

高分子フロースキームの 合理化検討概要

令和7年11月14日

独立行政法人製品評価技術基盤機構化学物質管理センター

合理化検討の目的と概要

目的

- 令和7年7月に取りまとめられた「化学物質審査規制法の平成29年改正の施行状況の評価及び今後の化学物質対策の在り方について」では、「合理的な規制や制度の運用」として、NITEが解析・提案した高分子フロースキームの合理化の取組等が報告され、今後も引き続きの合理化に向けた取組が求められている。
- NITEには、これまでに申請された新規化学物質の審査に関する知見が蓄積されており、NITEでこれらの知見を解析した結果に基づき、高分子フロースキームの合理化について提案する。

解析対象

- 平成22年から令和3年までに申請された高分子フロースキーム試験結果等を用いて判定を受けた合計約1,500物質。

解析内容

- 高分子化合物の構造的及び物性的特徴を踏まえ、主鎖及び側鎖の結合の種類、物性に応じ、高分子フロースキーム試験における主鎖の分解（または側鎖の分解）の有無について解析した。
- 主鎖の構造、側鎖の構造及び物性の3つの観点から、高分子フロースキーム試験における主鎖の分解（または側鎖の分解）の有無について解析した。

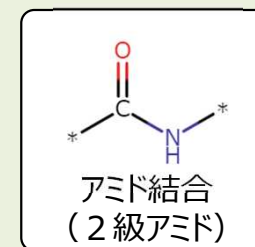
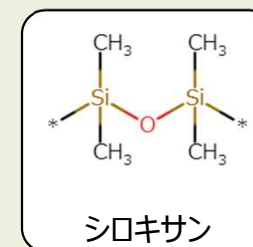
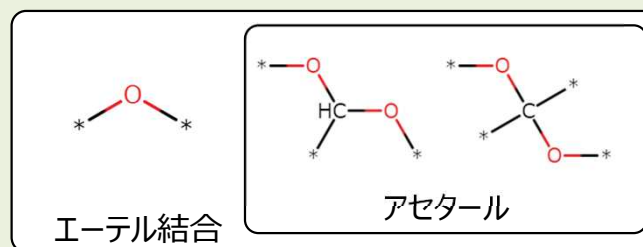
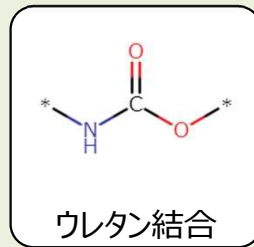
主鎖の構造、側鎖の構造及び物性の3つの要件の組み合わせで定まる、自然的作用による変化を生じにくいと考えられる高分子化合物群を見い出すことが可能か検討した。

主鎖の解析結果

主鎖に関して、グループAで示す構造は**分解された事例がわずかに確認された**。しかし、後述する「物性の解析結果」で示された要件を満たしているものについては、**主鎖の分解は認められなかった**（①）。また、グループBで示す構造からなる主鎖は**分解した事例がなかった**（①'）。

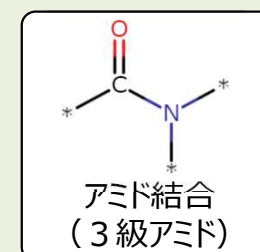
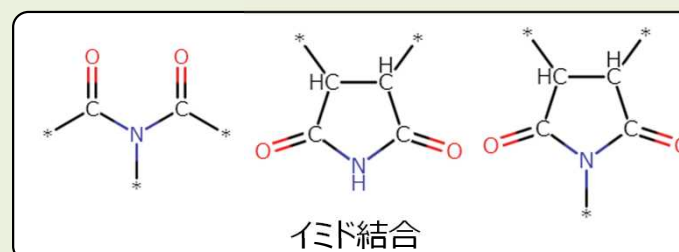
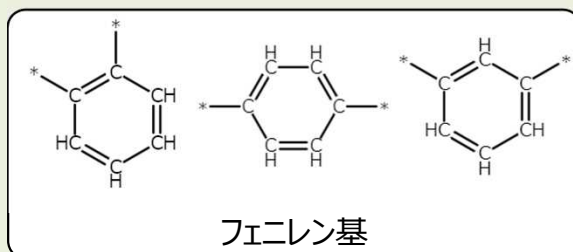
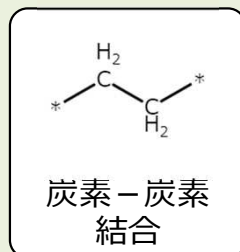
グループA

カルボン酸エステル結合、シロキサン、エーテル結合（アセタールを除く）、ウレタン結合、アミド結合（2級アミドに限る）



グループB

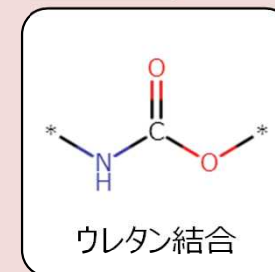
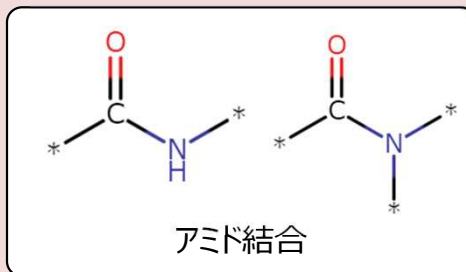
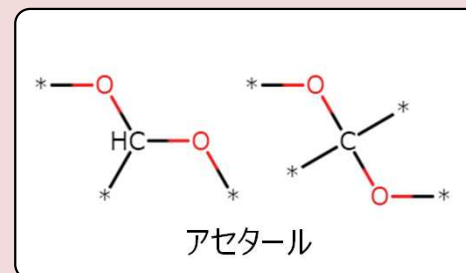
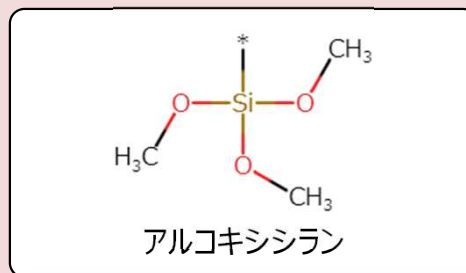
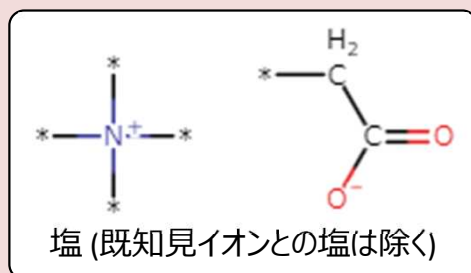
炭素－炭素結合、フェニレン、イミド結合、アミド結合（3級アミドに限る）



側鎖の解析結果

側鎖（末端を含む）に関して、次に示す構造が**分解した事例があった**（②）。

塩（既知見イオン^{*1}との塩は除く）、アルコキシシラン、
アセタール、酸無水物、アミド結合、エステル結合、ウレタン結合

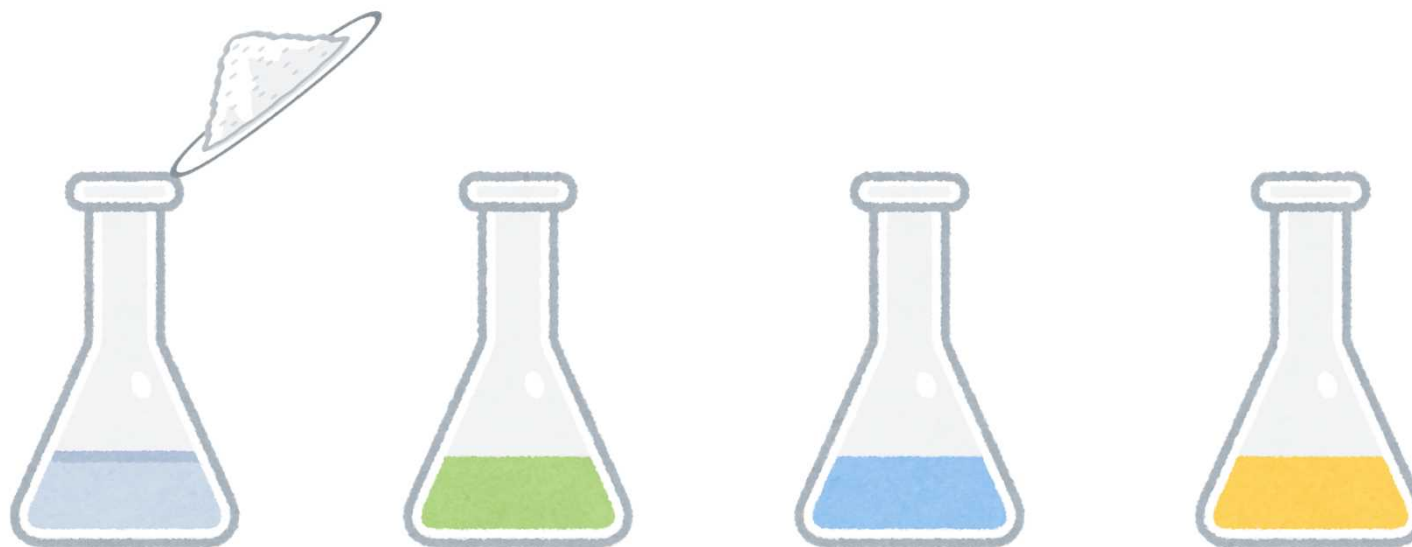


^{*1}既知見イオン・・・既知見通知 4 に記載のイオン (Na^+ 、 K^+ 、 NH_4^+ 、 Mg^{2+} 、 Ca^{2+} 、 BO_3^{3-} 、 SiO_4^{4-} 、 PO_4^{3-} 、 SO_4^{2-} 、 F^- 、 Cl^- 、 Br^- 、 I^- 、 Fe^{2+} 、 Fe^{3+} 、 Zn^{2+} 、 Al^{3+})

物性の解析結果

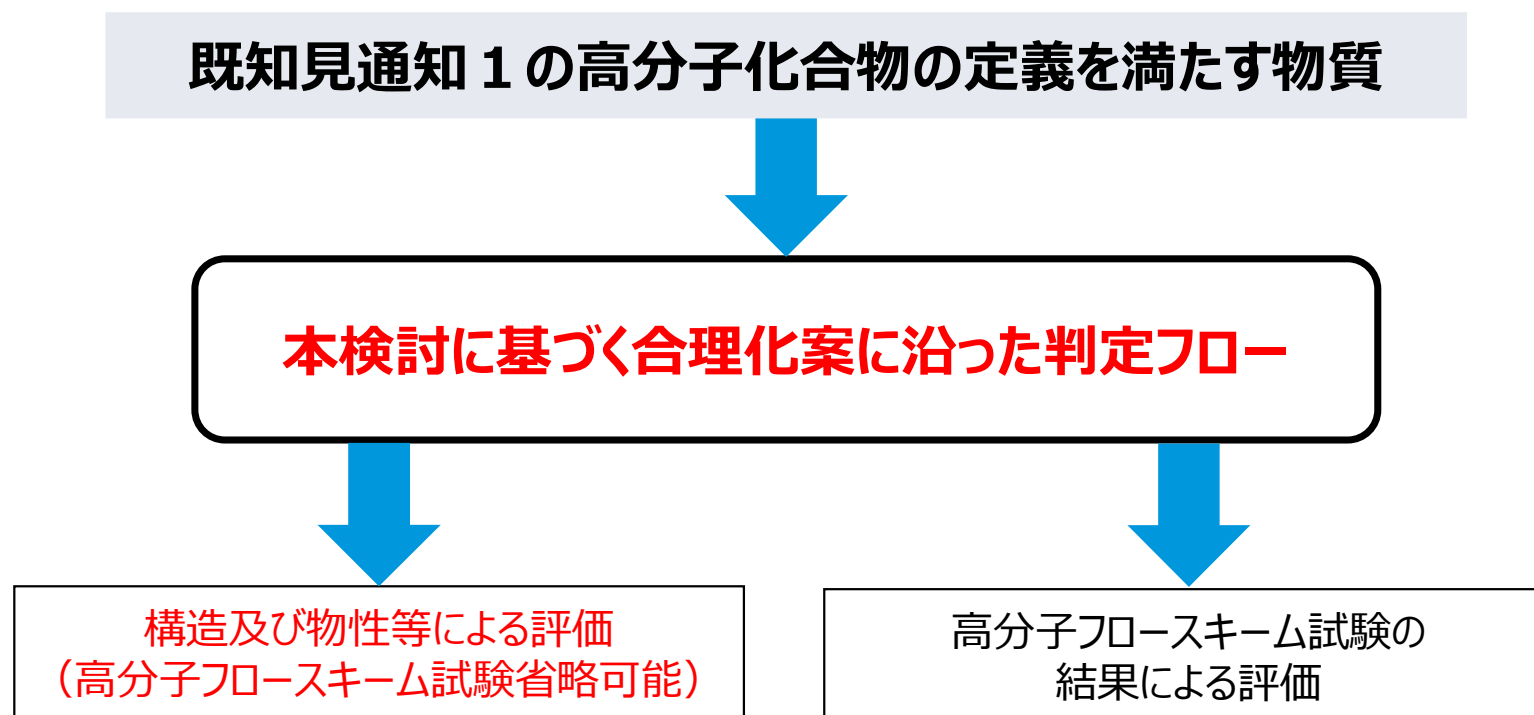
物性に関して、次の要件を満たす物質は、主鎖及び側鎖（末端を含む）が分解した事例がなかった（③）。

各種溶媒*2に不溶（分子量が測定不可）な物質
又は
数平均分子量が100,000以上の物質

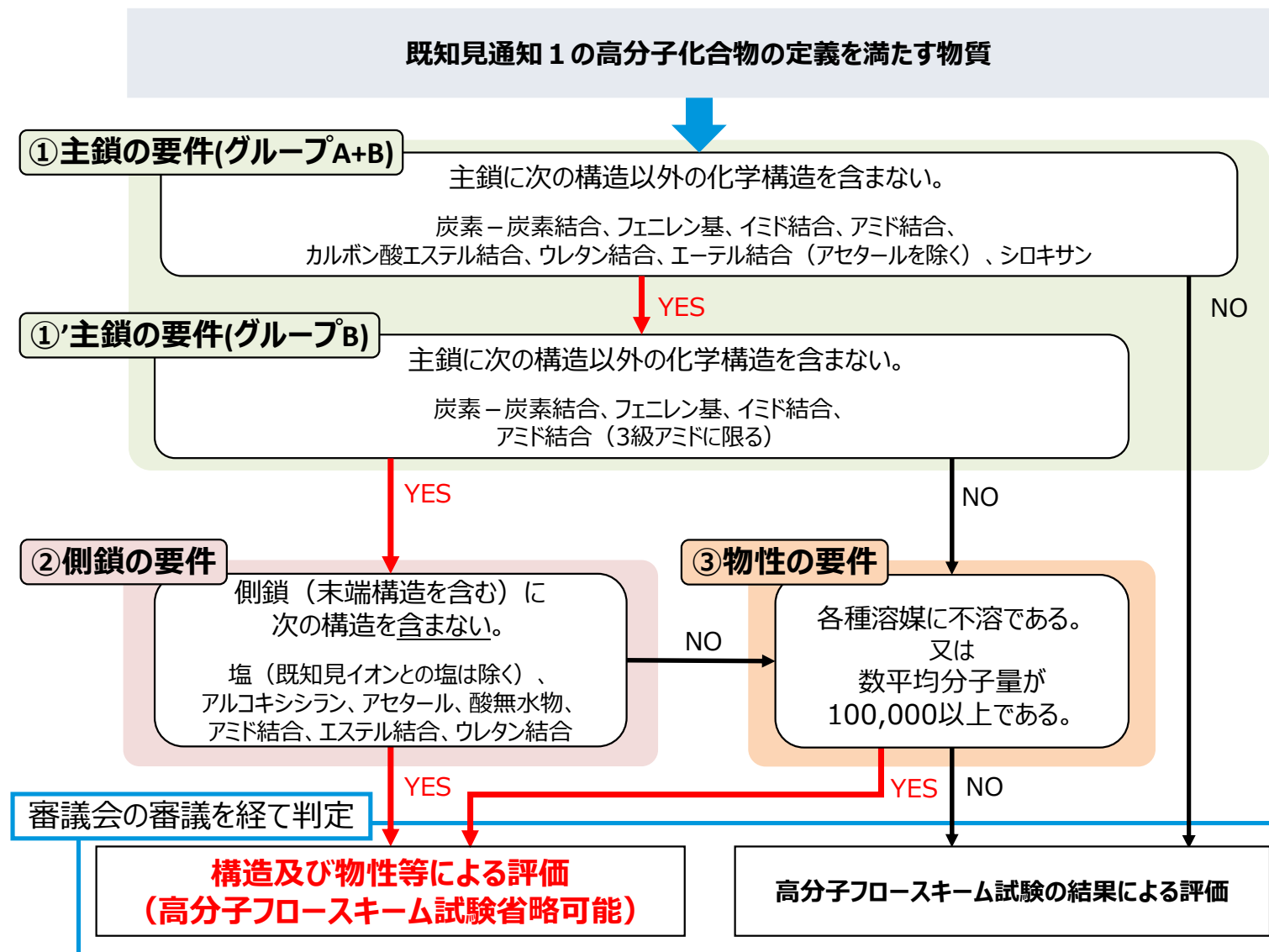


*2各種溶媒・・・高分子フロースキーム試験の溶解性試験で規定されている溶媒（水、THF、DMF）。
なお、DMFに代えて、DMSO又はNMPを使用することができる。

高分子フロースキーム合理化案 全体像



高分子フロースキーム合理化案 詳細フロー図



(参考) 委託事業^{*3}で実施した解析内容

解析対象

平成22年から令和3年までに申請された高分子フロースキーム試験結果等を用いて判定を受けた合計約1,500物質

1. 安定性試験結果の整理

安定性試験結果及び被験物質に生じた変化の内容

- 重量変化、溶解性の変化、IRによる構造変化、試験液の分析による変化物の有無等を確認

2. 構造解析

全ての構造の確認

- 被験物質に含まれる主鎖と側鎖の構造、官能基、金属イオンを特定

構造と変化の関係

- 各結合の安定性（共有結合、イオン結合など）
- 含有される金属イオンの影響
- 官能基のイオン性の有無と反応性
- 末端構造の変化（加水分解や酸化等）

3. 変化物の評価

種類の特定

- 安定性試験で生成した変化物（分解生成物、酸化物、高分子量化物等）を分類
- 分解生成物の蓄積性等評価結果について整理

4. 物性との関係性を整理

溶解性

- 安定性試験での変化と酸、アルカリ、水、有機溶媒への溶解性との関係について解析

分子量

- 安定性試験での変化と分子量（数平均分子量の下限值）との関係について解析

^{*3}[令和5年度化学物質規制対策（化学物質の分解性及び蓄積性に係る総合的評価の導入に関する調査）](#)