

化学物質安全性(ハザード)評価シート(要約版)

整理番号	2000 - 50	官報公示 整理番号	2 - 2863(化審法) 1 - 293(化学物質管理促進法)	CAS 番号	822 - 06 - 0
名 称	ヘキサメチレンジイソシアナート 別名：1,6-ジイソシアナートヘキササン		構 造 式	OCN-(CH ₂) ₆ -NCO	
分子式	C ₈ H ₁₂ N ₂ O ₂		分子 量	168.19	
市場で流通している商品(代表例) ¹⁾ 純 度 : 98%以上 不純物 : ヘキサメチレンジアミン 添加剤または安定剤 : 無添加					
物理・化学的性状データ 外 観 : 無色液体 ²⁾ 融 点 : -67 ²⁾ 沸 点 : 255 ²⁾ 引 火 点 : 140 (o.c.) ²⁾ 発 火 点 : 454 ²⁾ 爆発限界 : 0.9 ~ 9.5% ²⁾ 比 重 : d ₄ ²⁵ 1.05 ³⁾ 蒸気密度 : 5.80(空気 = 1) 蒸 気 圧 : 7.0 Pa(5.25 mmHg)(25 ²⁾) 分配係数 : log Pow ; -0.32(計算値) ⁴⁾ 加水分解性 : 水中で加水分解を受け、アミン、ポリ尿素を生じる ²⁾ 解離定数 : 文献なし スペクトル : 主要マススペクトルフラグメント m/z 56(基準ピーク, 1.0)、85(0.34)、99(0.23) ⁵⁾ 吸脱着性 : 文献なし ⁶⁾ 粒度分布 : 該当せず 溶解性 : ヘキサメチレンジイソシアナート/水 ; 水と反応して分解する ²⁾ トルエン、アセトニトリル、モノクロロベンゼンなどの有機溶媒に可溶 ⁷⁾ 換算係数 : 1 ppm = 6.99 mg/m ³ (気体, 20 ²⁾) 1 mg/m ³ = 0.143 ppm					

総合評価

1) 危険有害性の要約

本物質は他のイソシアナート化合物と同様に刺激性が強く、また、生体内では血清中のアルブミンと結合し、ハプテンとなり、アレルギー性の喘息、過敏性肺炎、接触性過敏症などの症状を局所的に誘発する。そのため、本物質によるヒトへの影響としては、眼、皮膚及び呼吸器への刺激性、感作性のほか、喘息、呼吸困難などの症状が数多く報告されている。また、本物質によるコリンエステラーゼ活性の阻害も報告されている。実験動物においてもヒトと同様に眼、皮膚及び粘膜への刺激、呼吸器への影響が報告されている。変異原性・遺伝毒性では、復帰突然変異試験で陰性の報告があるが、報告例が少なく、結論できない。発がん性試験では腫瘍の発生はみられていない。生殖・発生毒性に関する報告はない。

本物質は環境中に放出された場合、水圏では分解されやすい。大気中ではOHラジカルの反応が関与しており、半減期は数日と計算される。環境省のモニタリングデータはない。水圏環境生物に対する急性毒性についてはデータがない。

2) 指摘事項

- (1) ヒトの眼、皮膚及び呼吸器に対し刺激性を有し、本物質の反応性から生体内でハプテンとなり、アレルギー性の喘息、過敏性肺炎、接触過敏症などの症状を誘発する。
- (2) 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) IPCS, International Chemical Safety Cards(1989).
- 3) Sharat Gangolli, The Dictionary of Substances and their Effects, 2nd. Ed., The Royal Society of Chemistry(1999).
- 4) Kow Win, Syracuse Research Corporation.
- 5) NIST Library of 54K Compounds.
- 6) Hazardous Substances Data Bank(HSDB), U.S. National Library of Medicine(1998).
- 7) BUA Report, **112**(1993).