

安全データシート

2-n-オクチル-4-イソチアゾリン-3-オン

改訂日: 2024-05-09 版番号: 1

1. 化学品及び会社情報

製品識別子

製品名	: 2-n-オクチル-4-イソチアゾリン-3-オン
CB番号	: CB3221648
CAS	: 26530-20-1
同義語	: 2-n-オクチル-4-イソチアゾリン-3-オン, イソチアゾリン

物質または混合物の関連する特定された用途、および推奨されない用途

関連する特定用途	: 殺カビ剤。冷却塔水、絵の具、切削油、化粧品、およびシャンプーの殺菌剤。革製品保存剤。
推奨されない用途	: なし

会社ID

会社名	: Chemicalbook
住所	: 北京市海淀区上地十街匯煌國際1号棟
電話	: 010-86108875

2. 危険有害性の要約

GHS分類

分類実施日

H24.3.1、政府向けGHS分類ガイダンス(H22.7月版)を使用

環境に対する有害性はGHS改訂4版を使用

健康に対する有害性

急性毒性(経口) 区分4

急性毒性(経皮) 区分3

急性毒性(吸入:粉じん及びミスト) 区分3

皮膚腐食性/刺激性 区分1

眼に対する重篤な損傷/眼刺激性 区分1

皮膚感作性 区分1A

特定標的臓器毒性(単回ばく露) 区分1(中枢神経系、呼吸器系)

特定標的臓器毒性(反復ばく露) 区分1(気道)

環境に対する有害性

水生環境有害性(急性) 区分1

水生環境有害性(長期間) 区分1

ラベル要素

絵表示又はシンボル

GHS05	GHS06	GHS09
-------	-------	-------

注意喚起語

危険

危険有害性情報

飲み込んだり皮膚に接触すると有毒

吸入すると生命に危険

長期継続的影響により水生生物に非常に強い毒性

水生生物に非常に強い毒性

吸器系

長期にわたる、または反復暴露による臓器の障害：呼

臓器の障害：呼吸器系 中枢神経系

アレルギー性皮膚反応を起こすおそれ

重篤な皮膚の薬傷・眼の損傷

注意書き

【安全対策】

粉じん、煙、ミスト、蒸気、スプレーを吸入しないこと。

屋外または換気の良い場所でのみ使用すること。

環境への放出を避けること。

この製品を使用する時に、飲食または喫煙をしないこと。

汚染された作業衣は作業場から出さないこと。

取扱い後は手や顔をよく洗うこと。

保護手袋、保護衣、保護面を着用すること。

【応急措置】

飲み込んだ場合：口をすぐのこと。無理に吐かせないこと。直ちに医師に連絡すること。

皮膚(または髪)に付着した場合：直ちに、汚染された衣類をすべて脱ぐこと。

皮膚を流水、シャワーで洗うこと。直ちに医師に連絡すること。汚染された衣類を再使用する場合には洗濯すること。

吸入した場合：空気の新鮮な場所に移し、呼吸しやすい姿勢で休息させること。直ちに医師に連絡すること。

眼に入った場合：水で数分間注意深く洗うこと。コンタクトレンズを着用して容易に外せる場合は外すこと。その後も洗浄を続けること。直ちに医師に連絡すること。

暴露または暴露の懸念がある場合：医師に連絡すること。

漏出物を回収すること。

【保管】

容器を密閉して換気の良いところで保管すること。

施錠して保管すること。

【廃棄】

内容物や容器を、都道府県知事の許可を受けた専門の廃棄物処理業者に委託す
Chemical Book

ること。

3. 組成及び成分情報

化学物質 / 混合物の區別:	: 化学物質
化学名又は一般名:	: 2-n-オクチル-4-イソチアゾリン-3-オン
濃度又は濃度範囲:	: >98.0%(GC)
CAS RN:	: 26530-20-1
別名	: Octhilinone
化学式:	: C11H19NOS
官報公示整理番号 化審法:	: (5)-5246
官報公示整理番号 安衛法:	: 公表化学物質

4. 応急措置

吸入した場合:

に医師に連絡すること。

被災者を空気の新鮮な場所に移し、呼吸しやすい姿勢で休息させること。直ち

皮膚に付着した場合:

洗うこと。直ちに医師に連絡すること。

直ちに、汚染された衣類をすべて脱ぐこと、取り除くこと。多量の水と石鹼で

目に入った場合:

て洗うこと。直ちに医師に連絡すること。

水で数分間注意深く洗うこと。コンタクトレンズを容易にはずせる場合は外し

飲み込んだ場合:

直ちに医師に連絡すること。口をすすぐこと。無理に吐かせないこと。

応急措置をする者の保護:

救助者はゴム手袋、密閉ゴーグルなどの保護具を着用する。

5. 火災時の措置

適切な消火剤:

粉末、泡、水噴霧、二酸化炭素

火災時の特定危険有害性:

燃焼や高温により分解し、有毒なヒュームを発生する恐れがあるので注意する。

特有の消火方法:

消火作業は、風上から行い、周囲の状況に応じた適切な消火方法を用いる。関係者以外は安全な場所に退去させる。周辺火災時、移動可能な容器は、速やかに安全な場所に移す。

消火を行う者の保護:

消火作業の際は、必ず保護具を着用する。

6. 漏出時の措置

人体に対する注意事項、保護具及び緊急時措置:

個人用保護具を着用する。

漏出場所の風上から作業し、風下の人を退避させる。

漏出した場所の周辺に、ロープを張るなどして関係者以外の立入りを禁止する。

環境に対する注意事項:

環境への悪影響が懸念されるため、河川等へ排出されないよう注意する。

封じ込め及び浄化の方法及び機材:

付着物、回収物などは、関係法規に基づき速やかに処分する。

粉塵の飛散に注意しながら掃き集め、密閉容器に回収する。

7. 取扱い及び保管上の注意

取扱い

技術的対策:

取扱いは換気のよい場所で行う。適切な保護具を着用する。粉塵が飛散しないように注意する。取扱い後は手や顔などをよく洗う。

注意事項:

できれば、密閉系で取扱う。粉塵やエアゾールが発生する場合には、局所排気を用いる。

安全取扱い注意事項:

皮膚、眼および衣類との接触を避ける。

保管

適切な保管条件:

容器を密栓して換気の良い冷暗所に保管する。施錠して保管する。酸化剤などの混触危険物質から離して保管する。

安全な容器包装材料:

法令の定めるところに従う。

8. ばく露防止及び保護措置

設備対策:

密閉化した設備又は局所排気装置を設ける。取扱い場所の近くに洗眼及び身体洗浄用の設備を設ける。

管理濃度:

設定されていない。

保護具

呼吸用保護具:

防塵・防毒マスク、自給式呼吸器、送気マスク等。

手の保護具:

不浸透性の手袋。

眼、顔面の保護具:

保護眼鏡(ゴーグル型)。状況に応じ保護面。

皮膚及び身体の保護具:

不浸透性の保護衣。状況に応じ、保護長靴。

9. 物理的及び化学的性質

Information on basic physicochemical properties

形状	液体(Merck (14th, 2006))
色	淡い黃金色(PM (14th, 2006))
臭い	鋭い臭い(PM (14th, 2006))
臭いのしきい(閾)値	データなし。
pH	データなし。
メタノール、トルエン: >800g/L, エチルアセトン: >900g/L, ヘキサン: 64 g/L(PM (14th, 2006))	
2.45(24°C)(PM (14th, 2006))	
データなし。	
データなし。	
データなし。	
水:0.05% (25°C)(PM (14th, 2006))	
0.83(Gangolli(2nd.1999))	
データなし。	
0.0000271mmHg(25°C)(Howard (1997))	
データなし。	
データなし。	
データなし。	
データなし。	
120°C(0.01mmHg)(Merck (14th, 2006))	
<25°C(SRC PhysProp)	

融点・凝固点

<25°C(SRC PhysProp)

沸点、初留点及び沸騰範囲

120°C(0.01mmHg)(Merck (14th, 2006))

引火点

データなし。

蒸発速度(酢酸ブチル=1)

データなし。

燃焼性(固体、気体)

データなし。

燃焼又は爆発範囲

データなし。

蒸気圧

0.0000271mmHg(25°C)(Howard (1997))

蒸気密度

データなし。

比重(相対密度)

0.83(Gangolli(2nd.1999))

溶解度

メタノール、トルエン: >800g/L, エチルアセトン: >900g/L, ヘキサン: 64 g/L(PM (14th, 2006))

水:0.05% (25°C)(PM (14th, 2006))

n-オクタノール/水分配係数

2.45(24°C)(PM (14th, 2006))

自然発火温度

データなし。

分解温度

データなし。

粘度(粘性率)

データなし。

10. 安定性及び反応性

反応性:

情報なし

化学的安定性:

適切な条件下においては安定。

危険有害反応可能性:

特別な反応性は報告されていない。

避けるべき条件:

情報なし

混触危険物質:

酸化剤

危険有害な分解生成物:

二酸化炭素、一酸化炭素、窒素酸化物、硫黄酸化物

11. 有害性情報

急性毒性

経口

ラットのLD50値として7件のデータ(708 mg/kg、562 mg/kg、794 mg/kg、681 mg/kg、735 mg/kg、355 mg/kg、358 mg/kg)が報告されている(DFGMAK-Doc. 16 (2001))。GHS分類:区分4 ラットのLD50値として7件のデータ(708 mg/kg、562 mg/kg、794 mg/kg、681 mg/kg、735 mg/kg、355 mg/kg、358 mg/kg)が報告され(DFGMAK-Doc. 16 (2001))、全て区分4に該当する。

経皮

ウサギのLD50値として2件のデータ(311 mg/kg、約1800 mg/kg)が報告され(DFGMAK-Doc. 16 (2001))、1件が区分4、1件が区分3に該当する。GHS分類:区分3 ウサギのLD50値として2件のデータ(311 mg/kg、約1800 mg/kg)が報告され(DFGMAK-Doc. 16 (2001))、1件が区分4、1件が区分3に該当することから、危険性の高い方の区分を採用し、区分3とした。

吸入:ガス

常温で液体である。GHS分類:分類対象外 常温で液体(liquid)(Merck (14th, 2006))である。

吸入:蒸気

データなし。GHS分類:分類できない データなし。

吸入:粉じん及びミスト

ラットのLC50値は0.586 mg/L/4h(DFGMAK-Doc. 16 (2001))である。なお、エアゾール(aerosol)にばく露と記載されている(DFGMAK-Doc. 16 (2001))のでミストの基準値を適用した。GHS分類:区分3 ラットのLC50値は0.586 mg/L/4h(DFGMAK-Doc. 16 (2001))に基づき、区分3とした。なお、エアゾール(aerosol)にばく露と記載されている(DFGMAK-Doc. 16 (2001))のでミストの基準値を適用した。

皮膚腐食性及び刺激性

ウサギの皮膚に45~50%濃度のプロピレングリコール溶液として0.5 mLを4時間適用した試験において、痂皮形成と組織損傷を伴う重度の紅斑および浮腫を生じ、刺激性スコアは最大値8.0で腐食性(corrosive)として分類されている(DFGMAK-Doc. 16 (2001))。GHS分類:区分1 ウサギの皮膚に45~50%濃度のプロピレングリコール溶液として0.5 mLを4時間適用した試験において、痂皮形成と組織損傷を伴う重度の紅斑および浮腫を生じ、刺激性スコアは最大値8.0で腐食性(corrosive)として分類された(DFGMAK-Doc. 16 (2001))ことから、区分1とした。

眼に対する重篤な損傷性又は眼刺激性

ウサギの結膜囊に45%溶液0.1 mLを適用した試験で、結膜、角膜および虹彩に重度の刺激を生じ7日以上持続し、腐食性(corrosive)として分類されている(DFGMAK-Doc. 16 (2001))。なお、本物質は皮膚に対しても腐食性物質に分類している。GHS分類:区分1 ウサギの結膜囊に45%溶液0.1 mLを適用した試験で、結膜、角膜および虹彩に重度の刺激を生じ7日以上持続し、腐食性(corrosive)として分類された(DFGMAK-Doc. 16 (2001))ことから区分1とした。なお、本物質は皮膚に対しても腐食性物質に分類している。

呼吸器感作性

データなし。GHS分類:分類できない データなし。

皮膚感作性

モルモットのマキシマイゼーション試験において、誘導段階後21日目の惹起で0.2%溶液により陽性率は25%(5/20)、0.1%溶液により35%(7/20)、35日目に0.1%溶液により40%(8/20)を示し、中等度の感作性物質と結論付けられている(DFGMAK-Doc. 16 (2001))。一方、ヒトの職業ばく露でアレルギー反応が報告され、パッチテストで陽性反応が認められた症例(DFGMAK-Doc. 16 (2001))、さらに湿疹の患者が本物質または本物質を含有する物質のパッチテストで陽性反応が認められた症例(DFGMAK-Doc. 16 (2001))なども含め複数の報告がある。さらに、Contact Dermatitis (Frosch)には皮膚感作性物質として掲載されている(Contact Dermatitis (Frosch) (4th, 2006))。以上より、ヒトで高頻度の症例報告があり、モルモットのマキシマイゼーション試験で0.1%の濃度により35~40%の動物が反応したことから、区分1Aとした。GHS分類:区分1A モルモットのマキシマイゼーション試験において、誘導段階後21日目の惹起で0.2%溶液により陽性率は25%(5/20)、0.1%溶液により35%(7/20)、35日目に0.1%溶液により40%(8/20)を示し、中等度の感作性物質と結論付けられている(DFGMAK-Doc. 16 (2001))。一方、ヒトの職業ばく露でアレルギー反応が報告され、パッチテストで陽性反応が認められた症例(DFGMAK-Doc. 16 (2001))、さらに湿疹の患者が本物質または本物質を含有する物質のパッチテストで陽性反応が認められた症例(DFGMAK-Doc. 16 (2001))なども含め複数の報告がある。

生殖細胞変異原性

ラットの骨髄を用いた染色体異常試験(体細胞in vivo変異原性試験)において、構造異常を有する染色体の発生率増加はなく、陰性であった(DFGMAK-Doc. 16 (2001))。なお、in vitro試験として、エームス試験で陰性、CHO細胞を用いた染色体異常試験で陽性、また、CHO細胞を用いたHPRT遺伝子突然変異試験で陰性がそれぞれ報告されている(DFGMAK-Doc. 16 (2001))。GHS分類:区分外 ラットの骨髄を用いた染色体異常試験(体細胞in vivo変異原性試験)において、構造異常を有する染色体の発生率増加はなく、陰性であった(DFGMAK-Doc. 16 (2001))ことから区分外とした。なお、in vitro試験として、エームス試験で陰性、CHO細胞を用いた染色体異常試験で陽性、また、CHO細胞を用いたHPRT遺伝子突然変異試験で陰性がそれぞれ報告されている(DFGMAK-Doc. 16 (2001))。

発がん性

データ不足。なお、マウスに18ヵ月間混餌投与した試験において、高濃度群の1000 ppmでリンパ肉腫、肝細胞癌、線維腺腫、肺腺腫が認められたが、それらの発生率は対照群での自然発生腫瘍のそれと変わらなかった(DFGMAK-Doc. 16 (2001))と報告されているが、その他にデータはなく分類できない。GHS分類:分類できない データ不足。なお、マウスに18ヵ月間混餌投与した試験において、高濃度群の1000 ppmでリンパ肉腫、肝細胞癌、線維腺腫、肺腺腫が認められたが、それらの発生率は対照群での自然発生腫瘍のそれと変わらなかった(DFGMAK-Doc. 16 (2001))と報告されているが、その他にデータはなく分類できない。

生殖毒性

ラットおよびウサギの器官形成期に経口投与した試験において、母動物に一般毒性として体重増加抑制がみられ、仔の発生に対しては、ラットの高用量で着床後胚損失を伴わず早期吸収が僅かに増加したことを除き、両動物種とも胎仔毒性の明確な証拠はなく、仔の発生に対する悪影響は報告されていない(DFGMAK-Doc. 16 (2001))。しかし、親動物の性機能および生殖能に対する影響についてはデータ不十分である。

GHS分類:分類できない ラットおよびウサギの器官形成期に経口投与した試験において、母動物に一般毒性として体重増加抑制がみられ、仔の発生に対しては、ラットの高用量で着床後胚損失を伴わず早期吸収が僅かに増加したことを除き、両動物種とも胎仔毒性の明確な証拠はなく、仔の発生に対する悪影響は報告されていない(DFGMAK-Doc. 16 (2001))。しかし、親動物の性機能および生殖能に対する影響についてはデータ不十分であり「分類できない」とした。

特定標的臓器毒性(単回ばく露)

ラットに経口投与した試験で、31.6 mg/kg以上で活動低下、316 mg/kg以上で運動失調、1000 mg/kg以上で正向反射の消失、別の試験では500 mg/kg以上で中枢神経系の抑制、円背位、1000 mg/kg以上で振戦、虚脱が見られた。一方、ウサギに経皮投与により291 mg/kg以上で鈍麻、運動失調、虚脱、後肢部分麻痺、また、ラットに吸入投与(ミスト)では94 mg/m³以上で運動失調、虚脱、鈍麻の中枢神経系抑制症状が報告され

ている(DFGMAK-Doc. 16 (2001))。症状がガイダンス値区分1の用量範囲でも発現している。GHS分類:区分1(中枢神経系)さらに、吸入ばく露試験では58 mg/m³/4h(ミスト)以上で、呼吸困難、徐呼吸、および呼吸音が観察され、肉眼病理学的検査により、背景対照と比べ有意差が示された唯一の所見は、229~671 mg/m³/4hでの肺の変化であった(DFGMAK-Doc. 16 (2001))とも記述されている。GHS分類:区分1(呼吸器系) ラットに経口投与した試験で、31.6 mg/kg以上で活動低下、316 mg/kg以上で運動失調、1000 mg/kg以上で正向反射の消失、別の試験では500 mg/kg以上で中枢神経系の抑制、円背位、1000 mg/kg以上で振戦、虚脱が見られた。一方、ウサギに経皮投与により291 mg/kg以上で鈍麻、運動失調、虚脱、後肢部分麻痺、また、ラットに吸入投与(ミスト)では94 mg/m³以上で運動失調、虚脱、鈍麻の中枢神経系抑制症状が報告されている(DFGMAK-Doc. 16 (2001))。以上より、

特定標的臓器毒性(反復ばく露)

ラット用いた90日間(6時間/日)の吸入ばく露試験(0.05, 0.64および6.39 mg/m³(ミスト))において、高濃度群の6.39 mg/m³で呼吸困難、徐呼吸、鼻腔に鼻中隔粘膜の分泌細胞過形成、粘膜の好中球浸潤、呼吸上皮の扁平上皮化生、上皮内への小滴出現が観察され(DFGMAK-Doc. 16 (2001))、この濃度はガイダンス値区分1の範囲に相当している。なお、ラットに115 mg/kg bw/dayまでの用量を90日間混餌投与により投与の影響はなく(DFGMAK-Doc. 16 (2001))、また、ラットに14.87 mg/kg/dayまでの用量を90日間経皮投与により、血液、生化学などの検査値の変化が散見されたが、剖検および病理組織学的検査では投与に関連する変化は明らかではなかった(DFGMAK-Doc. 16 (2001))と報告されている。GHS分類:区分1(気道) ラット用いた90日間(6時間/日)の吸入ばく露試験(0.05, 0.64および6.39 mg/m³(ミスト))において、高濃度群の6.39 mg/m³で呼吸困難、徐呼吸、鼻腔に鼻中隔粘膜の分泌細胞過形成、粘膜の好中球浸潤、呼吸上皮の扁平上皮化生、上皮内への小滴出現が観察され(DFGMAK-Doc. 16 (2001))、この濃度はガイダンス値区分1の範囲に相当していることから区分1(気道)とした。なお、ラットに115 mg/kg bw/dayまでの用量を90日間混餌投与により投与の影響はなく(DFGMAK

吸引性呼吸器有害性

データなし。GHS分類:分類できない データなし。

12. 環境影響情報

生態毒性:

魚類:

96h LC50:0.047 mg/L (*Oncorhynchus mykiss*)

甲殻類:

48h EC50:0.18 mg/L (*Daphnia magna*)

藻類:

情報なし

残留性・分解性:

情報なし

生体蓄積性(BCF):

情報なし

土壤中の移動性

オクタノール水分配係数:

5

土壤吸着係数(Koc):

情報なし

ヘンリ-定数(PaM 3/mol):

情報なし

オゾン層への有害性:

情報なし

13. 廃棄上の注意

処理施設がないなどの理由で廃棄できない場合は、許可を受けた産業廃棄物処理業者に委託する。

空容器を処分する時は、内容物を完全に除去した後に行う。

却炉で焼却する。

焼却処理する場合には、可燃性溶剤に溶解または混合した後、アフターバーナー及びスクラバーを備えた焼
地方条例や国内規制に従う。

適切な保護具を着用する。

14. 輸送上の注意

国連番号:

2928

品名(国連輸送名):

Toxic solid, corrosive, organic, n.o.s.

国連分類:

クラス6.1(毒物)

副次的危険性:

クラス8(腐食性物質)

容器等級:

II

輸送の特定の安全対策及び条件:

積み込み、荷崩れの防止を確実に行い、法令の定めるところに従う。

運搬に際しては容器に漏れのないことを確かめ、転倒、落下、損傷のないように

15. 適用法令

消防法

不明

船舶安全法

腐食性物質 腐食性物質(危規則第3条危険物告示別表第1)

航空法

腐食性物質 腐食性物質(施行規則第194条危険物告示別表第1)

化審法

新規公示化学物質（2011年3月31日以前届出）

16. その他の情報

略語と頭字語

TWA: 時間加重平均

STEL: 短期暴露限度

RID: 鉄道による危険物の国際運送に関する規則

LD50: 致死量 50%

LC50: 致死濃度 50%

IMDG: 国際海上危険物

IATA: 国際航空運送協会

EC50: 有効濃度 50%

CAS: ケミカルアズトラクトサービス

ADR: 道路による危険物の国際輸送に関する欧州協定

参考文献

【1】労働安全衛生法 ウェブサイト <https://www.mhlw.go.jp>

【2】化学物質審査規制法（化審法）<https://www.env.go.jp>

【3】化学物質排出把握管理促進法（PRTR法）<https://www.chemicoco.env.go.jp>

【4】NITE化学物質総合情報提供システム（NITE-CHRIIP）<https://www.nite.go.jp/>

【5】カメオケミカルズ公式サイト <http://cameochemicals.noaa.gov/search/simple>

【6】ChemIDplus、ウェブサイト <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/chemidlite.jsp>

【7】ECHA - 欧州化学物質庁、ウェブサイト <https://echa.europa.eu/>

【8】eChemPortal - OECD 化学物質情報グローバルポータル、ウェブサイト http://www.echemportal.org/echemportal/index?pageID=0&request_locale=en

【9】ERG - 米国運輸省による緊急対応ガイドブック、ウェブサイト <http://www.phmsa.dot.gov/hazmat/library/erg>

【10】有害物質に関するドイツ GESTIS データベース、ウェブサイト <http://www.dguv.de/ifa/gestis/gestis-stoffdatenbank/index-2.jsp>

【11】HSDB - 有害物質データバンク、ウェブサイト <https://toxnet.nlm.nih.gov/newtoxnet/hsdb.htm>

【12】IARC - 國際がん研究機関、ウェブサイト <http://www.iarc.fr>

【13】IPCS - The International Chemical Safety Cards (ICSC)、ウェブサイト <http://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.home>

【14】Sigma-Aldrich、ウェブサイト <https://www.sigmaaldrich.com/>

免責事項：

本MSDS中の情報は指定された製品にのみ適用され、特に規定がない限り、本製品とその他の物質の混合物には適用されません。本MSDSは、製品使用者の適切な専門的なトレーニングを受けた者にのみ製品安全情報を提供します。本MSDSの使用者は、本SDSの適用性について独自に判断しなければならない。本MSDSの著者は、本MSDSの使用によるいかなる傷害にも責任を負わない。