

高分子フロースキームの 合理化検討概要

令和8年1月13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説明され、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。

合理化案作成の経緯

- 経済産業省委託調査※¹において、有識者（審議会、予備審査会の高分子評価担当委員3名）による検討会形式で合理化案の検討を実施。NITEは、データ提供・解析・フロー案に関わる要件の検討等で貢献。
- 高分子化合物のうち第6類高分子※²のみを対象に合理化案の作成を目指したが、有識者の指摘等を踏まえ、第7類高分子※³を対象に加え、高分子フロースキーム試験を省略可能な合理化案としてとりまとめた。
- 有識者の助言も受けながら、NITEにおいて、データの再解析を行った。

令和4年度

令和5年度

令和6年度

令和7年度

委託調査における検討内容

第6類について、安定性試験で変化の見られた物質の側鎖の特徴を整理し、安定性試験が不要となる可能性を見出した。

＜実施した解析等＞

- ・第6類高分子(主鎖が炭素-炭素の高分子)858物質のデータベースを作成
- ・安定性試験における変化、側鎖の官能基、数平均分子量との関係を解析

第7類について、第6類と同様の条件が適用可能か検討。さらに第6類・第7類について安定性試験が省略可能な主鎖構造の候補を整理した。

＜実施した解析等＞

- ・第7類高分子709物質のデータベースを作成
- ・安定性試験における変化と主鎖及び側鎖の官能基、数平均分子量との関係を解析
- ・溶媒不溶の高分子化合物について安定性試験の変化を解析

第6類・第7類について、高分子フロースキーム試験が省略可能である要件を主鎖構造・側鎖構造・物性の3要素で合理化フロー案としてまとめた。

＜実施した解析等＞

- ・分解度試験を実施した高分子化合物124物質のデータを含め主鎖が分解する可能性を検討
- ・主鎖と側鎖、数平均分子量（溶媒不溶）の関係を整理
- ・審査シートにより側鎖と官能基ごとの分解の有無を確認

NITEにおいてデータの再解析等を実施

※ 1 経済産業省委託調査（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）
令和4年度[000258.pdf](#)
令和5年度[000421.pdf](#)
令和6年度[1000129.pdf](#)

※ 2 第6類高分子：炭素-炭素二重結合の重合により製造される高分子化合物（例：ポリエチレン、ポリスチレン）

※ 3 第7類高分子：高分子化合物のうち、第6類以外的高分子化合物（例：ポリエステル、ポリアミド）

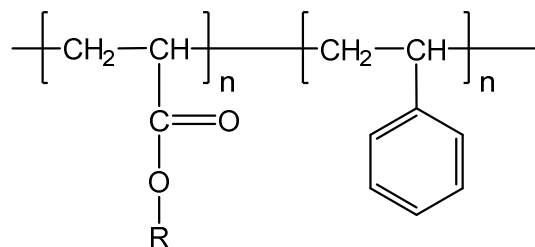
(参考) 第6類と第7類の定義について

- 高分子フロースキームの対象となるのは、化審法における類別番号の第6類及び第7類に分類される高分子化合物である。

第6類	有機重合系高分子化合物	炭素－炭素二重結合の重合により製造される高分子化合物
第7類	有機縮合系高分子化合物	繰り返し単位を持つ高分子化合物のうち、第6類以外のもの

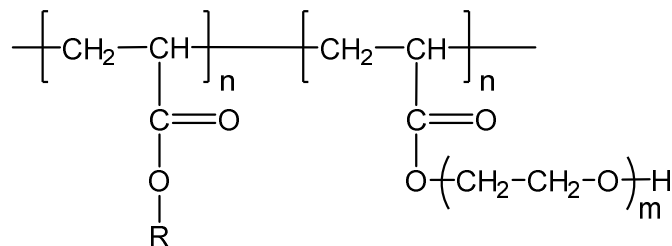
第6類の例

繰り返し構造は炭素－炭素結合（重合により生成されたもの）に限る。



第7類の例

側鎖に炭素－炭素結合（重合により生成されたもの）以外の繰り返し構造を持つ場合（下記の例の場合はエーテル結合）は、第7類とする。



※ R はエチル基等のアルキル基

類別番号の一覧

第1類	無機化合物
第2類	有機鎖状低分子化合物
第3類	有機炭素単環低分子化合物
第4類	有機炭素多環低分子化合物
第5類	有機複素環低分子化合物
第6類	有機重合系高分子化合物
第7類	有機縮合系高分子化合物
第8類	化工でん粉、加工油脂等の有機化合物
第9類	構造不明等化合物

主鎖の解析内容

- 高分子化合物を構成する主鎖の構造の状況から、該当数の多い構造を合理化の対象として抽出。
- さらに、NITEは、分解度試験を実施した高分子化合物（124物質）の解析を踏まえて、分解する可能性のある構造を洗い出した。

		分 類	代表構造	該当数*	分解度試験で分解の事例があった結合 (グループA)	分解度試験で分解の事例がない結合 (グループB)
第6類	{	炭素-炭素結合のみ有する化合物	-C-C-	858		炭素-炭素結合
		アミド結合、ウレタン結合、イミド結合を有する化合物	-NHC(=O)-、-NHC(=O)O-、 -C(=O)NHC(=O)-	303	アミド結合（2級アミドに限る）、ウレタン結合	アミド結合（3級アミドに限る）、イミド結合
第7類	{	炭素-炭素結合のみ有する化合物	-C-C-、 	119		炭素-炭素結合、フェニレン
		エステル結合を有する化合物	-C(=O)O-	179	カルボン酸エステル結合	
		エーテル結合を有する化合物	-O-	195	エーテル結合(アセタールを除く)	
		アルコキシシランを有する化合物	-Si-O-	71	シロキサン	
		スルフィド結合を有する化合物	-C-S-C-	8	事例が少ないため 合理化対象から除外	
		その他（上記の分類に該当しない）化合物	-P(=O)-、-SO ₂	25		

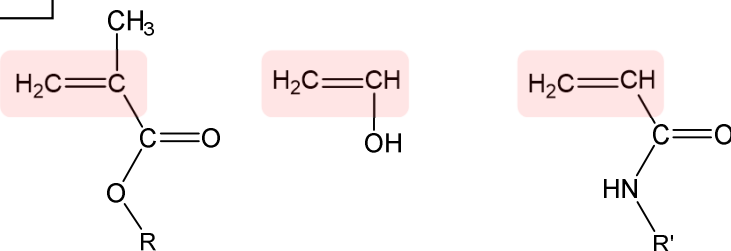
* 複数の構造分類に該当する物質もあるため、第7類の該当数の合計は解析対象とした709物質を超える。

令和5年度委託報告書より抜粋

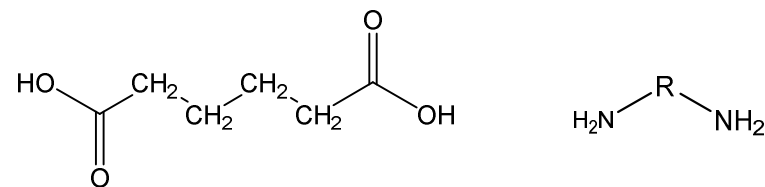
(参考) 主鎖の炭素－炭素結合について

➤主鎖の解析における「炭素－炭素結合」に該当するものは、重合反応により新たに生成した結合である。

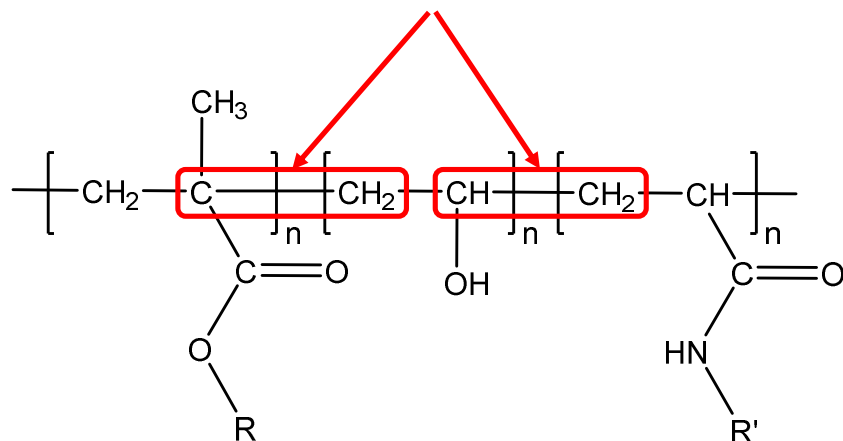
該当する例



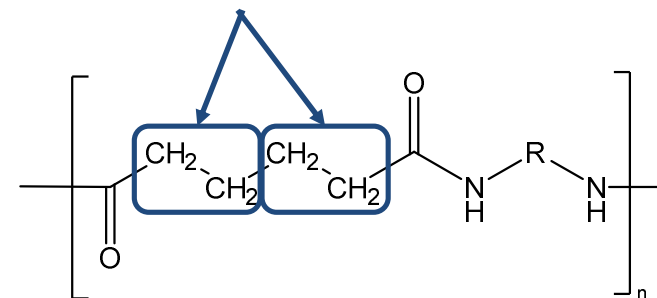
該当しない例



該当する炭素－炭素結合

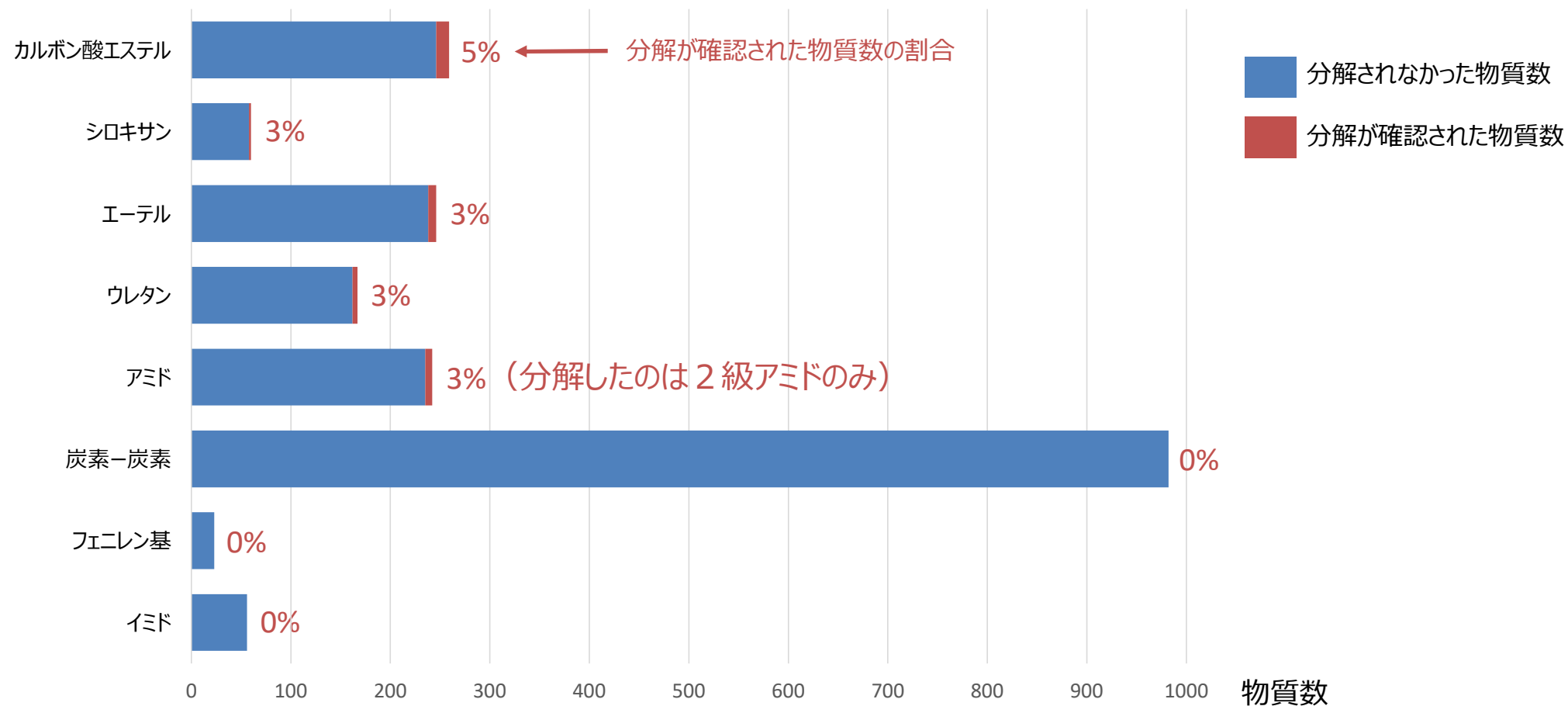


該当しない炭素－炭素結合



主鎖の解析内容

主鎖の結合

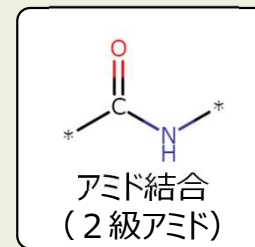
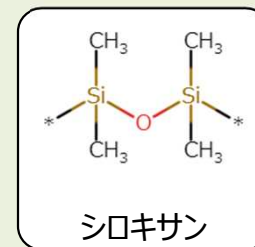
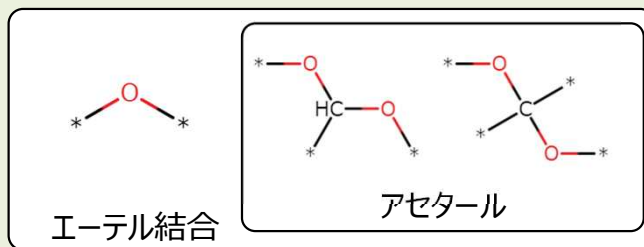
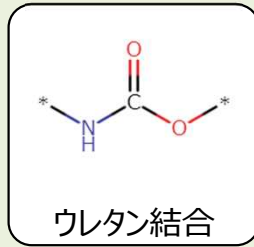


主鎖の解析結果

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')。

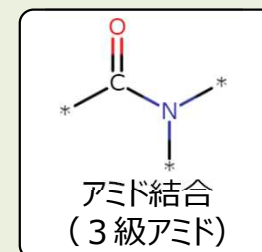
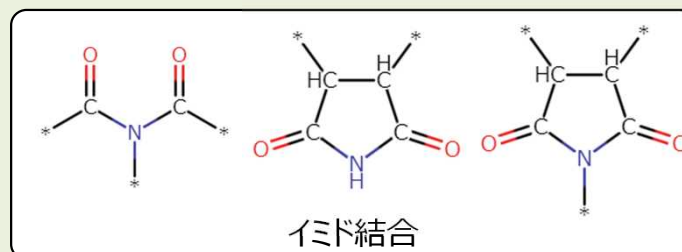
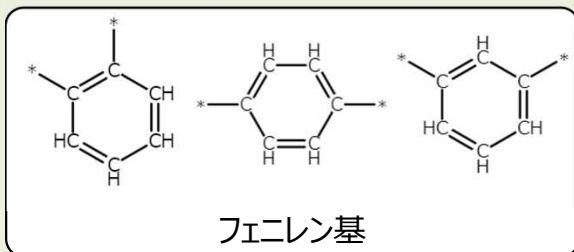
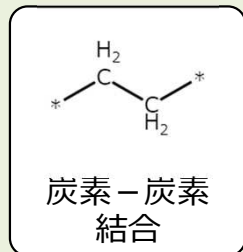
グループA

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

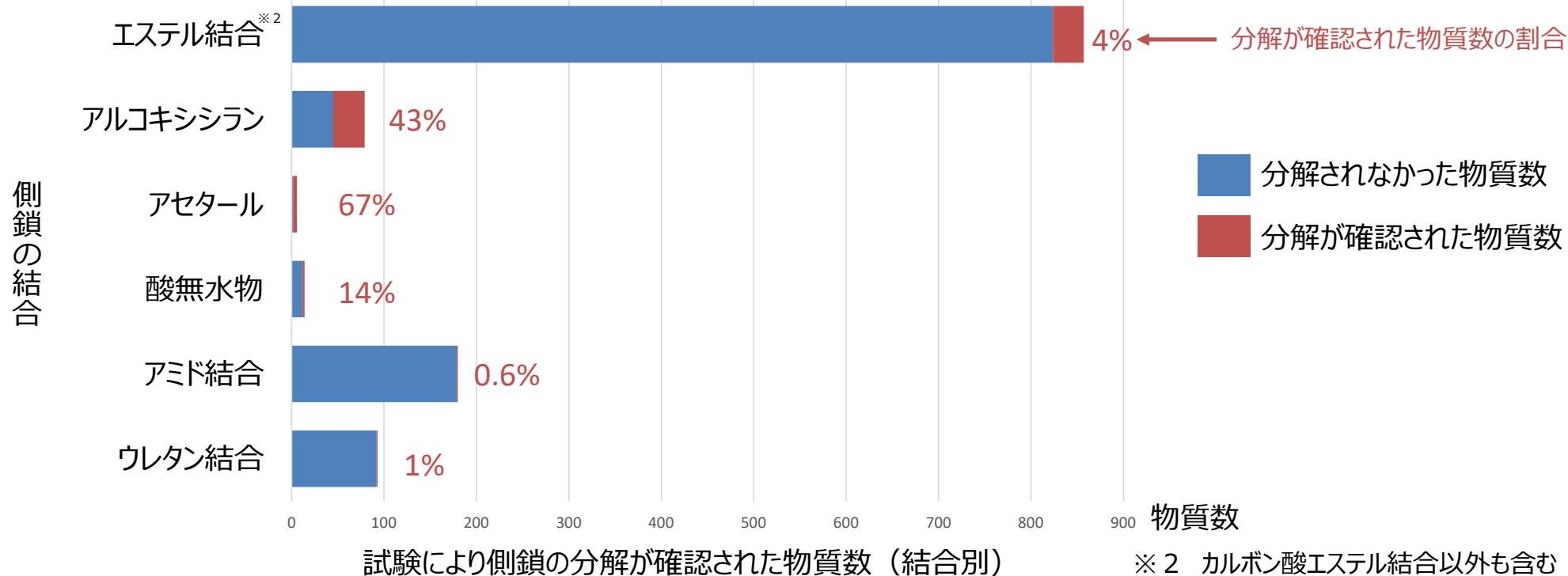
炭素－炭素結合、フェニレン、イミド結合、アミド結合（3級アミドに限る）



側鎖の解析内容

- 第6類の高分子化合物を構成する側鎖について、安定性試験の試験前後で分析結果に変化が認められたもの※1のうち、分解が生じたと考えられる構造を抽出、第7類でも同様に分解が生じたと考えられる構造を確認し、矛盾がないことを確認。
- NITEにおいて、第6類及び第7類高分子について、側鎖の結合ごとに高分子フロースキーム試験で分解が確認された物質を再解析した（下図）。

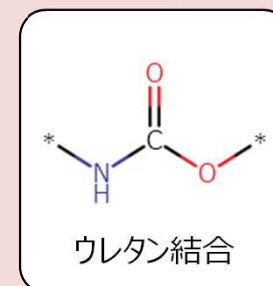
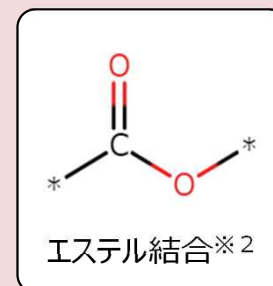
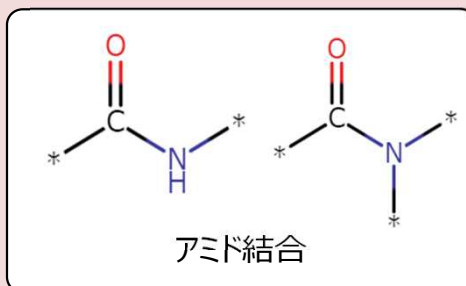
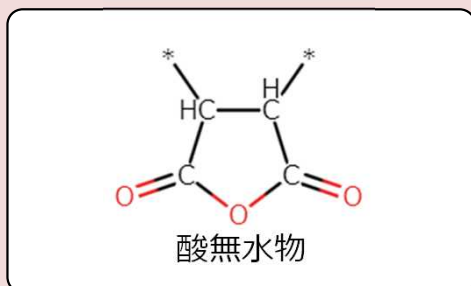
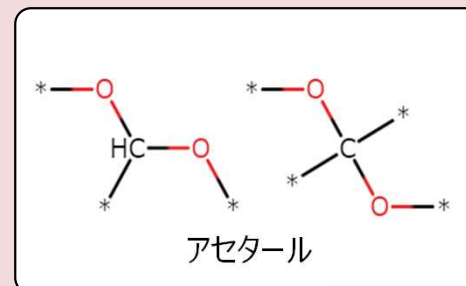
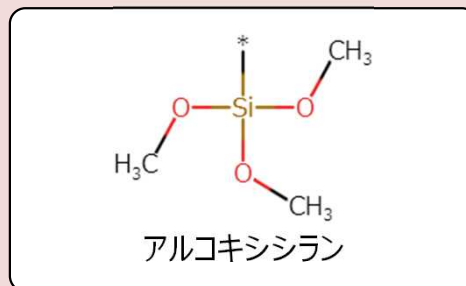
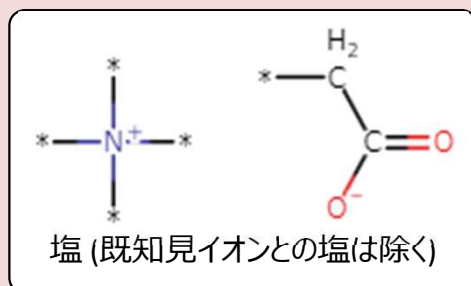
※1 試験前後で重量やIRスペクトル等において基準を超えた変化が確認されたもの。
ただし、高分子化したものや溶解したもの等、分解以外の変化も含む。



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※2、ウレタン結合

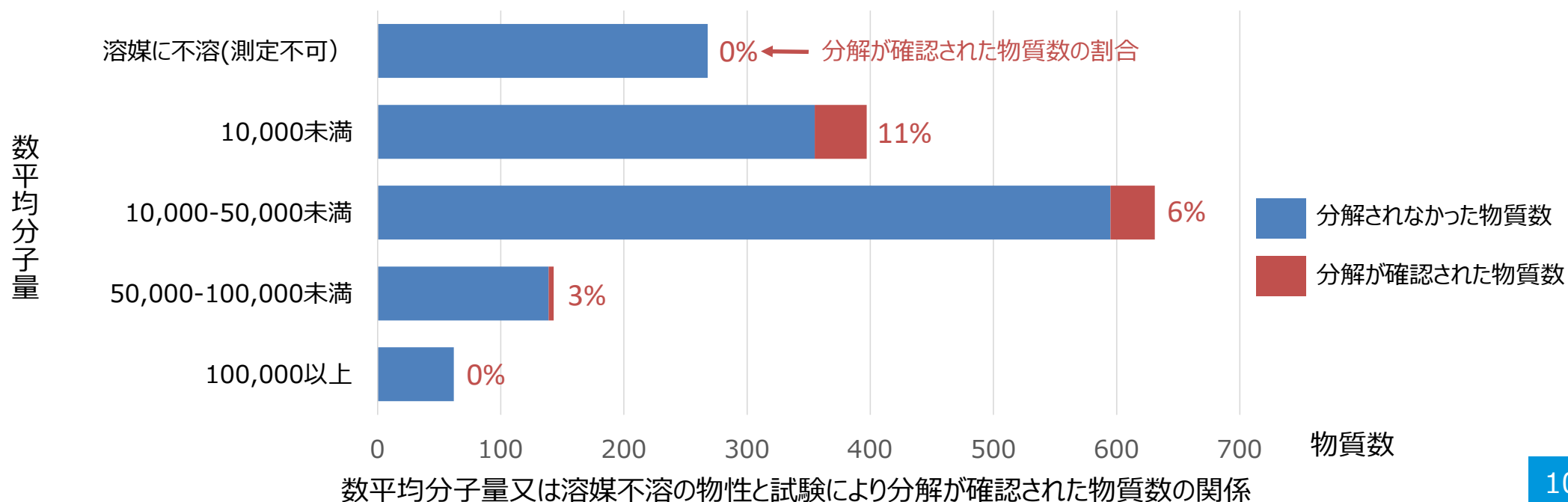


※1 既知見イオン・・・既知見通知4に記載のイオン (Na^+ 、 K^+ 、 NH_4^+ 、 Mg^{2+} 、 Ca^{2+} 、 BO_3^{3-} 、 SiO_4^{4-} 、 PO_4^{3-} 、 SO_4^{2-} 、 F^- 、 Cl^- 、 Br^- 、 I^- 、 Fe^{2+} 、 Fe^{3+} 、 Zn^{2+} 、 Al^{3+})

※2 カルボン酸エステル結合以外も含む

物性（数平均分子量及び溶媒不溶）の解析内容

- 分解が認められた物質の中で数平均分子量が最も大きいものは約7万であったこと、溶媒不溶の物質において分解のみられた物質はなかったという解析結果に基づいて、物性要件として数平均分子量が10万以上又は溶媒不溶という要件を導きだした。
- NITEにおいて、数平均分子量又は溶媒不溶の物性と試験により分解が確認された物質について再集計した（下図）。



(参考) 委託事業での物性 (数平均分子量及び溶媒不溶) の解析例

令和4年度委託事業 第6類の安定性試験における変化と 数平均分子量との関係を解析

図表 4.1-5 数平均分子量に対する安定性試験 (pH4.0) の重量変化

数平均分子量 (Mn)	安定性試験 (pH4.0) における重量変化率の該当物質数 (合計に対する割合)		
	基準以内	基準超	合計
Mn<10,000	192 物質 (94%)	12 物質 (6%)	204 物質
10,000≤Mn<100,000	375 物質 (82%)	81 物質 (18%)	456 物質
100,000≤Mn	45 物質 (87%)	7 物質 (13%)	52 物質

図表 4.1-7 数平均分子量に対する安定性試験 (pH9.0) の DOC 変化

数平均分子量 (Mn)	安定性試験 (pH9.0) における DOC 変化の該当物質数 (合計に対する割合)		
	基準以内	基準超	合計
Mn<10,000	138 物質 (68%)	66 物質 (32%)	204 物質
10,000≤Mn<100,000	337 物質 (74%)	118 物質 (26%)	455 物質
100,000≤Mn	46 物質 (88%)	6 物質 (12%)	52 物質

図表 4.1-9 数平均分子量に対する安定性試験 (pH4.0) での IR スペクトル変化

数平均分子量 (Mn)	安定性試験 (pH4.0) における IR スペクトルの該当物質数 (合計に対する割合)		
	変化なし	変化あり	合計
Mn<10,000	176 物質 (98%)	3 物質 (2%)	179 物質
10,000≤Mn<100,000	392 物質 (94%)	24 物質 (6%)	416 物質
100,000≤Mn	44 物質 (92%)	4 物質 (8%)	48 物質

図表 4.1-11 数平均分子量に対する安定性試験 (pH9.0) での IR スペクトル変化

数平均分子量 (Mn)	安定性試験 (pH9.0) における IR スペクトルの該当物質数 (合計に対する割合)		
	変化なし	変化あり	合計
Mn<10,000	150 物質 (96%)	6 物質 (4%)	156 物質
10,000≤Mn<100,000	367 物質 (93%)	29 物質 (7%)	396 物質
100,000≤Mn	41 物質 (87%)	6 物質 (13%)	47 物質

令和5年度委託事業 第7類の安定性試験における変化と 数平均分子量との関係を解析

図表 2.3-3 数平均分子量と安定性試験結果における変化の有無 (アミド結合、ウレタン結
合、イミド結合)

数平均分子量	1,000~10,000	10,000~ 100,000	100,000~	合計
対象物質	70	125	1	196
安定性試験において「変化なし」と判定された物質数	45 (64%)	98 (78%)	1 (100%)	144 (73%)
安定性試験において 1 項目以上「変化あり」と判定された物質数	25 (36%)	27 (22%)	0 (0%)	52 (27%)
(1) のうち、構造変化ではないと判断された物質数	18	23	0	41
(1) のうち、高分子変化物が生成した物質数 ^{*)}	6	4	0	10
(1) のうち、低分子変化物が生成した物質数	1	0	0	1

^{*)} 無機にアルコキシシランがある化合物は、安定性試験における変化の過程で低分子化合物であるアルコールも生じるが、ここでは高分子変化物が生成した物質として集計した。

分解が確認された物質数

図表 2.3-4 数平均分子量と安定性試験結果における変化の有無 (炭素-炭素結合のみ)

数平均分子量	1,000~10,000	10,000~ 100,000	100,000~	合計
対象物質	23	78	4	105

図表 2.3-5 数平均分子量と安定性試験結果における変化の有無 (エステル結合)

数平均分子量	1,000~10,000	10,000~ 100,000	100,000~	合計
対象物質	41	92	2	135

図表 2.3-6 数平均分子量と安定性試験結果における変化の有無 (エーテル結合)

数平均分子量	1,000~10,000	10,000~ 100,000	100,000~	合計
対象物質	62	84	1	147

図表 2.3-7 数平均分子量と安定性試験結果における変化の有無 (アルコキシシラン)

数平均分子量	1,000~10,000	10,000~ 100,000	100,000~	合計
対象物質	32	25	1	58

図表 2.3-8 数平均分子量と安定性試験結果における変化の有無 (スルフィド結合)

数平均分子量	1,000~10,000	10,000~ 100,000	100,000~	合計
対象物質	2	4	0	6

図表 2.3-9 数平均分子量と安定性試験結果における変化の有無 (その他の化合物)

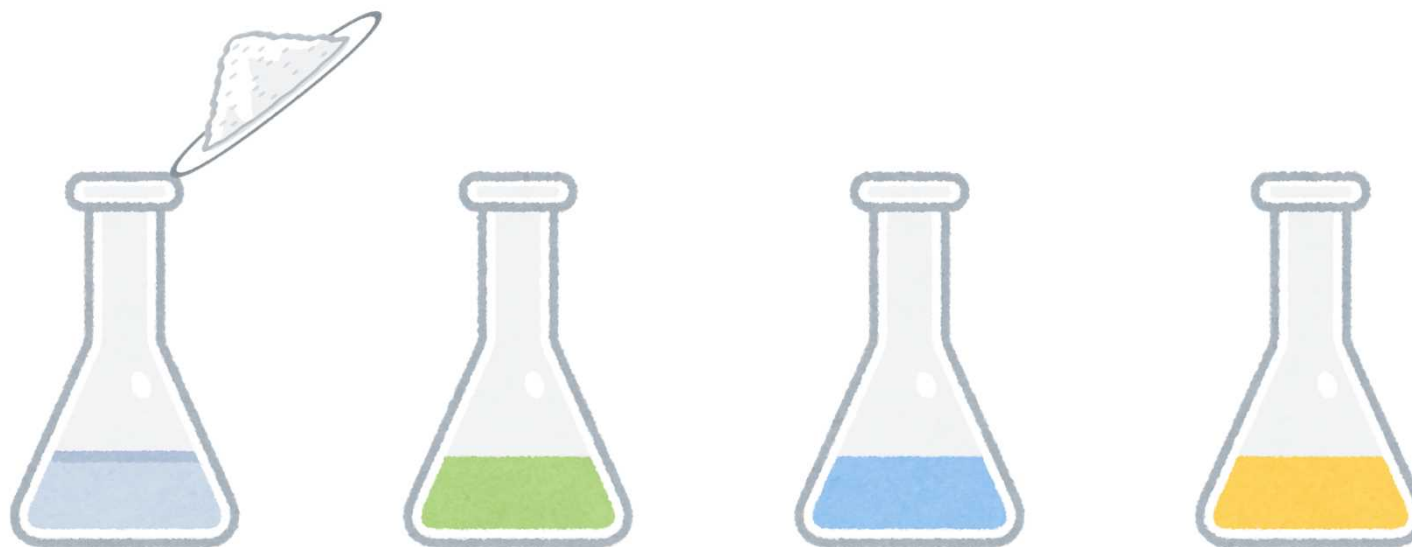
数平均分子量	1,000~10,000	10,000~ 100,000	100,000~	合計
対象物質	5	12	1	18

対象物質部分のみ抜粋

物性の解析結果

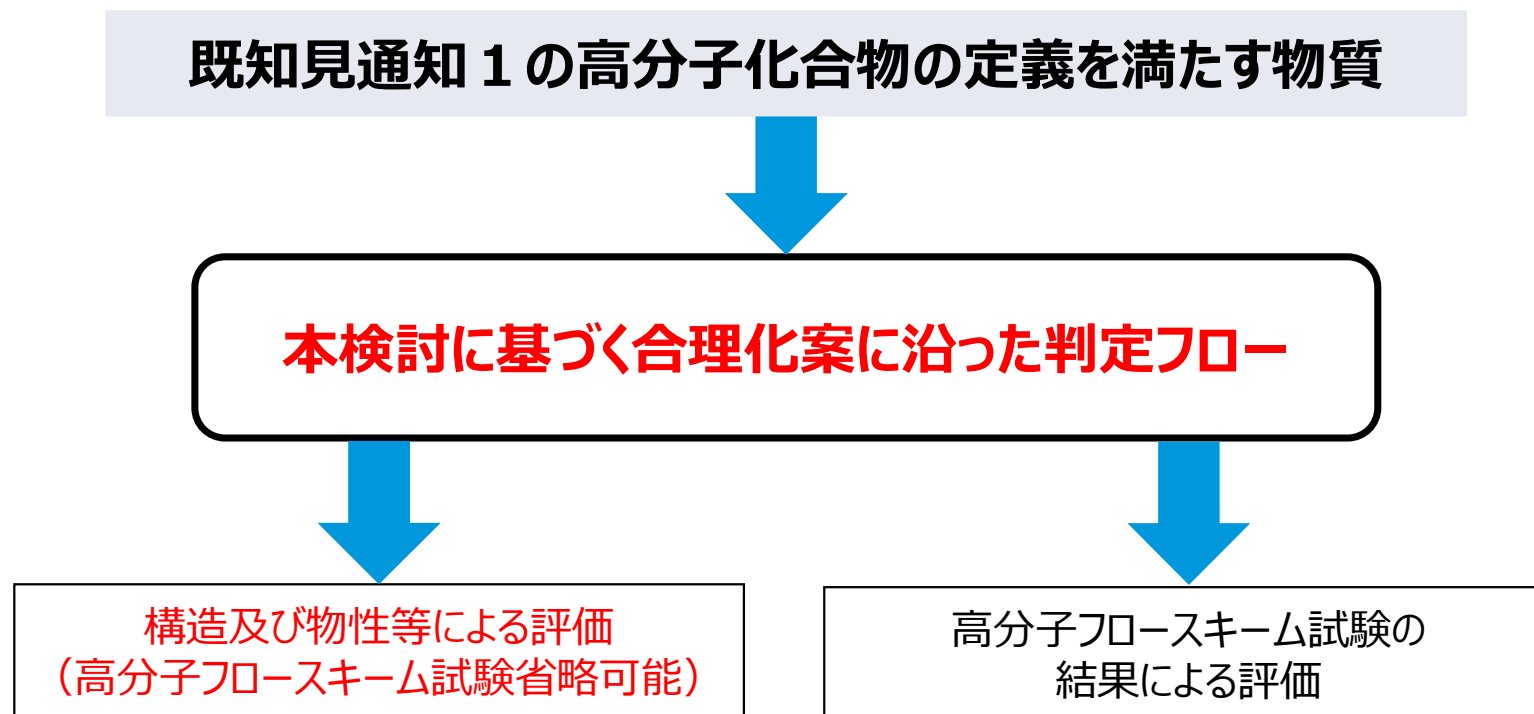
物性に関して、次の要件を満たす物質は、主鎖及び側鎖（末端を含む）が分解した事例がなかった（③）。

各種溶媒※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



※各種溶媒・・・高分子フローズ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

既知見通知 1 の高分子化合物の定義を満たす物質

①主鎖の要件(グループA+B)

主鎖は、次に掲げる化学構造の単一又は複数の連鎖により生成する結合に限られる。

炭素-炭素結合、フェニレン基、イミド結合、アミド結合、
カルボン酸エステル結合、ウレタン結合、エーテル結合（アセタールを除く）、シロキサン

①'主鎖の要件(グループB)

主鎖は、次に掲げる化学構造の単一又は複数の連鎖により生成する結合に限られる。

炭素-炭素結合、フェニレン基、イミド結合、
アミド結合（3級アミドに限る）

②側鎖の要件

側鎖（末端構造を含む）に
次の構造を含む。

塩（既知見イオンとの塩は除く）、
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

③物性の要件

各種溶媒に不溶である。
又は
数平均分子量が
100,000以上である。

審議会の審議を経て判定

構造及び物性等による評価
(高分子フロースキーム試験省略可能)

高分子フロースキーム試験の結果による評価

(参考) 委託事業※1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ッ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値）との関係について解析

※ 1 経済産業省委託調査（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）

令和4年度[000258.pdf](#)

令和5年度[000421.pdf](#)

令和6年度[1000129.pdf](#)