

## 化学物質安全性(ハザード)評価シート(要約版)

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 <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>		分子 量	222.29	
市場で流通している商品(代表例) <sup>1)</sup> 純 度 : 99%以上 不純物 : 不明 添加剤または安定剤 : 不明					
物理・化学的性状データ 外 観 : 無色液体 <sup>2)</sup> 融 点 : -60 <sup>2)</sup> 沸 点 : 158 (10 mmHg) <sup>2)</sup> 引 火 点 : 155 (c.c.) <sup>3, 4)</sup> 発 火 点 : 430 <sup>2)</sup> 爆発限界 : 文献なし。 比 重 : 1.062 g/mL(20 <sup>2)</sup> ) 蒸気密度 : 7.66(空気 = 1) <sup>2)</sup> 蒸 気 圧 : 0.04 Pa(3 × 10 <sup>-4</sup> mmHg)(20 <sup>2)</sup> ) 分配係数 : log Pow ; 4.75(計算値) <sup>5)</sup> 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) <sup>6)</sup> 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 <sup>2)</sup> 換算係数 : 1 ppm = 9.25 mg/m <sup>3</sup> (気体, 20 <sup>2)</sup> ) 1 mg/m <sup>3</sup> = 0.108 ppm					

## 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.