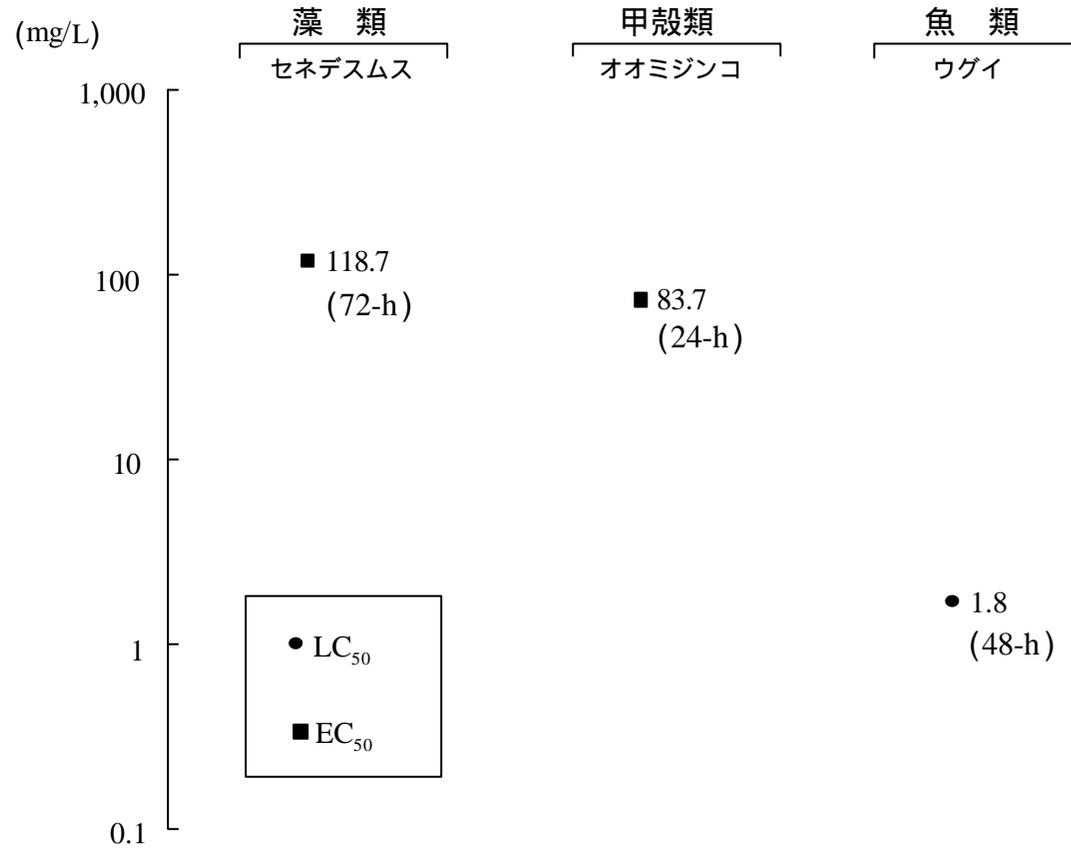
参考資料

- 1) (社)日本化学工業協会調査資料(2001).
- 2) Hazardous Substances Data Bank(HSDB), U.S. National Library of Medicine(1998).
- 3) IUCLID(International Uniform Chemical Information Data Base)Data Set, EU(2000).
- 4) IPCS, International Chemical Safety Cards(1989).
- 5) KowWin(Syracuse Research Corporation).
- 6) NIST Library of 54K Compounds.
- 7) 平成 10 年度 既存化学物質の製造・輸入に関する実態調査, 通商産業省(1999).
- 8) AOPWIN ver 1.86(Syracuse Research Corporation).
- 9) OECD, Harmonised Integrated Classification System for Human Health and Environmental Hazards of Chemical Substances and Mixtures, OECD Series on Testing and Assessment No. 33(2001).
- 10) IUCLID(International Uniform Chemical Information Data Base)Data Sheet, EU(1995).
- 11) Sharat Gangolli, The Dictionary of Substances and their Effects, 2nd. Ed., The Royal Society of Chemistry(1999).
- 12) Registry of Toxic Effects of Chemical Substances(RTECS), US NIOSH(1998).
- 13) ACGIH, Documentation of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices (1991).
- 14) 後藤稔, 池田正之, 原一郎編, 産業中毒便覧・増補版, 医歯薬出版(1994).
- 15) JETOC, 発がん性物質の分類とその基準, 発がん性評価物質一覧表, 第 4 版(1999).
- 16) ACGIH, Booklet of the Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices(2000).
- 17) 許容濃度等の勧告, 産業衛生学雑誌, 42, 130-154(2000).

別添資料

- 1) 生態毒性図

生態毒性図



引用文献

1) IUCLID (International Uniform Chemical Information Data Base) Data Set, EU (2000).