

第31回化学物質評価研究機構研究発表会

講演要旨集

令和8年6月5日

於：経団連会館

主催 一般財団法人化学物質評価研究機構

後援 経済産業省

目 次

第 31 回化学物質評価研究機構研究発表会

基調講演	経済産業省における化学物質管理政策について ……………1 経済産業省大臣官房産業保安・安全グループ 化学物質管理課長 大本 治康
研究発表	
1)	LLNA: BrdU-ELISA 法による GHS 皮膚感作性細区分基準の ……………46 確立と国連 GHS 文書改訂に向けた取組み 日田事業所 小林 俊夫
2)	LLNA をベースにした新規光アレルギー性試験法の開発と ……………50 応用 安全性評価技術研究所 前田 洋祐
3)	海洋生分解性プラスチックの評価法の開発 ……………54 (ムーンショット型研究開発プロジェクト) 東京事業所高分子技術部 菊地 貴子
技術報告	
1)	医薬品・医療機器の抽出物・溶出物 (E&L) 試験における ……………56 化学的キャラクタリゼーションの最近の動向 (高分子技術部門) 三輪 怜史
2)	分取 HPLC による有用成分の受託精製 ……………60 (クロマト技術部門) 坂牧 寛
3)	GHS に基づく化学品の分類方法及び SDS・ラベル作成 ……………64 —2025 年の JIS 改正を踏まえて— (安全性評価技術研究所) 石井かおり
4)	底質環境における生態影響評価 ……………68 (化学物質安全部門) 安達 竜太
5)	希土類元素 (レアアース) 評価の信頼性を高める ……………72 JCSS 希土類元素標準液の開発 (化学標準部門) 沢田 貴史
6)	PFAS 追加規制に対応した製品中 PFAS 含有分析 ……………76 (環境技術部門) 岩崎 圭
特別講演	最小二乗法による直線検量線の作成とそれを用いた定量 ……………80 分析値の不確かさ評価 専務理事 四角目和広
学会発表等の実績 (令和 7 年度) ……………100	
お問合せ先 ……………115	

基 調 講 演

経済産業省における 化学物質管理政策について

経済産業省

大臣官房産業保安・安全グループ

化学物質管理課長 大本 治 康



経済産業省

経済産業省における 化学物質管理政策について

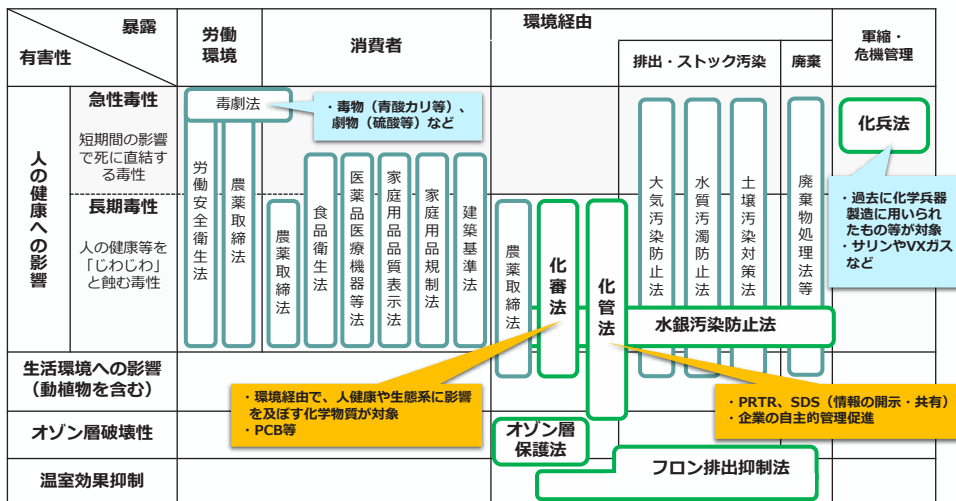
令和 8 年 6 月 5 日
経済産業省産業保安・安全グループ
化学物質管理課長 大本 治康

目次

1. 総論 ～化学物質管理政策をめぐる最近の動向～
2. 各論
 - ① 化学物質審査規制法（化審法）の施行状況と動向
 - ② 化学物質排出把握管理促進法（化管法）の施行状況と動向
 - ③ オゾン層保護法・フロン排出抑制法の施行状況と動向
 - ④ 化学兵器禁止法の施行状況と動向
 - ⑤ 水銀汚染防止法の施行状況と動向
3. 化学物質管理を巡る環境変化等への対応に向けて

我が国における化学物質規制の全体像

- 我が国においては、暴露経路やライフサイクルの段階に応じ、様々な法律により化学物質規制が行われている。
- 経産省化学物質管理課では、化審法、化管法、オゾン層保護法、フロン排出抑制法、化兵法及び水銀汚染防止法を所管。

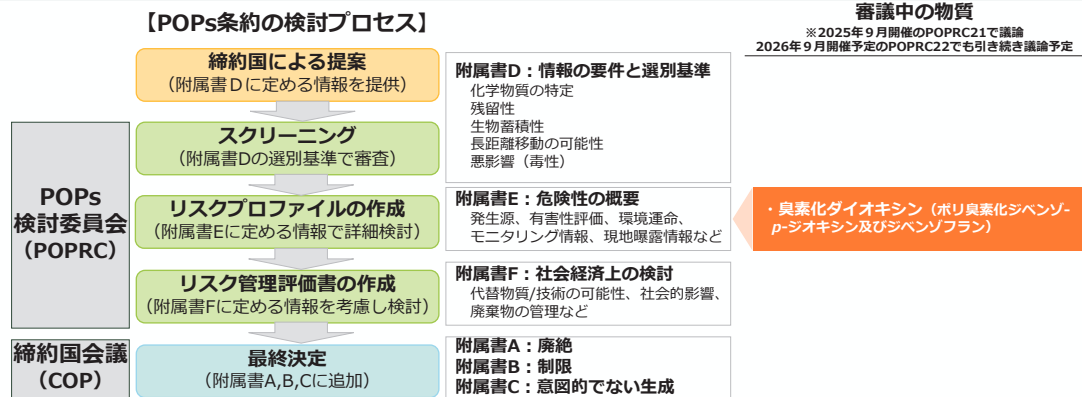


経産省化学物質管理課の所管法令と国際条約

法律 ※赤字は所管法令	国際条約
化学物質審査規制法 (化審法) (1973年成立) 厚経環 ・化学物質の製造・輸入に関する上市前の事前審査及び上市後の継続的な管理により、化学物質による環境汚染を防止することを目的とする。 ・新規化学物質及び既存化学物質が環境を経由して人・生態系に与える影響を評価し、製造、輸入、使用等を規制。	ストックホルム条約 (2001年採択) ・PCB等の残留性有機汚染物質の製造及び使用の廃絶・制限、排出の削減を規定。
化学物質排出把握管理促進法 (化管法) (1999年成立) 経環 ・事業者による化学物質の排出量等を公表させることで自主的管理の改善を促進し、環境の保全上の支障を未然に防止することを目的とする。 ・PRTR制度：事業所 (3.2万) の排出量・移動量を公表 ・SDS制度：有害性情報を書面で提供、国際標準化 (GHS準拠)	PRTR制度の導入に関するOECD勧告 (1996年) ・事業者自らが化学物質の環境への排出量等を把握し、国に届出を行い、国がその排出量等を公表する制度の導入を勧告。
オゾン層保護法 (1988年成立) 経環 ・モントリオール議定書に基づく特定フロン・代替フロンの生産量・消費量の削減義務を履行するため、特定フロン・代替フロンの製造及び輸入を規制。 フロン排出抑制法 (2001年成立) 経環 ・フロン類の排出抑制を目的として、業務用冷凍空調機器からの廃棄時のフロン回収義務に加え、フロン類使用機器の管理など、フロン類のライフサイクル全般にわたる排出抑制対策を規定。	モントリオール議定書 (1987年採択) ・オゾン層破壊物質である特定フロン、地球温暖化に深刻な影響をもたらす代替フロンの生産量・消費量の段階的削減を規定。
化学兵器禁止法 (化兵法) (1995年成立) 経 ・化学兵器禁止条約の適確な実施を確保するため、化学兵器の製造、所持等を禁止。 ・特定物質 (サリン等) の製造・使用等に係る規制の他、指定物質 (ホスゲン等) 等、条約に基づく一定の化学物質に係る製造等の届出義務を規定。	化学兵器禁止条約 (1992年採択) ・サリンなどの化学兵器の開発、生産、保有等を包括的に禁止。 ・国際機関 (OPCW) に対する一定の化学物質の生産等に関する情報の申告義務や現地検査の実施等を規定。
水銀汚染防止法 (2015年成立) 経環 ・水銀に関する水俣条約の的確かつ円滑な実施を確保し、水銀による環境の汚染を防止することを目的とする。 ・水銀及びその化合物を使用した製品の製造等を規制。	水銀に関する水俣条約 (2013年採択) ・水銀の一次採掘の禁止から貿易、水銀添加製品や製造工程での水銀利用、大気への排出、水銀廃棄物に至るまで、水銀が人の健康や環境に与えるリスクを低減するための包括的な規制を定める。

残留性有機汚染物質に関するストックホルム条約 (POPs条約)

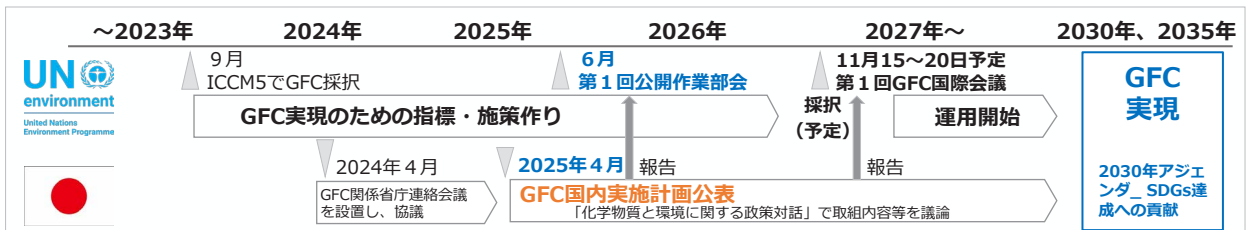
- 環境中での残留性、生物蓄積性、人や生物への毒性が高く、長距離移動性が懸念される**残留性有機汚染物質 (POPs: Persistent Organic Pollutants)** の製造及び使用の廃絶・制限、排出の削減、これらの物質を含む廃棄物等の適正処理等について規定 (2004年 5月発効)。
- POPs条約で廃絶、制限対象となった化学物質については、国内における検討を経て、**化審法の第一種特定化学物質に指定**。
- 条約の対象物質の追加等を踏まえ、条約の義務を履行するための**国内実施計画を2025年3月に改定**。
- 2025年4～5月にCOP12が開催され、「**MCCP (中鎖塩素化パラフィン)**」、「**長鎖PFCA (長鎖ペルフルオロカルボン酸)**」**とその塩及び長鎖PFCA関連物質**及び「**クロルビリホス**」の3物質に関して、条約**附属書A**への追加が決定。



国内でのGFC実現に向けて (国内実施計画の公表)

- 2023年9月に採択された、ライフサイクルを通じた化学物質管理に関する自主的な国際枠組み (GFC) では、実施のための手法として、各国に国内実施計画の策定を求めていることから、我が国でも、多様な分野、多様な主体の関与を得ながらパブリックコメントや関係省庁連絡会議等を経て、**2025年4月に国内実施計画を策定・公表**。今後は同計画に基づき対応を進めていく。
- また、国内実施計画については国際的な発信も行っており、2025年6月の臨時公開作業部会 (OEWG1) にて報告を行ったほか、2026年11月にスイス・ジュネーブで開催予定の第1回GFC国際会議においても報告を行う予定。

GFC実現に向けた国際的な動きと国内の動き



◆ 第1回公開作業部会 (OEWG1)

<開催概要>

- ・ 日 時 : 2025年6月24～27日 (IOMC主催プレWS 22、23日)
- ・ 場 所 : ウルグアイ (プンタ デル エステ)
- ・ 参加者 : 600名を超える各国政府・産業界・NGO・学術/研究機関・若者・国際機関が参加
- ・ 目 的 : 第1回GFC国際会議での審議に向け、ICCM5での決議に対する進捗共有と議論



プラスチック汚染に関する条約交渉

- 2022年3月、深刻化する海洋プラスチック汚染の問題を背景に、国連環境総会にて、「**プラスチック汚染を終わらせる**」ことを目的として、**法的拘束力のある国際文書(条約)策定**のための政府間交渉委員会 (INC) の設置に合意。(UNEA決議5/14)
- 当初は2024年末までに作業を終える予定であったが、条約のスコープや規律の形態等に係る各国の意見の隔たりが大きく、**現時点で合意には至っていない**。
- 直近では2026年2月7日の第5回政府間交渉委員会再開会合 (INC5.3) において、前INC議長の辞任を受け、新議長としてチリのフリオ・コルダノ (Mr. Julio Cordano) 氏が選出。(実質的な交渉は行われていない。)
- 経産省は、引き続き日本政府代表団として外務省及び環境省等と連携して、本交渉の妥結に貢献していく。

	開催日	開催場所
INC 1	2022/11/28 – 12/2	ウルグアイ ブンタ・デル・エステ
INC 2	2023/5/29 – 6/2	フランス パリ
INC 3	2023/11/13 – 18	ケニア ナイロビ
INC 4	2024/4/23 – 29	カナダ オタワ
INC5.1	2024/11/25 – 12/1	韓国 釜山
INC5.2	2025/8/5 – 15	スイス ジュネーブ
INC5.3	2026/2/7	スイス ジュネーブ

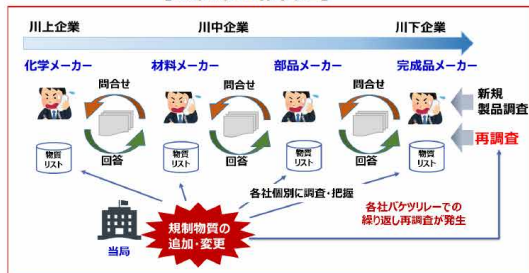
7

CMPのコンセプト

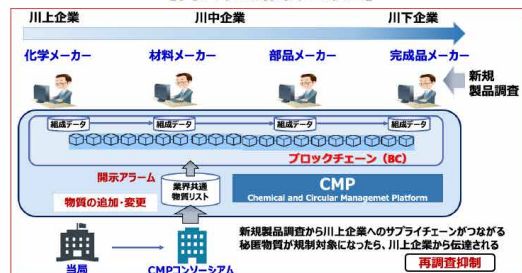
【得られる効果】

- ✓ **川上から川下へのシームレスな情報伝達**
→バケツリレー型情報伝達から、CMPコンソーシアムによるサプライチェーン全体への一括トリガーへの変革
- ✓ **規制変更時に必要となる再調査の抑制**
- ✓ **資源循環など新たな情報への展開**

【現状の情報伝達】



【目指す情報伝達の姿】



※CMP: 製品含有化学物質・資源循環情報プラットフォーム (Chemical and circular Management Platform)

4



©2026 Copyright. All Rights Reserved. CMP Consortium

【出典】 令和7年度第1回化学物質審議会 産業構造審議会 保安・消費生活用製品安全分科会 第3回化学物質政策小委員会 合同会議 (令和8年3月4日) 資料8 (抜粋)

8

CMPコンソーシアムの設立

✓ 2025年10月にCMPタスクフォースとJAMPを統合・改組する形でCMPコンソーシアムを設立

CMPタスクフォース
(会員約70社・団体)
✓ CMPの企画・推進

CMPタスクフォースメンバーリスト

担当事業	担当事業	担当事業
1. 有機合成化学	1. 有機合成化学	1. 有機合成化学
2. 有機合成化学	2. 有機合成化学	2. 有機合成化学
3. 有機合成化学	3. 有機合成化学	3. 有機合成化学
4. 有機合成化学	4. 有機合成化学	4. 有機合成化学
5. 有機合成化学	5. 有機合成化学	5. 有機合成化学
6. 有機合成化学	6. 有機合成化学	6. 有機合成化学
7. 有機合成化学	7. 有機合成化学	7. 有機合成化学
8. 有機合成化学	8. 有機合成化学	8. 有機合成化学
9. 有機合成化学	9. 有機合成化学	9. 有機合成化学
10. 有機合成化学	10. 有機合成化学	10. 有機合成化学
11. 有機合成化学	11. 有機合成化学	11. 有機合成化学
12. 有機合成化学	12. 有機合成化学	12. 有機合成化学
13. 有機合成化学	13. 有機合成化学	13. 有機合成化学
14. 有機合成化学	14. 有機合成化学	14. 有機合成化学
15. 有機合成化学	15. 有機合成化学	15. 有機合成化学
16. 有機合成化学	16. 有機合成化学	16. 有機合成化学
17. 有機合成化学	17. 有機合成化学	17. 有機合成化学
18. 有機合成化学	18. 有機合成化学	18. 有機合成化学
19. 有機合成化学	19. 有機合成化学	19. 有機合成化学
20. 有機合成化学	20. 有機合成化学	20. 有機合成化学
21. 有機合成化学	21. 有機合成化学	21. 有機合成化学
22. 有機合成化学	22. 有機合成化学	22. 有機合成化学
23. 有機合成化学	23. 有機合成化学	23. 有機合成化学
24. 有機合成化学	24. 有機合成化学	24. 有機合成化学
25. 有機合成化学	25. 有機合成化学	25. 有機合成化学
26. 有機合成化学	26. 有機合成化学	26. 有機合成化学
27. 有機合成化学	27. 有機合成化学	27. 有機合成化学
28. 有機合成化学	28. 有機合成化学	28. 有機合成化学
29. 有機合成化学	29. 有機合成化学	29. 有機合成化学
30. 有機合成化学	30. 有機合成化学	30. 有機合成化学
31. 有機合成化学	31. 有機合成化学	31. 有機合成化学
32. 有機合成化学	32. 有機合成化学	32. 有機合成化学
33. 有機合成化学	33. 有機合成化学	33. 有機合成化学
34. 有機合成化学	34. 有機合成化学	34. 有機合成化学
35. 有機合成化学	35. 有機合成化学	35. 有機合成化学
36. 有機合成化学	36. 有機合成化学	36. 有機合成化学
37. 有機合成化学	37. 有機合成化学	37. 有機合成化学
38. 有機合成化学	38. 有機合成化学	38. 有機合成化学
39. 有機合成化学	39. 有機合成化学	39. 有機合成化学
40. 有機合成化学	40. 有機合成化学	40. 有機合成化学
41. 有機合成化学	41. 有機合成化学	41. 有機合成化学
42. 有機合成化学	42. 有機合成化学	42. 有機合成化学
43. 有機合成化学	43. 有機合成化学	43. 有機合成化学
44. 有機合成化学	44. 有機合成化学	44. 有機合成化学
45. 有機合成化学	45. 有機合成化学	45. 有機合成化学
46. 有機合成化学	46. 有機合成化学	46. 有機合成化学
47. 有機合成化学	47. 有機合成化学	47. 有機合成化学
48. 有機合成化学	48. 有機合成化学	48. 有機合成化学
49. 有機合成化学	49. 有機合成化学	49. 有機合成化学
50. 有機合成化学	50. 有機合成化学	50. 有機合成化学
51. 有機合成化学	51. 有機合成化学	51. 有機合成化学
52. 有機合成化学	52. 有機合成化学	52. 有機合成化学
53. 有機合成化学	53. 有機合成化学	53. 有機合成化学
54. 有機合成化学	54. 有機合成化学	54. 有機合成化学
55. 有機合成化学	55. 有機合成化学	55. 有機合成化学
56. 有機合成化学	56. 有機合成化学	56. 有機合成化学
57. 有機合成化学	57. 有機合成化学	57. 有機合成化学
58. 有機合成化学	58. 有機合成化学	58. 有機合成化学
59. 有機合成化学	59. 有機合成化学	59. 有機合成化学
60. 有機合成化学	60. 有機合成化学	60. 有機合成化学
61. 有機合成化学	61. 有機合成化学	61. 有機合成化学
62. 有機合成化学	62. 有機合成化学	62. 有機合成化学
63. 有機合成化学	63. 有機合成化学	63. 有機合成化学
64. 有機合成化学	64. 有機合成化学	64. 有機合成化学
65. 有機合成化学	65. 有機合成化学	65. 有機合成化学
66. 有機合成化学	66. 有機合成化学	66. 有機合成化学
67. 有機合成化学	67. 有機合成化学	67. 有機合成化学
68. 有機合成化学	68. 有機合成化学	68. 有機合成化学
69. 有機合成化学	69. 有機合成化学	69. 有機合成化学
70. 有機合成化学	70. 有機合成化学	70. 有機合成化学

JAMP (会員400社超)
✓ chemSHERPA提供



2025年10月29日に
改組



565社・団体*

<https://cmp-consortium.com/>
お問合せ先: cmp-office@jemai.or.jp

*2026年1月時点 8



©2026 Copyright. All Rights Reserved. CMP Consortium

【出典】令和7年度第1回化学物質評価研究機構研究発表会 産業構造審議会 保安・消費生活用製品安全分科会 第3回化学物質政策小委員会 合同会議（令和8年3月4日）資料8（抜粋）

CMP構築スケジュール

2026年2月現在

FY	2025年度				2026年度				2027年度				
	4-6	7-9	10-12	1-3	4-6	7-9	10-12	1-3	4-6	7-9	10-12	1-3	
マイルストーン	JAMP CMPタスクフォース				CMPコンソーシアム								
CMP 開発・展開 計画	システム開発				総合 テスト	大規模実証				リリース/運用開始 (Ph1)			
CMP 海外展開	東南アジア展開調査				タイ・インドネシア展開準備				海外展開開始				
RMP 企画・開発	RMP (静脈) 業務要件定義				RMP実現性検証				RMP基本設計				
					PH2 要件定義	PH2 開発				PH2 テスト	リリース/運用開始 (Ph2)		

- ✓ 全体スケジュール：2026年3月末から大規模実証（400社目標）を開始し、2026年9月に本番利用開始予定
- ✓ 普及展開：中小企業の巻き込みについて、一定の売上規模以下の企業の利用料を無償化する仕組みを検討中
- ✓ 海外展開：タイ・インドネシア展開準備に向けた調査を2026年度に実施予定

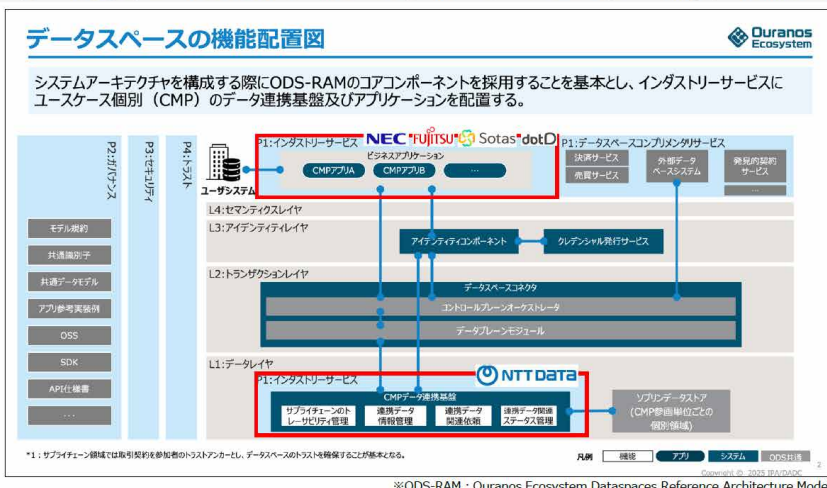


©2026 Copyright. All Rights Reserved. CMP Consortium

【出典】令和7年度第1回化学物質評価研究機構研究発表会 産業構造審議会 保安・消費生活用製品安全分科会 第3回化学物質政策小委員会 合同会議（令和8年3月4日）資料8（抜粋）

ウラノス・エコシステムとの連携

✓ ウラノス・エコシステム及びODS-RAM※の概念に基づき、基盤ベンダー・アプリベンダーと連携してCMPを開発中



10



©2026 Copyright. All Rights Reserved. CMP Consortium

【出典】令和7年度第1回化学物質審査委員会 産業構造審議会 保安・消費生活用製品安全分科会 第3回化学物質政策小委員会 合同会議 (令和8年3月4日) 資料8 (抜粋)

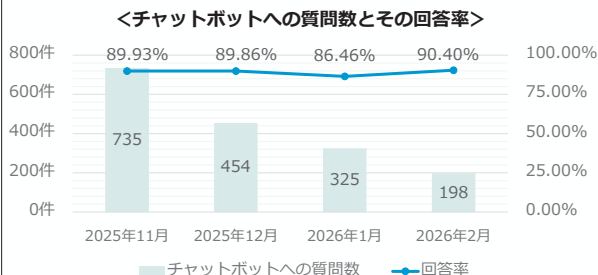
11

チャットボットの導入

- 問合せに係る行政・事業者双方のやりとりの効率化に向け、化学物質管理課が所管する法律のうち、**化審法**、**化管法及びフロン排出抑制法**に関して、令和7年10月15日より、**チャットボットの導入を開始**。
- 化学物質管理行政のデジタル化の推進も見据えながら、引き続き、**周知活動により認知度向上**を図るとともに、利用者の声も踏まえた**ブラッシュアップ**や**対象法令の拡充等により有用性の向上**を図る。

利用状況

- これまでに、チャットボットに対し**1,712件**の質問あり。
- **回答率は約9割**と高い水準で利用者の質問に対応できている。
- **土日休日や夜間・早朝の利用**もあり。



化学物質管理課のホームページ

チャットウィンドウデザイン



■ 化学物質審査規制法等に関するチャットボットを設置いたしました (令和7年10月15日、経産省HP) https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/chatbot.html

12

目次

1. 総論 ～化学物質管理政策をめぐる最近の動向～

2. 各論

- ① 化学物質審査規制法（化審法）の施行状況と動向
- ② 化学物質排出把握管理促進法（化管法）の施行状況と動向
- ③ オゾン層保護法・フロン排出抑制法の施行状況と動向
- ④ 化学兵器禁止法の施行状況と動向
- ⑤ 水銀汚染防止法の施行状況と動向

3. 化学物質管理を巡る環境変化等への対応に向けて

13

化審法の概要 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律

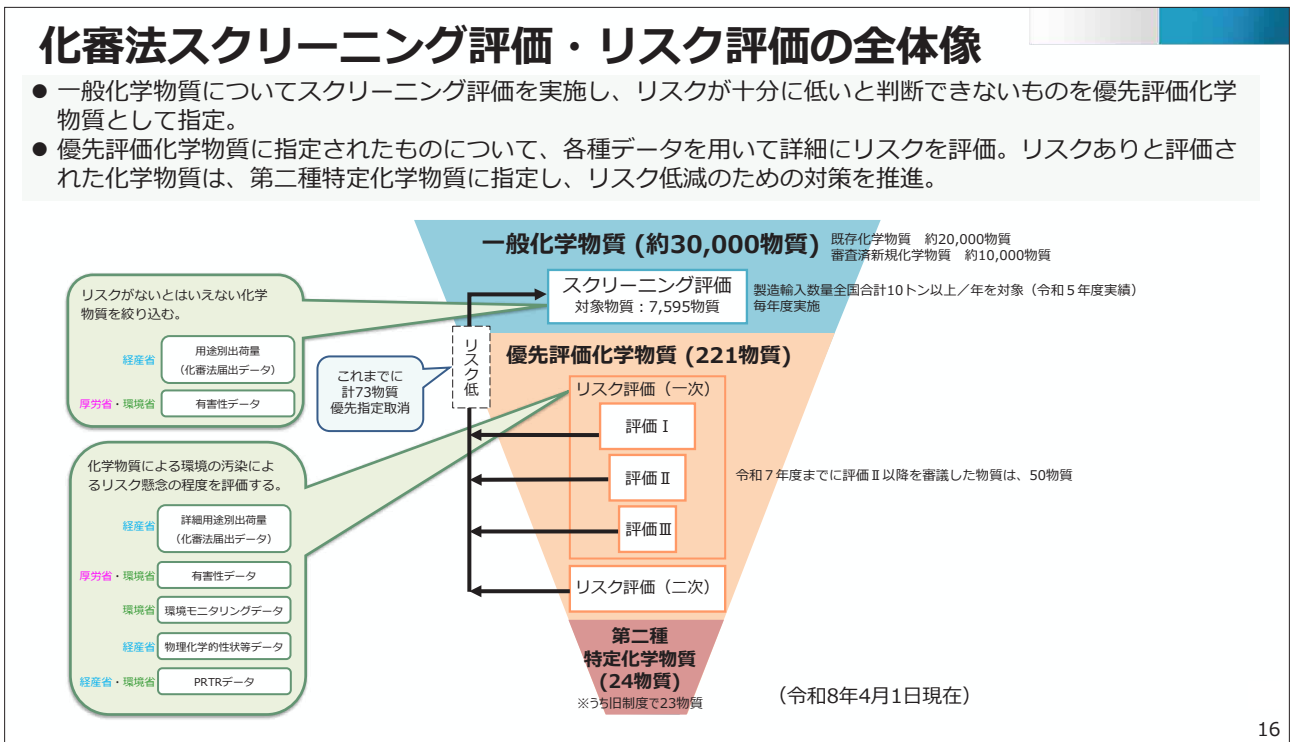
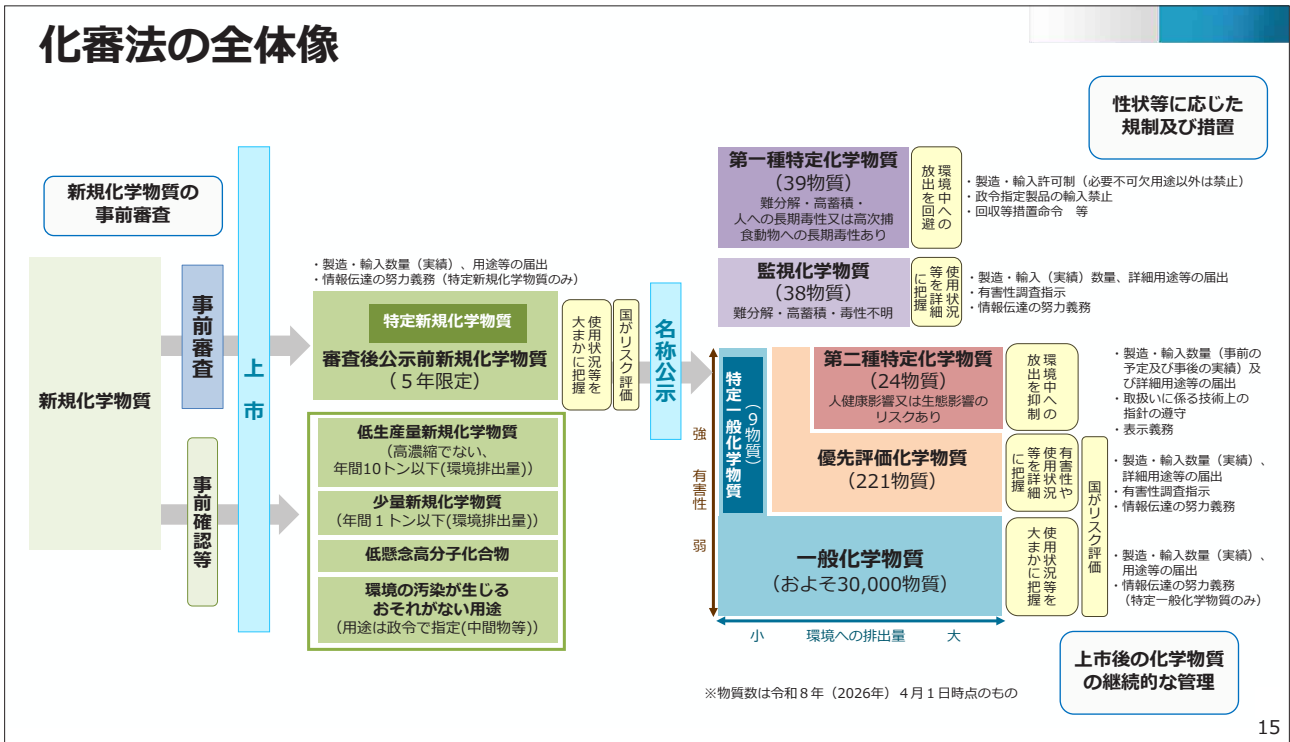
目的

- 人の健康を損なうおそれ又は動植物の生息・生育に支障を及ぼすおそれがある化学物質による環境の汚染を防止。

概要

- 新規化学物質の事前審査
→新たに製造・輸入される化学物質に対する事前審査制度
- 上市後の化学物質の継続的な管理措置
→製造・輸入数量の把握（事後届出）、有害性情報の報告等に基づくリスク評価・管理
- 化学物質の性状等（分解性、蓄積性、毒性、環境中での残留状況）に応じた規制及び措置
→性状に応じて「第一種特定化学物質」等の規制対象物質に指定
（製造・輸入数量の把握、製造・輸入許可、使用制限等）

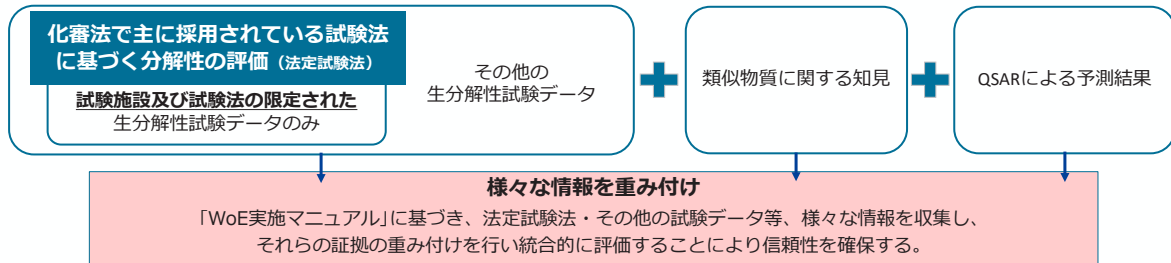
14



化学物質の評価におけるウェイト オブ エビデンス(WoE)の導入 ~生分解性評価~

- 経済産業省では、化学物質の評価の効率化・高度化を図る観点から、法定試験法以外の試験結果、構造類似物質等のデータや情報を活用しつつ、審査・評価を行う試みとして、ウェイト オブ エビデンス (WoE) の導入に取り組んでいる。
- スクリーニング評価・リスク評価における生分解性評価において、試験法に基づく試験結果だけでなく、情報収集で得られた分解性に関する多様な情報 (試験法及び試験施設による限定なし。QSARによる予測結果を含む。) も活用すべく、それらの品質評価を行った上で情報を統合し、総合的な分解性評価を実施する手法を開発 (2025年1月)。
- これまでに、4つの優先評価化学物質 (# 213、# 230、# 281、# 282) の分解性の評価を実施。

スクリーニング評価・リスク評価のためのWoEを用いた分解性の評価



令和6年度第9回薬事審議会化学物質安全対策部会化学物質調査会令和6年度化学物質審議会第4回安全対策部会第251回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会 (令和7年1月14日)
https://www.meti.go.jp/shingikai/kagakubusshitsu/anzen_taisaku/pdf/2024_04_01_01.pdf

17

化学物質の評価におけるウェイト オブ エビデンス(WoE)の導入 ~生分解性評価~

- 生分解性評価のウェイト オブ エビデンスの実施にあたり、今後も、事業者の保有する情報も活用すべく、経済産業省ホームページに、①実施マニュアル、②それに基づくこれまでの評価結果、③事業者から特に情報提供いただきたい物質の一覧を経済産業省ホームページに掲載。



スクリーニング評価・リスク評価における生分解性評価のための Weight of Evidence の実施について

※積極的に情報提供いただきたい物質リストを掲載しました。(令和7年6月)

令和7年5月
 産業保安・安全グループ
 化学物質管理課 化学物質安全室

「化審法リスク評価における生分解性評価のためのWeight of Evidenceの実施マニュアル」について

WoEを用いた生分解性評価を実施するにあたり、「化審法リスク評価における生分解性評価のためのWeight of Evidenceの実施マニュアル」を策定しました。当該マニュアルでは、WoEを導入した評価の透明性の向上を図るため、有用な情報源・ツール、事業的な評価の進め方、評価において考慮すべき観点等をまとめています。

● 化審法リスク評価における生分解性評価のためのweight of Evidenceの実施マニュアル (PDF形式: 1.1027Kb) [A1](#)

<積極的に情報提供を呼びかけている物質の一覧>

優先評価化学物質 優先番号	物質名称
133	(E)-4-(2,6,6-トリメチルシクロヘキサ-1-エン-1-イル)ブタ-3-エン-2-オン
138	ジナトリウム2,2'-ビス(シロキシ)5-(4-エチルフェニル-6-アクリル-1,3,5-トリオキシ-2-イソプロピル)ベンゼンスルホン酸 (商品名: フルボスチ) (2024年6月)
151	アクリルヘキサアクリート
153	N = 13 - (シキルアミン) プレパル) ステアルアミド
179	カリウムジステアリンジステアリン酸エステル
185	ヘキサメチルシロキシペンタアクリート
187	4,6,6,7,8,8-ヘキサメチルフル-1,3,4,6,7,8-ヘキサヒドロシクロヘキサ [g] イソクロソ
196	アクリルヘキサアクリート
205	シキルアミンシクサクリン-2-オン
206	1,4-ジメチルシクロヘキサタン-5,1,7-ジオン
207	3-(1,3-ヘンジオキサソール-5-イル)-2-ステアルプロピル
208	5-ヘプタフルオロペンタ-2-エン
優先評価化学物質の調査実施を行った物質 優先番号	優先評価の物質名称
99	N,N-ジメチルプロピル-1,3-ジイルシロシン
129	1,2-ジシロキシナフト (メチル) ベンゼン
194	1,1,1,3,3,3-ヘキサフルオロシロラン

【出典】スクリーニング評価・リスク評価における生分解性評価のための Weight of Evidence の実施について
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/woe_biodegradation.html

18

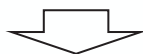
第一種特定化学物質について

第一種特定化学物質とは

- 難分解、高蓄積、人への長期毒性又は高次捕食動物への長期毒性のおそれがある物質で、政令で指定している39物質群。

第一種特定化学物質の規制内容

- 第一種特定化学物質の製造・輸入の許可制。
(試験研究用途や必要不可欠用途 (Essential Use) 以外での製造・輸入は原則禁止)
- 試験研究用途や必要不可欠用途以外での第一種特定化学物質の使用禁止。
- 政令で指定している第一種特定化学物質の使用製品の輸入禁止。
- 法令に違反した製造者、輸入者、使用者に対する回収措置等の命令、罰則。



難分解性、高蓄積、長期毒性を有する化学物質の
環境中への放出を回避

19

第一種特定化学物質の動向について

- スtockホルム条約第10回締約国会議 (令和4年6月開催) 及び第12回締約国会議 (令和7年4~5月) において、**「PFHxS関連物質」、「クロルピリホス」、「中鎖塩素化パラフィン」並びに「長鎖PFCAとその塩及び長鎖PFCA関連物質」を新たに廃絶対象物質とすることを採択。**
- これらについて、**化審法の第一種特定化学物質への指定と、化審法に基づく措置に係る審議**※を行った。

※薬事審議会化学物質安全対策部会化学物質調査会 化学物質審議会審査部会 / 安全対策部会 中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会

化審法における措置

① 第一種特定化学物質への指定

- ・ PFHxS関連物質
- ・ クロルピリホス
- ・ 中鎖塩素化パラフィン
- ・ 長鎖PFCAとその塩及び長鎖PFCA関連物質 (長鎖PFCA等)

③ PFHxS関連物質、長鎖PFCA等が使用されている場合に取扱い等に係る基準に従わなければならない製品の指定

- ・ 消火器、消火器用消火薬剤及び泡消火薬剤

② 輸入を禁止する製品の指定

- ・ PFHxS関連物質 : 「消火器、消火器用消火薬剤及び泡消火薬剤」、「金属の加工に使用するエッチング剤」など10製品
- ・ クロルピリホス : 「木材用の防虫剤」
- ・ 中鎖塩素化パラフィン : 「樹脂用の可塑剤」、「塗料」など6製品
- ・ 長鎖PFCA等 : 「業務用写真フィルム」、「潤滑油」、「消火器、消火器用消火薬剤及び泡消火薬剤」など10製品

20

(参考) 第一種特定化学物質の指定に向けたスケジュール

・PFHxS関連物質

令和 7 年 9 月	化審法施行令の一部を改正する政令案に関するパブリックコメント、TBT通報
令和 7 年 12 月 17 日	改正政令公布
令和 8 年 1 月 13 日	3 省合同会合におけるPFHxS関連物質の指定に係る審議
令和 8 年 1 月下旬	PFHxS関連物質の指定に係る省令に関するパブリックコメント
令和 8 年 4 月 17 日	PFHxS関連物質の指定に係る省令の公布
令和 8 年 6 月 17 日	改正政令、PFHxS関連物質の指定に係る省令の施行

・クロルピリホス、中鎖塩素化パラフィン並びに長鎖PFCA等

令和 7 年 6 月 20 日	3 省合同会合における第一種特定化学物質の指定に係る審議
令和 7 年 9 月 19 日	3 省合同会合における輸入禁止製品等に係る審議
令和 7 年 10 月	措置内容に関するパブリックコメント
令和 7 年 12 月	TBT通報
令和 8 年 3 月 20 日～	化審法施行令の一部を改正する政令案に関するパブリックコメント
令和 8 年 5 月 22 日	改正政令公布、3 省合同会合における長鎖PFCA関連物質の指定に係る審議
令和 8 年夏以降	長鎖PFCA関連物質の指定に係る省令の公布
令和 8 年 11 月 22 日	改正政令、長鎖PFCA関連物質の指定に係る省令の施行

21

産業構造審議会制度構築ワーキンググループ[※]での議論と対応について

- 平成29年改正法の附則第 5 条に、施行後 5 年を経過した場合において、改正後の化審法の施行の状況を勘案し、必要があると認めるときは同法について検討を加え、その結果に基づいて必要な措置を講ずるものとする旨、規定されたことを受け、令和 6 年 10 月から環境省及び厚生労働省との合同審議会を開催（計 4 回）。
- 検討結果をとりまとめた報告書を、令和 7 年 7 月 22 日に公開。

開催実績と主な議題

第 1 回：令和 6 年 10 月 23 日

- ・ 化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律施行状況の点検
- ・ 平成29年の化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律の改正の概要とこれまでの実績について

第 2 回：令和 6 年 11 月 8 日

- ・ 化学物質審査規制法の施行状況及び化学物質管理の動向を踏まえた検討事項について

第 3 回：令和 7 年 3 月 10 日

- ・ 化学物質審査規制法の施行状況及び最近の動向を踏まえた、今後の化学物質管理の在り方について

第 4 回：令和 7 年 6 月 13 日

- ・ 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

※第 1 回と第 2 回は、産業構造審議会 保安・消費生活用製品安全分科会 化学物質政策小委員会 制度構築ワーキンググループ、中央環境審議会 環境保健部会 化学物質対策小委員会との合同開催。

22

「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（報告書）」との関連

第一章 検討の背景

第二章 平成29年改正化審法の施行状況等

1. 平成29年改正化審法の概要

2. 平成29年改正化審法の施行状況等及びレビュー結果について

第三章 主な検討課題について

1. 現行制度の効率化・高度化に関する事項

1-1 リスク評価

1-2 審査特例制度等

1-3 ライフサイクル全体を念頭にした循環経済への対応

2. その他の化学物質管理に関する事項

2-1 諸課題への対応

2-2 持続可能な化学物質管理

2-3 パートナーシップや能力開発

第四章 今後の検討

出典) 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 (令和7年7月22日)
https://www.meti.go.jp/shingikai/sankoshin/hoan_shohi/chemicals/system_building/pdf/20250722_1.pdf

1-1.オンライン手続の効率化
 (「GビスID」の採用)

1-2.新規化学物質の審査における
 取組 (特例制度の合理化等)

1-3.リスク評価・NAMsに関する
 3省有識者検討会

1-4.資源循環と化学物質管理

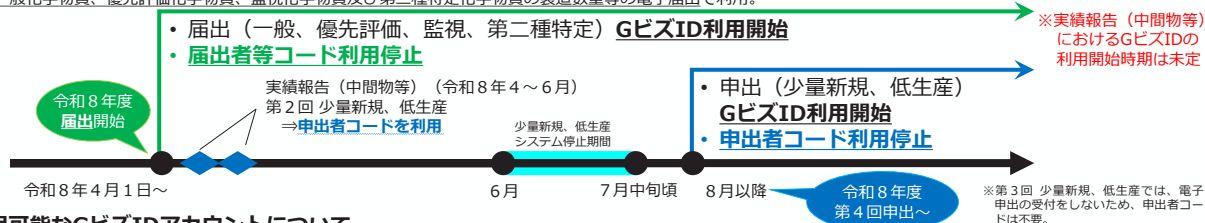
1-2.新規化学物質の審査における
 取組 (特例制度の合理化等)

23

オンライン手続の効率化 (「GビスID」の採用)

- 令和8年度から、行政手続の更なる効率化を図るべく、「**申出者コード**」¹及び「**届出者等コード**」²は**利用停止**し、現在様々な行政サービスでも活用されている「**GビスID**」を採用。事業者の準備を促すべくセミナー等で周知。

- 少量新規化学物質及び低生産量新規化学物質の製造・輸入数量の電子申出及び中間物等新規化学物質の製造・輸入実績報告書の電子提出で利用。
- 一般化学物質、優先評価化学物質、監視化学物質及び第二種特定化学物質の製造数量等の電子届出で利用。



利用可能なGビスIDアカウントについて

	アカウント種別	利用可能な行政サービス	アカウントの作成方法	申出・届出での利用可否
法人代表者 個人事業主	プライム	すべて	審査を行って作成	○
従業員	メンバー	制限あり (小)	プライムによる作成	○
誰でも	エントリー	制限あり (大)	審査を行わず作成	×

○有害性情報の報告 (法第41条) については、令和8年5月29日よりe-Gov電子申請の利用が可能となっている。

(参考) デジタル庁「GビスID」 <https://gbiz-id.go.jp/top/>

24

オンライン手続の効率化 (有害性情報報告省令・運用通知の改正)

- 化審法第41条に基づく有害性情報報告の提出は書面に限定されていたところ、オンライン手続の効率化を図るべく、5月29日より、GビズIDの活用及びe-Govを経由した電子的な受領も可能とした。これに伴い、省令改正により**報告様式の記載内容の明確化**等を行った。
- また、運用通知改正により、努力義務の報告に際しては「**有害性情報の内容を示す資料 (試験報告書の概要まとめ)**」について、**添付の省略を可**とした。(報告義務、努力義務の対象とはならない報告 (任意報告) についても、同様に**添付の省略を可**とした。)

<現行様式>

<改正様式>

25

新規化学物質の審査における取組 (特例制度の合理化等)

- 審査特例制度 (うち、少量新規化学物質確認制度 (「少量新規」) 及び低生産量新規化学物質確認制度 (「低生産」)) については、制度のレビュー結果や事業者の要望等を踏まえ、**(1)オンライン申請の原則化、(2)申出の受付期間・頻度の合理化、(3)用途証明書の提出を促す取組、(4)オンラインを活用した事後監視の高度化**に取り組む。
- また、「より安全な代替」を開発するインセンティブの観点で、該当物質の**名称公示期間を延長**する。

審査特例制度の合理化等の取組

- 少量新規、低生産の申出のオンライン申請の原則化 (省令改正) 【令和11年~】**
- 申出受付期間・頻度の合理化**
 - 少量新規の受付期間を延長 **【令和8年~】**
 - 受付頻度の見直し (少量新規: 9回→7回、低生産: 12回→10回) **【令和8年~】**
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/shinki/R8shoryonittei_251017.pdf
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/shinki/R8teiseisannittei_251017.pdf
- 用途証明書の提出を促す取組**
 - 用途証明書を出さない場合の確認のみを対象とした受付回を廃止 **【令和8年~】**
 - 川下ユーザーに対する、用途証明書の提出への理解を深める周知 **【令和7年~】**
 - 用途証明に関する手続の簡素化 (証明書の押印廃止、用途追加の一部廃止) **【令和8年~】**
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/shinki/youtoutuika_20260331.pdf
- オンラインを活用した事後監視の高度化**
 - オンラインを活用した報告徴収の実施 (少量新規・低生産) **【令和8年度~】**

名称公示期間の延長

(現状)
新規化学物質の届出を行い、審査の判定を受けた後、一般化学物質に該当するものは、**判定通知から5年経過後に名称を公示**。

(今後)
安全との判定 (ヒト健康への疑いなし・生態影響なし) を受けた新規化学物質について、名称公示までの期間を**10年**に延長。
【令和8年度~ (予定)】

26

化審法の審査特例制度（少量新規／低生産量新規）における「用途証明書」の提出のお願い

化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律（化審法）における新規化学物質の審査特例制度の適切な運用においては、**環境排出量を把握することが重要**です。このため、**新規化学物質を含む化学品を購入し使用する事業者（使用者）の皆様におかれましては、「用途証明書」の提出について最大限ご協力いただけますようお願い申し上げます。**

【化審法における審査特例制度とは？】

化審法では、新規化学物質を製造・輸入する事業者に対して、当該化学物質の性状に関するデータを事前に国（厚生労働省・経済産業省・環境省）に届け出ることを義務づけ、国はこれらのデータを踏まえて審査を行い、その結果に応じた規制を行っています（事前審査制度）。

一方、環境排出量が小さいことが見込まれる製造・輸入数量や用途の場合は、**事業者が備えるべきデータを不要（少量新規）又は一部免除（低生産量新規）とする審査特例制度が認められています。**

【審査特例制度の要件】

審査特例制度の種類	個社数量上限	全国数量上限※1	届出※2で提出が必要な試験結果
少量新規 (化審法第3条第1項第5号)	1トン (製造・輸入数量)	1トン (環境排出量)	-
低生産量新規 (化審法第5条4項)	10トン (製造・輸入数量)	10トン (環境排出量)	難分解かつ高濃縮性ではない

※1 複数の事業者が同一物質について申出を行い、各事業者の環境排出量の合計が全国数量上限を超える場合は、環境排出量の合計が全国数量上限に収まるように各事業者で製造・輸入ができる数量（確認数量）を調整させていただくことがあります（数量調整）。

※2 低生産量新規では、確認を受けるための申出を行う前に、分解性と濃縮性の試験を実施し、難分解かつ低濃縮性である旨の判定を受ける必要があります。

【環境排出量の算出方法】

環境排出量 = 申出事業者の製造又は輸入予定数量 × 用途毎に定められた環境排出係数

用途は、使用者から提出していただく「用途証明書」から把握します。

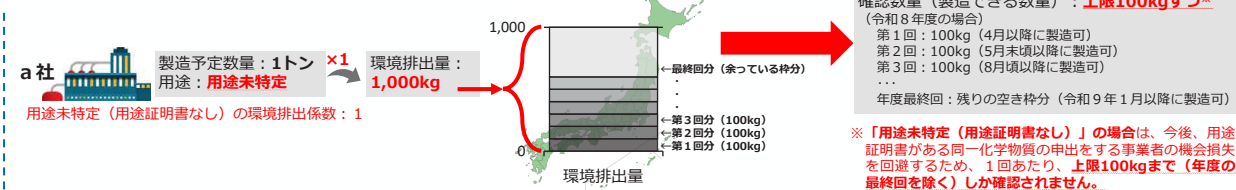
用途未特定（用途証明書なし）の環境排出係数：1

27

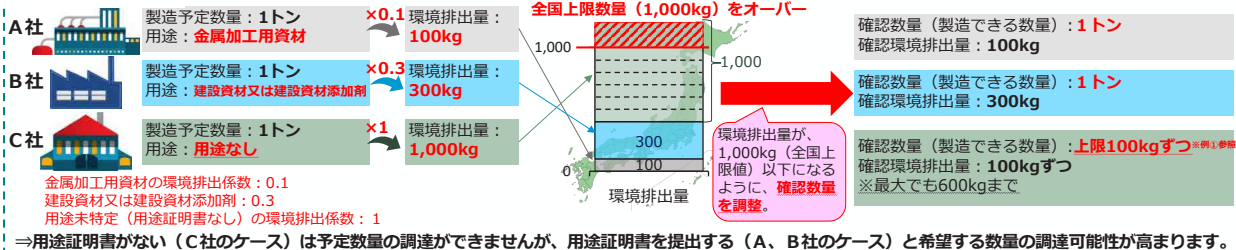
化審法の審査特例制度（少量新規／低生産量新規）における「用途証明書」の提出のお願い

「用途証明書」の提出がない場合、申出者は予定している数量の製造・輸入ができない（＝使用者の皆様は新規化学物質を予定どおり調達できない）可能性があります。

【少量新規の例①】



【少量新規の例②】



28

(参考) 用途証明書の記載例

受付コード: (※1)

用 途 証 明 書

令和 年 月 日

〇〇〇株式会社
代表取締役社長 〇〇 〇〇 郎 (※2)

△△△株式会社
代表取締役社長 △△ △△ (※3)
住所

今般、貴社から譲渡予定の下記1. の化学物質 (又は製品) を、下記2. に記載の用途のみ使用することについて、下記のとおり確認する。

記

1. 新規化学物質 (又は製品) の名称 (※4)

2. 1. の新規化学物質 (又は製品) の用途番号及び用途分類 (※5)
用途番号:
用途分類:

3. 貴社から当該新規化学物質の用途に関して説明や資料提出を求められた際には、貴社に協力する。

使用者に記入いただく箇所は、左図の赤枠部分 (下記※2～5) の4カ所のみです。

- (※1) 書面申出をする場合に、申出者 (製造・輸入者) にて記入ください。
(受付コード下4桁の申出番号のみではなく、法人番号からご記載ください。)
- (※2) **申出者 (製造・輸入者) の名称、部署、役職、氏名** を記載してください。代表者でなくても、当該新規化学物質の譲渡及び本文書の記載内容に関し責任を有する者 (部長等) であれば問題ございません。
- (※3) **使用者の名称、部署、役職、氏名** を記載してください。会社の代表者でなくても、当該新規化学物質の使用及び本文書の記載内容に関し責任を有する者 (部長等) であれば問題ございません。
- (※4) **新規化学物質の名称** (詳細は、製造・輸入者に御確認ください) を記載してください。製品名でも問題ございません。
- (※5) **用途番号と用途分類** を記載してください。用途については、**一般化した一覧** にしておりますが、判断に迷う場合は、**弊省HP** 又は **NITEのHP** もご参照ください。
なお、複数の用途を予定している場合は、**予定している用途を全て** 記載してください。

【使用者の皆様への注意】

用途証明書に記載いただいた用途以外での使用はしないでください。
万一、記載いただいた用途以外での使用が発覚した場合は、**申出者 (製造・輸入者) が違反に問われてしまい、製造・輸入ができなくなる可能性がございます。**

29

(参考) メールの記載例

受付コード: (※1)

発出先: △△ △△ (△△△△.co.jp)
送信日時: 年 月 日
宛先: 〇〇 〇〇 (〇〇〇〇.co.jp)
件名: 用途証明書の送付について

〇〇〇株式会社
代表取締役社長 〇〇 〇〇 郎 (※2)
電子メールアドレス: 〇〇〇〇.co.jp

今般、貴社から譲渡予定の下記1. の化学物質 (又は商品) を、下記2. に記載の用途のみ使用することについて、下記のとおり確認する。

記

1. 新規化学物質 (又は商品) の名称 (※4)

2. 1. の新規化学物質 (又は商品) の用途番号及び用途分類 (※5)
用途番号:
用途分類:

3. 貴社から当該新規化学物質の用途に関して説明や資料提出を求められた際には、貴社に協力する。

△△△株式会社
代表取締役社長 △△ △△ (※3)
住所
電子メールアドレス △△△△.co.jp

使用者に記入いただく箇所は、左図の赤枠部分 (下記※2～5) の4カ所のみです。

- (※1) 書面申出をする場合に、申出者 (製造・輸入者) にて記入ください。
(受付コード下4桁の申出番号のみではなく、法人番号からご記載ください。)
- (※2) **申出者 (製造・輸入者) の名称、部署、役職、氏名** を記載してください。代表者でなくても、当該新規化学物質の譲渡及び本文書の記載内容に関し責任を有する者 (部長等) であれば問題ございません。
- (※3) **使用者の名称、部署、役職、氏名** を記載してください。会社の代表者でなくても、当該新規化学物質の使用及び本文書の記載内容に関し責任を有する者 (部長等) であれば問題ございません。
- (※4) **新規化学物質の名称** (詳細は、製造・輸入者に御確認ください) を記載してください。製品名でも問題ございません。
- (※5) **用途番号と用途分類** を記載してください。用途については、**一般化した一覧** にしておりますが、判断に迷う場合は、**弊省HP** 又は **NITEのHP** もご参照ください。
なお、複数の用途を予定している場合は、**予定している用途を全て** 記載してください。

【使用者の皆様への注意】

用途証明書に記載いただいた用途以外での使用はしないでください。
万一、記載いただいた用途以外での使用が発覚した場合は、**申出者 (製造・輸入者) が違反に問われてしまい、製造・輸入ができなくなる可能性がございます。**

30

リスク評価・NAMsに関する3省有識者検討会

- 産業構造審議会制度構築ワーキンググループ（厚生労働省と環境省の審議会との合同開催）で取りまとめられた報告書（令和7年7月22日公表）で示された主な検討課題のうち、**「①新たな評価手法（NAMs）の活用」、「②リスク評価の効率化・実効性の向上」については、別途検討の場を立ち上げてはどうかと示されている。**
- これを受け、化審法に関する審議会の委員等からなる3省合同の有識者検討会において、化審法におけるNAMsの考え方やリスク評価における課題の整理等を行った。今年度の議論を今後の検討の土台としていく。

検討会概要

(1) 開催形式：非公開

(2) 開催日程・議題：

第1回：令和8年2月9日

- ・ 化審法における新しい評価手法（NAMs）の考え方について
- ・ 化審法におけるリスク評価の課題について

第2回：令和8年2月19日

- ・ 化審法におけるリスク評価の課題について

第3回：令和8年3月4日

- ・ 化審法における新しい評価手法（NAMs）の言語化（案）
- ・ 化審法におけるリスク評価の課題について

(3) 委員構成：経産省関係委員

- ・ 赤堀 有美 一般財団法人 化学物質評価研究機構 安全性評価技術研究所 研究企画部 次長
- ・ 岩崎 雄一 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 ネイチャー・ポジティブ技術実装研究センター 主任研究員
- ・ 小野 恭子 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 サークュラーテクノロジー実装研究センター 副研究センター長
- ・ 蒲生 昌志 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 安全科学研究部門 研究部門長
- ・ 金原 和秀 国立大学法人 静岡大学 理事（研究・社会産学連携・人事担当） / 副学長
- ・ 須方 督夫 一般社団法人 日本化学工業協会 常務理事
- ・ 竹下 潤一 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 安全科学研究部門 研究グループ長
- ・ 永井 孝志 国立研究開発法人 農業・食品産業技術総合研究機構 農業環境研究部門 土壌環境管理研究領域 農業環境情報グループ 上級研究員

ほか、厚生労働省及び環境省関係委員

31

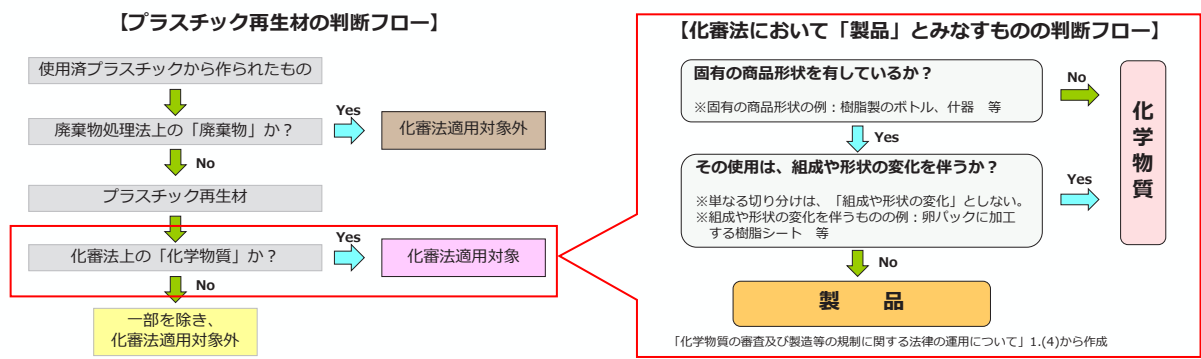
化審法における新しい評価手法（NAMs）の言語化（案）

- 化審法におけるNAMsとは、**化審法における化学物質の有害性評価又はリスク評価に資する情報を提供しうる、科学的に妥当な新しい技術・手法・アプローチのすべて**を指す。なお、国際動向を鑑みて、3R（動物実験のReplacement（代替）、Reduction（削減）、Refinement（改善））についても配慮する。
- 化審法におけるNAMs導入にあたり、**科学的妥当性を大前提としつつ、新規化学物質審査制度については試験の実施から判定・確認までのあらゆる負担の低減、上市後の化学物質のリスク評価制度については迅速化を含めたより合理的な評価と負担の低減を目指す。**
- ただし、「新規化学物質審査制度」、「上市後の化学物質のリスク評価制度」いずれにおいても、**個別事例も含め国内外の動向も視野に入れつつ、不確実性を踏まえた活用可能性を見極めた後に、根拠とする規定や試験方法の共通性に留意しながら、運用上のルールを整備した上で段階的に導入することとする。**また、導入後においても**実績の蓄積・検証を踏まえて柔軟に見直すこととする。**

32

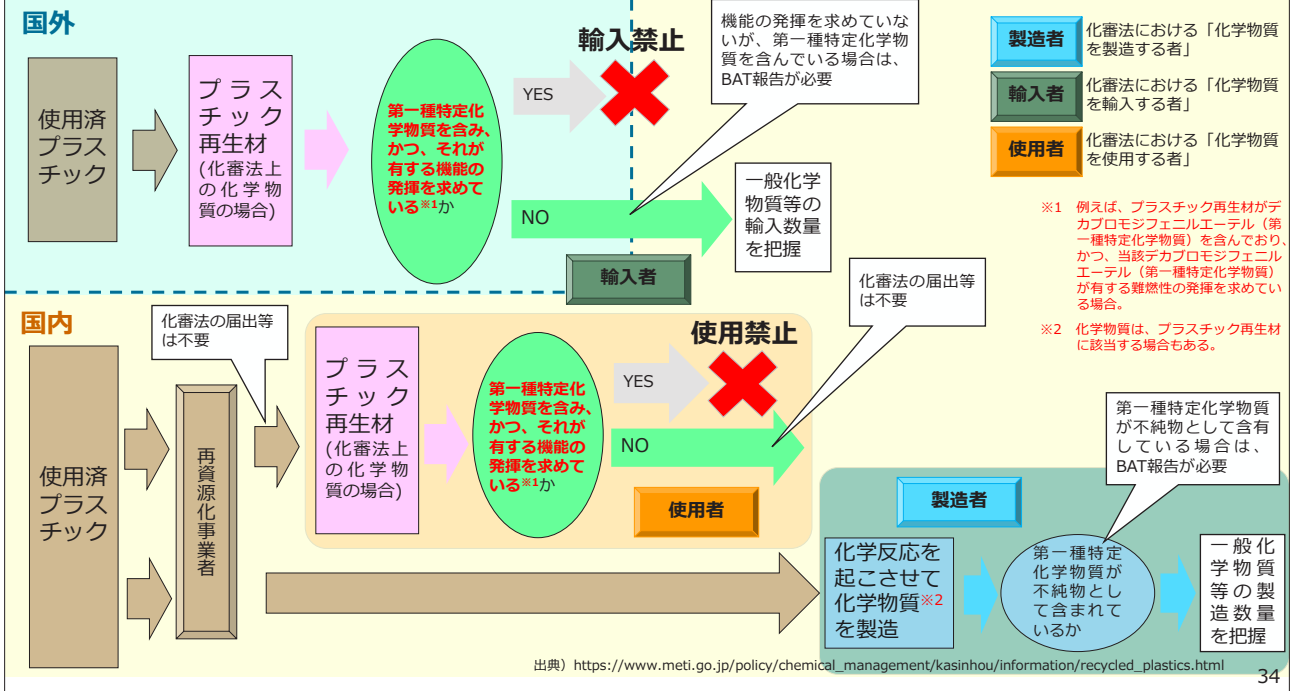
資源循環と化学物質管理 ~「プラスチック再生材」における化審法の適用について~

- 使用済プラスチックから作られたものの化審法の適用を考える際は、**それが廃棄物処理法上の廃棄物に該当するか判断する必要がある。廃棄物に該当する場合は、化審法を始めとする化学物質関連規制の対象外（廃棄物処理法で規制）**となる。
- 一方、使用済プラスチックから作られたものが廃棄物処理法上の廃棄物でないならば、それはいわゆる「プラスチック再生材」であり、それが化審法上の「化学物質」と「製品」のいずれに該当するか判断される。
 - ✓ **化審法上の化学物質に該当する場合は**、その規制区分に応じて、化審法の規制が適用される。
 - ✓ 一方、**化審法上の製品に該当する場合は**、**化審法の政令で指定されている製品（輸入禁止製品等）に該当する場合は除き、化審法の規制の対象とはならない。**



出典) https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/recycled_plastics.html 33

資源循環と化学物質管理 ~プラスチック再生材が化審法上の化学物質に該当する場合の規制の適用~



出典) https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/recycled_plastics.html 34

資源循環と化学物質管理 ～不純物として含まれる第一種特定化学物質について（今後の方向性）～

- 使用済プラスチックの中には、規制される前に使われていた第一種特定化学物質を含有しているものもあり、そのケミカルリサイクルによって得られた化合物においても、当該第一種特定化学物質が不純物として含まれる可能性がある。
- 審議会での議論を踏まえ、今後の方向性が示されたところ。資源循環等の実態も踏まえつつ、検討を進めていく。

今後の方向性

- ① 海外において第一種特定化学物質に相当する化学物質が不純物として含まれている場合に基準値で管理していることも参考に、これまでBATで管理している第一種特定化学物質のうち、国際的に値が設定されており管理上限値を示しているPCBなどの物質については、不純物の閾値を設定して、適切な管理を実施してはどうか。
- ② なお、欧州POPs規則の非意図的な微量不純物に関する基準値を分析可能性やリスク（ヒト健康や環境への悪影響の可能性を判断するための指標）と比較した検討資料もあることから、このような既存の情報も参考に、第一種特定化学物質ごとの不純物の閾値を検討してはどうか。

出典) 第3回 産業構造審議会 保安・消費生活用製品安全分科会 化学物質政策小委員会 制度構築ワーキンググループ (令和7年3月10日) 資料1-2 より経済産業省作成

35

資源循環と化学物質管理 ～運用通知の改正～

- 産業構造審議会制度構築ワーキンググループでの議論及び報告書を踏まえ、不純物の取扱いを明確化するため、運用通知を改正（令和7年10月6日付）。
- 併せて、化学物質の区分の仕方や用語の定義等を明確化するなどの改正も行い、今後、段階的に施行。

主な改正事項

- ① 第一種特定化学物質に該当する化学物質が副生成物として微量に含まれる場合に限定して取扱いを規定していたが、不純物として微量含まれる場合に適用可能とした。 → ① 令和7年10月6日施行
 - ② 運用通知全体に関わる規定を集約した『1 共通事項』という見出しを新たに立てた。
 - ③ 無水和物と水和物の取扱い及び有機高分子化合物の用語の定義を明確化した。
 - ④ これまで「新規化学物質として取り扱わないもの」としていた化学物質を、「既存化学物質等」として取り扱うことに変更した。
 - ⑤ 既存化学物質等の定義を変更した。 → ⑤ 令和9年4月1日施行
- ②～④ 令和8年4月1日施行

36

資源循環と化学物質管理

～不純物として含まれる第一種特定化学物質の取扱いについて～

- 化審法の運用通知の改正により、第一種特定化学物質に関する運用が適用可能な定義を、(副生成物を包含した)“**不純物**”として含まれる場合とし、**プラスチック再生材に不純物として第一種特定化学物質が含有する場合の扱いを明確化した。**
- 令和7年10月6日付で「不純物として第一種特定化学物質を含有する化学物質の取扱いについて(お知らせ)」を改訂。同日から新たな運用として、**国際的に管理に関する値が設定されているもので、我が国でも管理上限値を示したものについては、基準値を設定し、BAT (Best Available Technology/ Techniques) の原則に基づき事業者による適切な管理を行う**こととした。

基準値の設定

HCB { : 200ppm (テトラクロロ無水フタル酸 (TCPA) に含有)
 : 10ppm (TCPAを原料とした顔料又は染料等に含有)
 PCB : 50ppm
 SCCP : 10,000ppm

- 今後もプラスチック再生材等に含まれる第一種特定化学物質について基準値を検討。

BAT報告手続の合理化

- 基準値設定された第一種特定化学物質のBAT報告手続を合理化。
- プラスチック再生材は管理の難易度が相対的に高いことも鑑み、さらに報告手続を合理化。

プラスチック再生材の円滑な利活用の促進

37

新規化学物質の審査における評価手法の合理化について

- 新規化学物質の審査のうち、高分子化合物の場合の評価方法(高分子フロースキーム)について、これまでの**審査の知見を活用し、従来の試験が省略できる場合を明確化し、より簡易な方法(構造及び物性等による評価)で評価できる手法を新たに構築。**
- 新たな手法は令和8年6月1日から導入。本評価手法により、高分子化合物の評価における更なる合理化が図られることが期待。

高分子フロースキームとは

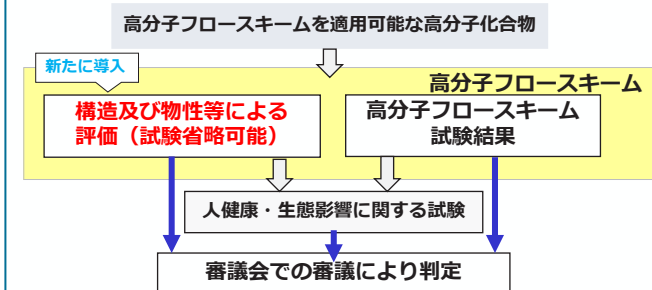
- 化審法における新規化学物質の審査では、事業者が取得した生物を用いた試験から、化学物質の「分解性」「生物蓄積性」「人健康影響」「生態影響」を評価。
- 高分子化合物については、分子サイズが大きく、一般に生体内に取り込まれにくいいため、生物に対する蓄積性や毒性に対する懸念が低いとされていることから、**一定の要件を満たす高分子について、生物を用いない簡易な試験(高分子フロースキーム試験[※])による安全性の評価を可能としている。**

※高分子フロースキーム試験

- 物理化学的安定性及び酸・アルカリに対する溶解性試験
 - 水及び有機溶媒に対する溶解性試験
- 自然的作用による変化を生じにくい化学物質であることを評価

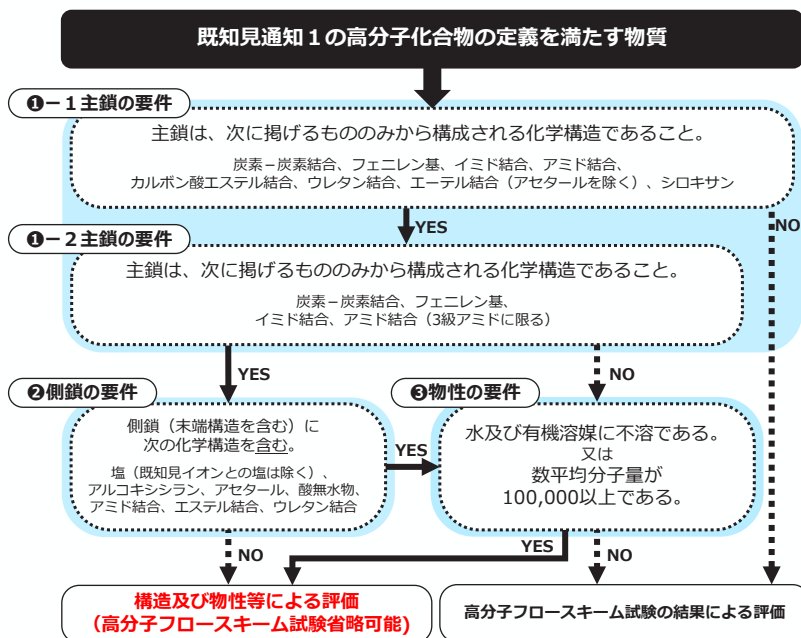
新たに構築した審査方法

- 経産省及びNITEにおいて、平成22年～令和3年の審査データ(約1,500物質)を分析し、**自然的作用による変化を生じにくい高分子化合物群を抽出し、構造(主鎖・側鎖)及び物性の要件の組合せによる、新たな評価手法を提案。**
- 評価手法は、3省合同審議会で審議の上、了承を得た。(令和8年1月)



38

(参考) 高分子フロースキーム合理化 詳細フロー図



39

有害性情報の報告について

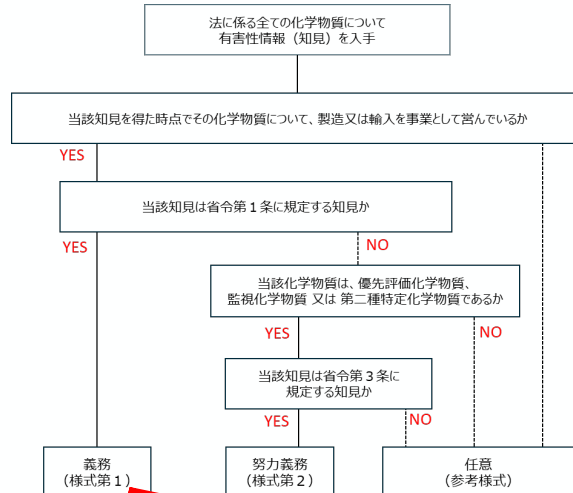
有害性情報報告の概要

- 平成 16 年 4 月より開始された制度。(法第 41 条)
- 国における化学物質の審査や点検に活用できるよう、**化学物質の製造又は輸入を行っている事業者は、その製造又は輸入した化学物質**に関し、難分解性、高蓄積性、人や動植物に対する毒性など、**一定の有害性を示す知見を新たに入手した場合には、当該知見を得た日から 60 日以内に国への報告義務がある。**(ただし、公知になっている情報については報告義務の対象から除外。)
- 第一種特定化学物質以外の「全ての化学物質 (※)」が報告義務の対象。
※新規化学物質 (中間物等以外) も含む。
- 優先評価化学物質、監視化学物質又は第二種特定化学物質の製造又は輸入を行っている事業者は、省令で定める組成、性状等に関する知見を有しているときは、国に報告する努力義務がある。**

有害性情報の報告義務について

https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/todoke/harmful_index.html

有害性情報報告のフロー



義務の場合、知見を得た日から **60 日以内** に提出が必要

40

目次

1. 総論 ～化学物質管理政策をめぐる最近の動向～

2. 各論

- ① 化学物質審査規制法（化審法）の施行状況と動向
- ② 化学物質排出把握管理促進法（化管法）の施行状況と動向
- ③ オゾン層保護法・フロン排出抑制法の施行状況と動向
- ④ 化学兵器禁止法の施行状況と動向
- ⑤ 水銀汚染防止法の施行状況と動向

3. 化学物質管理を巡る環境変化等への対応に向けて


41

化管法の概要

特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律

- 事業者による化学物質の自主的な管理の改善を促進し、環境の保全上の支障を未然に防止することを目的とする。
- 事業者は国が定める化学物質管理指針に留意した化学物質管理を実施するとともに、進捗状況等の情報提供を行う等国民の理解を図るよう努めなければならない。

PRTR制度 (Pollutant Release and Transfer Register)




- 人の健康や生態系に有害なおそれがある化学物質について、環境中への排出量及び廃棄物に含まれた移動量を事業者が把握し、国に報告することを義務づける制度。
- 国は、事業者から届出された排出量・移動量の集計結果及び届出対象外の推計排出量を併せて公表。

<対象化学物質>
第一種指定化学物質（515物質）

<対象事業者>

- 対象業種：政令で指定する24業種を営む事業者
- 従業員数：常用雇用者数21人以上の事業者
- 取扱量等：第一種指定化学物質の年間取扱量が1 t 以上（特定第一種指定化学物質の場合は0.5 t 以上）ある事業所を有する事業者等

SDS制度 (Safety Data Sheet)



- 有害性のおそれのある化学物質及び当該化学物質を含有する製品を、事業者間で譲渡・提供する際に、化学物質の性状及び取扱情報といった、化学物質の適正管理に必要な情報提供を事業者に義務づける制度。

<対象化学物質>
第一種指定化学物質（515物質）及び第二種指定化学物質（134物質）

<対象事業者>

- 対象業種・従業員数・取扱量等に関わらず、指定化学物質及び指定化学物質を1質量%以上（特定第一種指定化学物質の場合は0.1質量%以上）含有する製品を国内において他の事業者に譲渡・提供する事業者

42

PRTR届出排出量・移動量の公表

- 2024年度のPRTR届出排出量・移動量の概要は以下の通り。
- **排出量・移動量は、408千トン。**
 - － 排出量 137千トン － 移動量 271千トン
- 当該年度の届出外排出量（対象外事業者、家庭、移動体）は、193千トンと推計。

PRTR届出排出量・移動量



43

PRTR電子化促進

- 電子政府の促進、事業者の利便性の確保、行政側の事務手続の簡素化のために、電子届出への移行を更に推進させることが重要。
- **電子届出数は29,056件（前年度28,075件）。電子届出率は90.2%（前年度86.4%）に上昇。**

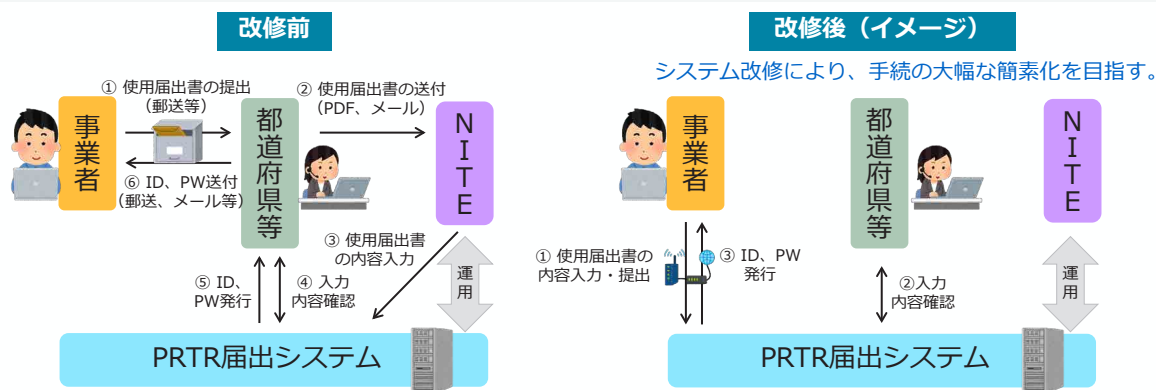
届出方法別届出件数の推移



44

PRTR届出システムの改修

- PRTR電子届出を行うに当たり、事業者は都道府県等に対し、NITEが運営するPRTR届出システムの使用届出書を提出する必要がある。しかしながら、現在この届出は書面でしか行えず、電子化促進の阻害要因になっているとともに、自治体にとっても負担が大きい。
- この手続の簡素化について、地方分権改革における自治体からの改善要望もあったところ、**PRTR届出システム上で使用届出書の提出を可能とするため、システム改修費用を令和8年度予算に計上。**



45

新「PRTRけんさくくん」のリリースについて

- 化管法のPRTR制度において経済産業省が提供している「PRTRけんさくくん」(PRTRデータ分析システム)は、届出の個別事業所のデータを誰でも自由に閲覧できるシステム。
- 現行の「PRTRけんさくくん」の後継ツールとして、Power BIを用いた新「PRTRけんさくくん」のプロトタイプを2025年11月18日に公開。従来のシステム利用時の煩雑さがなくなり、操作性が向上した。

新「PRTRけんさくくん」のPower BI環境



新「PRTRけんさくくん」の特徴

- ソフトウェアやデータのダウンロードが不要。
- 直感的に操作できるわかりやすさ。
- 集計データのグラフでの可視化。
- 2001年度分～のデータを検索可能。
- 排出年度、提出先自治体、届出先大臣、事業者名、事業所名、主たる業種、都道府県、市区町村などで絞り込み可能。

https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/law/prtr/6a.html

※本資料で使用しているPower BIは、米国Microsoft Corporationの米国およびその他の国における登録商標です。

46

GHS (※) 分類情報の更新 / GHSパンフレットの整備

※GHS : 化学品の分類および表示に関する世界調和システム

- 化管法SDS制度の円滑な施行のため、以下を実施。

GHSに基づく政府分類の公表

- GHS分類が未実施又は再分類が必要な物質の分類を実施。2025年度は55の化管法対象物質について分類実施。
- ※2006年からの2年間で約1,500物質（化管法、安衛法、毒劇法対象物質）、その後、2024年度までに約3,400物質のGHS分類を関係省庁等にて実施し、これまでの結果を（独）製品評価技術基盤機構（NITE）HPにて公表。）。

<GHS分類情報(NITEのHP)>

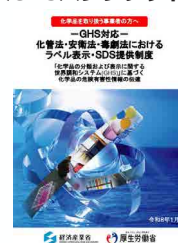


https://www.chem-info.nite.go.jp/chem/ghs/all_fy.html

GHSパンフレットの作成・公表

- GHSパンフレット「-GHS対応-化管法・安衛法・毒劇法におけるラベル表示・SDS提供制度」を経産省と厚労省が共同で作成・各省HPで公表。
- 2025年12月に改正されたJIS Z 7252（GHSに基づく化学品の分類方法）、JIS Z 7253（GHSに基づく化学品の危険有害性の情報伝達方法-ラベル、作業場内の表示及び安全データシート（SDS））の内容を反映。

<GHSパンフレット>



47

【参考】 JIS (JIS Z 7252/Z 7253) 改正の概要

- 日本国内では、GHSに対応する日本産業規格（JIS）を整備、国内SDS関連法令（化管法、安衛法、毒劇法）で引用。
 - ・ JIS Z 7252（GHSに基づく化学品の分類方法）
 - ・ JIS Z 7253（GHSに基づく化学品の危険有害性の情報伝達方法-ラベル、作業場内の表示及び安全データシート（SDS））
- これまでは国連GHS文書第6版に対応したJIS（2019年改訂）が引用されていたが、**国連GHS文書第9版に対応した改正JISが2025年12月25日に公示。改正作業には経産省・厚労省・環境省・NITEも参画。**

主な改正内容

JIS Z 7252 (GHS分類)

- 「爆発物」の全面的見直し。危険物輸送を基にした分類（等級1.1~1.6）から使用場面を考慮した分類（区分1, 2A, 2B, 2C）に変更。
- 「可燃性ガス」の見直し。区分1Aより燃焼性が低い区分として区分1Bを追加。
- 「エアゾール」の見直し。高圧ガスとエアゾールの間位置する区分として「加圧下化学品」を追加。
- 「皮膚腐食性/刺激性」において、非動物試験方法の拡大を背景とし、*in vitro/ex vivo*試験を用いた分類手順を追加。

JIS Z 7253 (情報伝達 (ラベル、SDS))

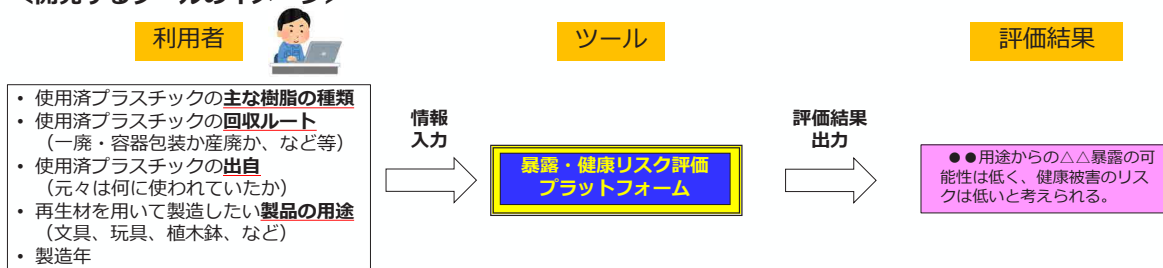
- 附属書A,B,Cの見直し。危険有害性情報や注意書きの変更、それに対応するコード表の更新。また、変更点に関する情報の追記。
- 附属書D (SDS) の見直し。国連GHS文書改訂に伴う変更から、小項目名の見直し、安衛法に関連する見直しなど。

48

プラスチック資源循環のための化学物質リスク評価ツールの開発

- 世界的にプラスチックを始めあらゆる資源の循環利用が加速している中、経済産業省は「成長志向型の資源自律経済戦略 (2023年 3月)」等を踏まえ、制度整備やリサイクル技術への投資支援等を推進。
- 今後、ますますプラスチックリサイクルが活発化されることが見込まれる中、国立研究開発法人産業技術総合研究所においては、使用済プラスチックのうち安全性の懸念が低いものについて、マテリアルリサイクル (再生材としての利用) への転換を支援するため、添加剤 (化学物質) の暴露・健康リスク評価ツールの開発を開始。
- 2025年度は、使用済プラスチック特有の流通ルート等を踏まえた添加剤情報の蓄積・類型化、検索に適した情報整理方法の開発、暴露シナリオ特定に向けた類型化技術の開発等、複数の開発項目について課題を整理し、研究開発要素を特定した。

<開発するツールのイメージ>



49

化学物質管理に取り組む若手研究者の育成 (大学連携推進事業)

- 我が国の化学物質管理施策の更なる高度化に向けて、従来施策の諸課題の解決や国際的な潮流である新たな化学物質管理の実現など、新たな視点での施策立案への要請が高まっている。
- 将来にわたり継続して化学物質管理の高度化を推進していくためには、化学物質管理を担う人材が不可欠。このため、**化学物質管理に係る専門知識はもちろんのこと、政策についても知見を持つ人材の発掘・育成を目的として、大学・公的機関を活用した調査研究を実施。**

事業成果

2021年度から延べ22件を採択し、結果は各分野の学会・論文等で発表。研究者間で成果報告会を実施。

【学会等での受賞】

- 「消費者製品に含まれる化学物質の経皮曝露を含めた包括的リスク評価スキームの構築」
第2回環境化学物質3学会合同大会 SETAC賞 受賞 (2021~2023年度、静岡県立大学)

【2025年度の採択テーマ】 (採択数5件/応募数5件)

- 「非遺伝毒性肝発がん性の核内受容体活性化プロファイルに基づく評価の有用性検討」 静岡県立大学
- 「パッシブサンプリング技術を用いた水環境における化学物質存在状況評価手法の確立」 静岡県立大学
- 「AI技術を用いた魚類における『代謝されにくさ』を決定づける化学物質の特徴探索」 九州工業大学
- 「経口曝露による化学物質の魚体内動態と取込経路組織由来の代謝酵素画分によるin vitro分解との相関」 鹿児島大学
- 「化学物質のライフサイクルを踏まえたPOPsや重金属の環境及び生態への影響評価」 北九州市立大学

50

目次

1. 総論 ～化学物質管理政策をめぐる最近の動向～

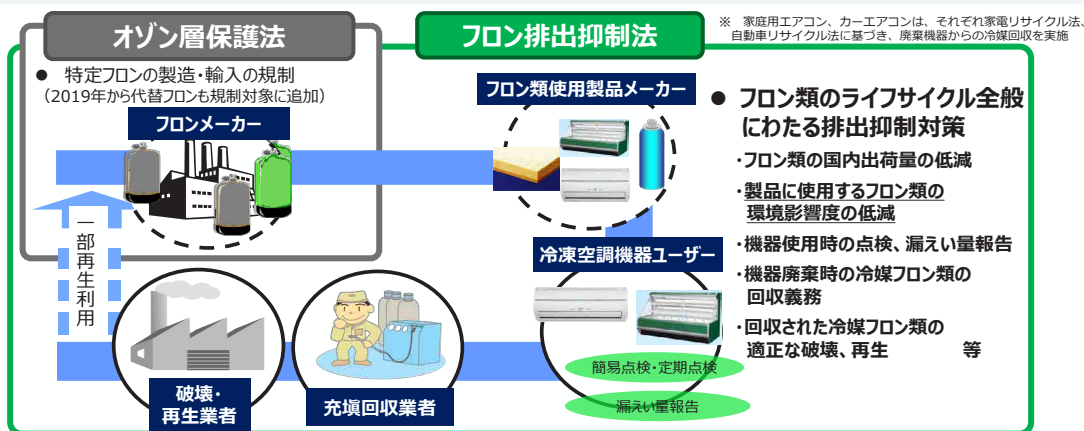
2. 各論

- ① 化学物質審査規制法（化審法）の施行状況と動向
- ② 化学物質排出把握管理促進法（化管法）の施行状況と動向
- ③ **オゾン層保護法・フロン排出抑制法の施行状況と動向**
- ④ 化学兵器禁止法の施行状況と動向
- ⑤ 水銀汚染防止法の施行状況と動向

3. 化学物質管理を巡る環境変化等への対応に向けて

フロン類のライフサイクル全般にわたる排出抑制対策

- **オゾン層保護法とフロン排出抑制法**で、フロン類（特定フロン及び代替フロン）の排出を、蛇口、上流、中流、下流の**ライフサイクル全般（生産・使用・回収・破壊等）に渡って抑制**。
- フロンの製造・輸入規制、製品に使用するフロン類の環境影響度の低減、機器使用時における点検、業務用冷凍空調機器の廃棄時におけるフロン類の回収義務等を規定。



フロン対策に係る最近のトピックス

- **2050年カーボンニュートラルの実現**に向け、フロン類の削減を着実に進めるため、**フロン類のライフサイクル全般にわたり、取組を推進中**。

オゾン層保護法とフロン類使用見直し

モントリオール議定書キガリ改正を着実に履行するため、**オゾン層保護法による割当てを着実に運用中**（2025年割当ても基準限度から余裕をもって割当て済み）。**フロン類使用見通しの見直し**を踏まえ、改正告示を**2026年4月に施行**。

グリーン冷媒・機器開発事業

グリーン冷媒・機器の開発のため、2023年度から5年間プロジェクトを実施中（**2026年度予算額6.6億円**）。

フロン排出抑制法に基づく指定製品制度

フロン排出抑制法に基づく指定製品制度について、産構審フロン類対策WGにおいて、指定製品の追加の審議を行い、**達成状況のフォローアップを実施中**。

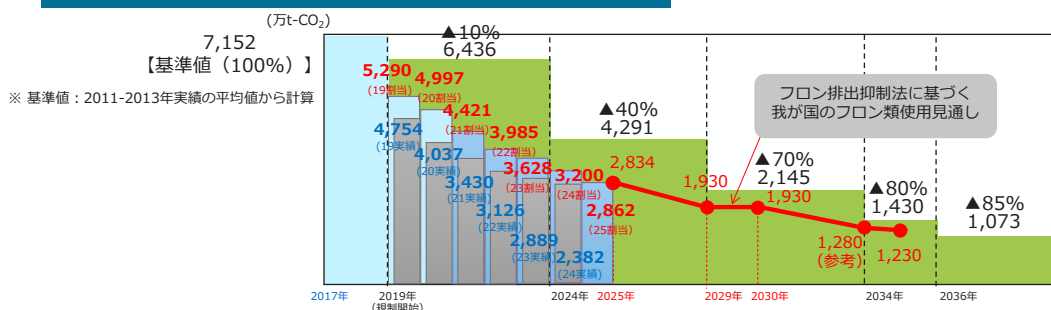
改正フロン排出抑制法施行後5年見直し

令和元年改正フロン排出抑制法の施行から5年が経過したことに伴い、**機器廃棄時の冷媒回収の徹底、HFCsの使用の合理化（再生HFCsの利用拡大）、機器使用中の大気放出の抑制等**、新たな規制を検討中。

オゾン層保護法とフロン類使用見直し（蛇口）

- モントリオール議定書キガリ改正を着実に履行するため、**オゾン層保護法**に基づく基準限度を決め、それを超えないよう、**製造量、輸入量の割当て**を実施し、**代替フロンの消費量・製造量を段階的に削減中**。
- 消費量・製造量とも2026年の基準限度は達成できる見込みであるが、2029年以降の基準限度（2,145万t-CO₂）はさらに厳しくなる。
- 2025年3月の産構審フロン類対策WGでの検討等を踏まえ、2026年4月にフロン類使用見直しに係る改正告示を施行。

我が国の代替フロン削減スケジュール（消費量）



フロン排出抑制法に基づく指定製品制度 (上流)

- フロン類使用製品の低GWP・ノンフロン化を進めるため、**製品区分ごとにGWPの目標値・目標年度**を定め、製造・輸入事業者にも目標の達成を求めている。(GWP：環境影響度)

指定製品の区分 (概要)	現在使用されている主な冷媒及びGWP	GWPの目標値	目標年度
家庭用エアコン	R410A (2,090)、R32 (675)	750	2018
業務用エアコン			
店舗・事務所用エアコン	R410A (2,090)、R32 (675)	750	2025
中央方式エアコン	遠心式の圧縮機 上記以外	R134a (1,430)、R245fa (1,030) 750	2025 2029
ビル用マルチエアコン	R410A (2,090)	750	2027
設備用エアコン	R410A (2,090)	750	2029
ガスエンジンヒートポンプエアコン	R410A (2,090)	750	2029
自動車用エアコン			
乗用自動車	R134a (1,430)	150	2023
トラック及びバス	R134a (1,430)	150	2029
コンデンシングユニット及び定置式冷凍冷蔵ユニット			
1.5kWを超えるものであって別置型 上記以外	R404A (3,920)、R410A (2,090)、R407C (1,770)、CO ₂ (1)	750 150	2029 2029
業務用一体型冷凍冷蔵機器			
業務用冷凍冷蔵庫	R404A (3,920)、R410A (2,090)、R407C (1,770)、 R134a (1,430)、CO ₂ (1)	150	2029
ショーケース		150	2029
中央方式冷凍冷蔵機器			
有効面積が5万㎡以上の冷凍冷蔵倉庫(新設、改築、増築)※	R404A (3,920)、アンモニア(一桁)	100	2019
遠心式圧縮式冷凍機(※以外)	R134a (1,430)、R245fa (1,030)	100	2029
スクリュウ式圧縮機(※以外)	R407C (1,770)、R448A (1,386)	150	2031
遠心式圧縮式冷凍機・スクリュウ式圧縮機以外(※以外)	R410A (2,090)	750	2029
硬質ポリウレタンフォームを用いた冷蔵機器及び冷凍機器		100	2024
硬質ポリウレタンフォームを用いた冷蔵又は冷凍の機能を有する自動販売機		100	2024
住宅用硬質ポリウレタンフォーム用原液	HFC-245fa (1,030)、HFC-365mfc (795)	100	2020
非住宅用硬質ポリウレタンフォーム用原液		100	2024
硬質ポリウレタンフォームを用いた断熱材		100	2024
専ら噴射剤のみを充填した噴霧器(不燃性を要する用途のものを除く)	HFC-134a (1,430)、HFC-152a (124)、CO ₂ (1)、DME (1)	10	2019

55

グリーン冷媒・機器開発事業 (2023~2027年度) (上流)

- キガリ改正の最終削減目標を達成するためには**低GWPの冷媒開発が必要**。
- 2018~2022年度までの5年間で、グリーン冷媒への代替技術開発が進んでいない分野に係る技術開発支援を実施し、HFO冷媒や評価モデルの開発等の成果を上げてきたところ。
- しかし、**HFO冷媒には安全性や省エネ性の低下等の課題**が残っているため、グリーン冷媒及びその適用機器の開発・上市の更なる加速化に向け、**2023年度以降も技術開発支援**を継続。

領域	分野	現行の代替フロン冷媒 (GWP)	代替フロン冷媒に代わるグリーン冷媒
①代替が進んでいる、又は進む見通し	家庭用冷凍冷蔵庫	(HFC-134a (1,430))	イソブタン
	自動販売機	(HFC-134a (1,430)) (HFC-407C (1,770))	CO ₂ 、イソブタン HFO-1234yf
	カーエアコン	HFC-134a (1,430)	HFO-1234yf
②代替候補はあるが、普及には課題あり	超低温冷凍冷蔵庫	HFC-23 (14,800)	空気
	大型業務用冷凍冷蔵庫	HFC-404A (3,920) HFC-410A (2,090)	アンモニア、CO ₂
	中型業務用冷凍冷蔵庫 (別置型ショーケース)		CO ₂
③代替候補を検討中	小型業務用冷凍冷蔵庫	HFC-404A (3,920) HFC-410A (2,090)	(代替冷媒候補を検討中)
	業務用エアコン	HFC-410A (2,090) HFC-32 (675)	
	家庭用エアコン	HFC-32 (675)	

グリーン冷媒・機器開発事業
(2026年度予算額 6.6億円)



56

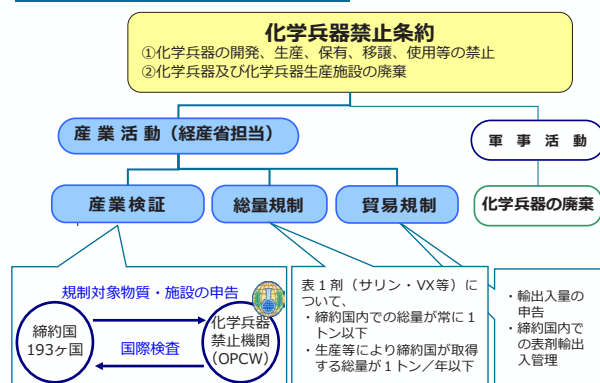
目次

1. 総論 ～化学物質管理政策をめぐる最近の動向～
2. 各論
 - ① 化学物質審査規制法（化審法）の施行状況と動向
 - ② 化学物質排出把握管理促進法（化管法）の施行状況と動向
 - ③ オゾン層保護法・フロン排出抑制法の施行状況と動向
 - ④ 化学兵器禁止法の施行状況と動向
 - ⑤ 水銀汚染防止法の施行状況と動向
3. 化学物質管理を巡る環境変化等への対応に向けて

化学兵器禁止制度の概況

- 「化学兵器禁止条約」及びその国内実施法である「化学兵器禁止法」に基づき、化学兵器の製造等を禁止するとともに、サリンやVX等の特定物質の製造等の許可を行う。
- また、化学兵器の原料となり得る指定物質等の製造等を行う事業所について、届出により設備の情報や製造等の状況を把握し、化学兵器禁止機関（OPCW）技術事務局に申告。

化学兵器禁止条約の構造



化学兵器禁止機関（OPCW）

- 条約に基づき1997年5月に設置。本部はオランダのハーグ市に所在。
- OPCWの体制：締約国会議、執行理事会、技術事務局（職員数約500名）
- 我が国は約560万€（約9億円）の分担金を負担（令和7年）

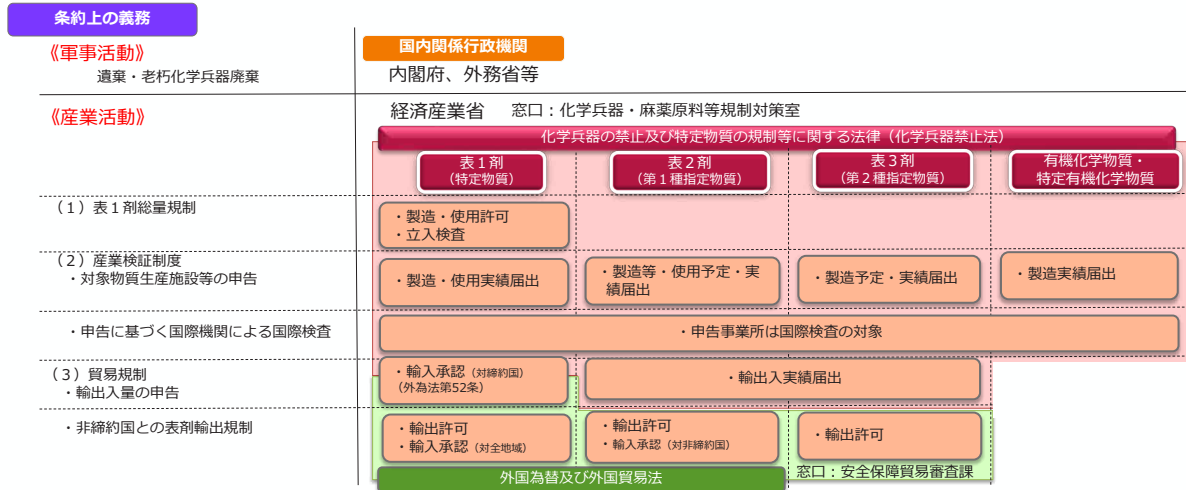


条約関係会合

- 締約国会議：最高意思決定機関。全締約国が参加。年1回開催。
 - 執行理事会：執行機関。各地域グループで選出した41か国で構成され、年3回開催。この下で様々な非公式協議が実施。
- ※当省関連では、産業クラスター会合（年3回）、国内当局者会合（年1回）、アジア地域国内当局者会合（年1回）に参加。

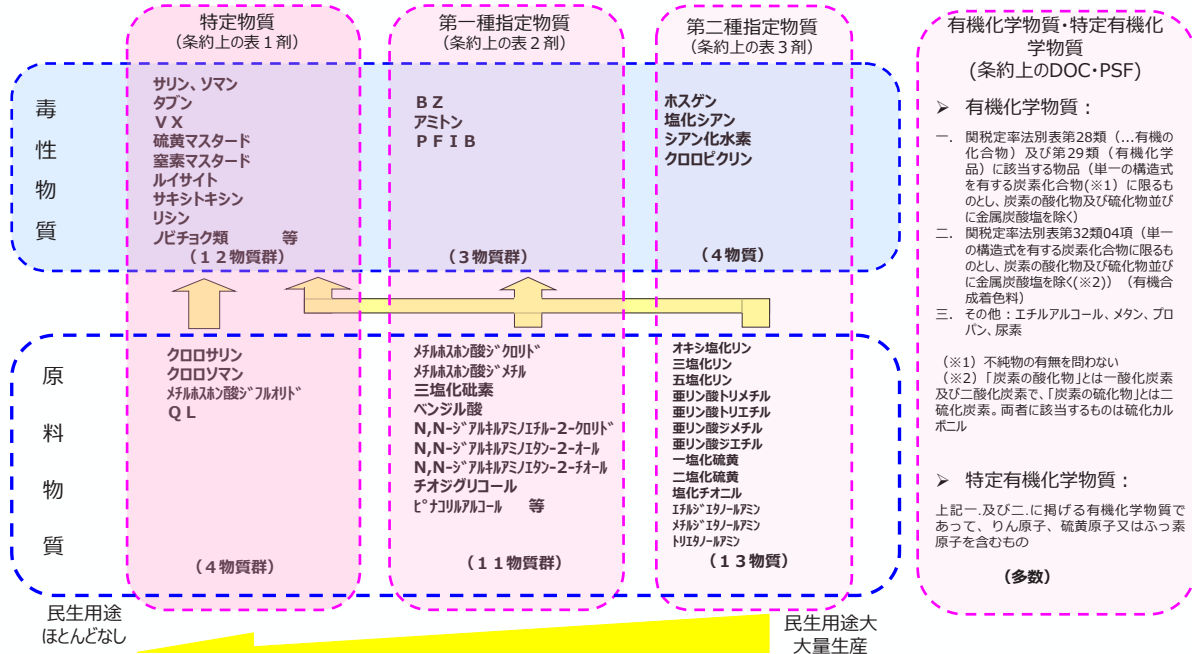
化学兵器禁止法の概要

- 化兵法では、化学兵器の製造等を禁止するとともに、化学兵器禁止条約で定める物質について、製造・使用・輸出・輸入の予定・実績数量の届出等を義務付け。経済産業省は、届出を集約し、条約事務局に申告。条約事務局は、申告された情報を基に国際検査対象の事業所を決定。また、検証制度の実効性担保のため、越境移動量の不整合がないかを監視。
- 昨今の国際情勢等により、化学兵器の再出現を防ぐ継続的な取り組みは必須。



59

化学兵器禁止法の特定物質・指定物質・有機化学物質・特定有機化学物質

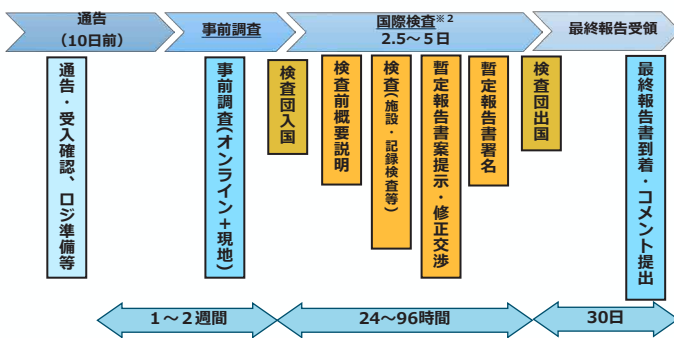


60

国際検査（OPCWからの国際検査の受入）

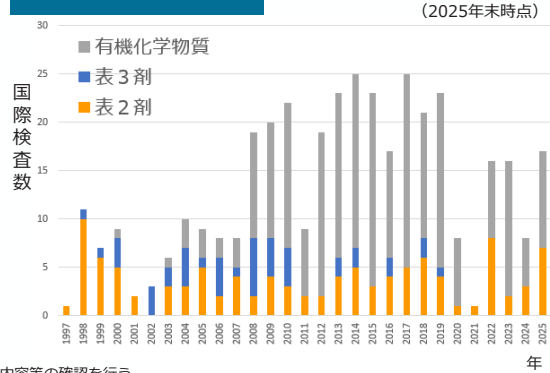
- 化学兵器禁止機関（OPCW）技術事務局からの通告を受けた後、経産省（本省・経済産業局）及びNITE化学物質管理センター職員が事前調査※1を行い、検査に対して準備。検査団及び事業所双方の権利義務を念頭に、適確かつ円滑に検査が行われるよう立会団としてサポート。
- 条約発効以後28年間で延べ約380検査を問題なく遂行。2025年は合計17検査、うち3施設連続検査4回、6年ぶりに分析付きの国際検査（NITE化学物質管理センターにおいて対抗分析を実施）を受入。

国際検査への対応



※1 検査対象事業所に出向き、検査当日の説明資料等の準備状況及び供与可能な便宜内容等の確認を行う。
 ※2 検査期間は、表2剤5日間、表3剤・有機化学物質2.5日間。最近は、2施設連続（1週間〜）や3施設連続（〜2.5週間）が多い。

国際検査数の推移



届出・申告（化兵法に基づく届出・OPCWへの申告）

- 化学兵器禁止法（化兵法）に基づく事業者からの届出件数は近年大きな変動なし。直近の製造・使用（2026年）予定届出※1は74件、製造・使用・輸出入（2024年）実績届出※2は550件。
- 事業所からの届出を集計し、OPCWに申告。
- 届出・申告に関する手続き詳細は、経産省ホームページ [届出・申告関係（METI/経済産業省）](#) へ。

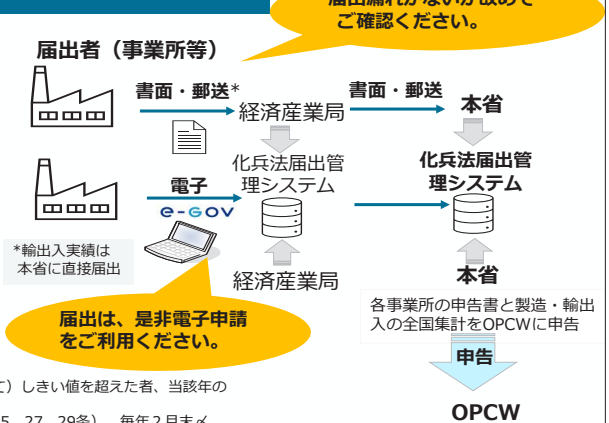
対象物質と必要な届出

対象物質	事業活動	予定届出 (次回：2026年 9月末)	実績届出 (次回：2027年 2月末)
第一種指定物質 (表2剤)	製造等	○	○
	使用	○	○
	輸出入	-	○
第二種指定物質 (表3剤)	製造	○	○
	使用	-	-
	輸出入	-	○
有機化学物質 (DOC) 特定有機化学物質 (PSF)	製造	-	○

※1 予定届出：翌年にしきい値超の見込、前3年のいずれかの年において（第2種は前年において）しきい値を超えた者、当該年の予定届出をした者（法第24、27条）。毎年9月末。

※2 実績届出：予定届出をした者、輸出入をした者、前年にしきい値を超えて製造した者（法第25、27、29条）。毎年2月末。

届出・申告フロー図

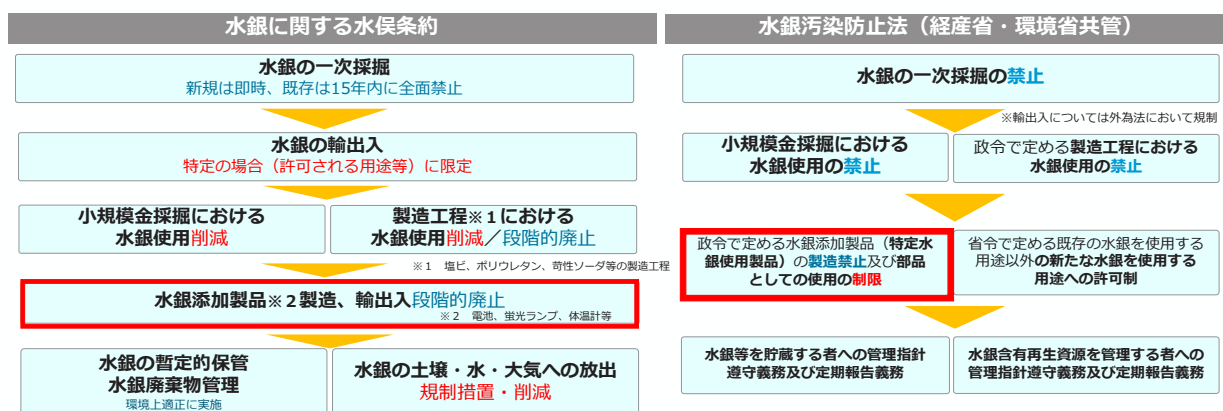


目次

1. 総論 ～化学物質管理政策をめぐる最近の動向～
2. 各論
 - ① 化学物質審査規制法（化審法）の施行状況と動向
 - ② 化学物質排出把握管理促進法（化管法）の施行状況と動向
 - ③ オゾン層保護法・フロン排出抑制法の施行状況と動向
 - ④ 化学兵器禁止法の施行状況と動向
 - ⑤ 水銀汚染防止法の施行状況と動向
3. 化学物質管理を巡る環境変化等への対応に向けて

水銀に関する水俣条約及び水銀汚染防止法

- 世界規模で水銀対策を行う必要性が認識され、水俣病を経験した我が国として、世界の水銀対策に主導的に取り組むことが必要との認識のもと、**2013年10月に「水銀に関する水俣条約」が採択され、2017年8月に発効。**
- **水俣条約を国内実施するために制定された「水銀汚染防止法」**は、水銀に関する水俣条約の的確かつ円滑な実施を確保し、水銀による環境の汚染を防止するため、蛍光灯、体温計、血圧計などを「**特定水銀使用製品**」として政令で指定し、**その製造禁止等**について措置。



国内法における水銀添加製品の製造及び輸出入規制

- 第4回（2022年3月）・第5回（2023年11月）締約国会議において、**蛍光灯の種類に応じ2027年末までの廃止が決定**。これを受け、水銀汚染防止法施行令を改正（2024年12月27日公布）し、同製品の製造等規制を決定。 ※輸出入は、外為法上で担保。
- 下記のとおり、電球形蛍光灯については既に2026年1月1日から規制を開始。その他の種類の蛍光灯についても、今後、2027年1月1日、2028年1月1日より段階的に規制。
※規制開始後も、製品の継続使用、在庫の売買及びその使用は可能。

種類	直管形蛍光灯	環形蛍光灯	コンパクト形蛍光灯	電球形蛍光灯
製造・輸出入の禁止開始時期	2028年1月1日（※）	2028年1月1日（※）	2027年1月1日	2026年1月1日
写真（例）			 ピン形口金	 ネジ式口金

（※）一部の直管形蛍光灯及び環形蛍光灯は、**2027年1月1日から製造・輸出入が禁止**。

蛍光灯製造規制及びそれに伴うLEDへの変更に係る周知活動

- 一般照明用蛍光灯の製造・輸出入禁止に向け、環境省や業界団体等、関係者と連携しながら計画的なLEDへの切替えや照明交換時の注意点（不適切な取付けによる火災などの事故の防止）等について周知活動を実施中。
- 具体的には、**関係省庁・業界団体・地方自治体に対する通知文発出、経産省X（旧ツイッター）での発信、政府広報（ラジオ放送、バナー広告）、説明動画配信、ポスター・チラシ・特設HPの作成等**を実施。引き続き各種媒体を活用した周知活動を実施予定。



経産省X（旧ツイッター）での発信
（2024年12月）



政府広報のバナー広告（2025年9月）



左：経産省YouTube（動画配信）（2025年2月）
<https://www.youtube.com/watch?v=SaudYQg0coI>

右：経産省特設ページ
（2025年3月）
https://www.meti.go.jp/policy/mono_info_service/joho/led_shomei/index.html

目次

1. 総論 ～化学物質管理政策をめぐる最近の動向～

2. 各論

- ① 化学物質審査規制法（化審法）の施行状況と動向
- ② 化学物質排出把握管理促進法（化管法）の施行状況と動向
- ③ オゾン層保護法・フロン排出抑制法の施行状況と動向
- ④ 化学兵器禁止法の施行状況と動向
- ⑤ 水銀汚染防止法の施行状況と動向

3. 化学物質管理を巡る環境変化等への対応に向けて

67

化学物質管理に関する技術動向等調査

令和 7 年度産業保安等調査研究事業（化学物質規制対策（化学物質管理に関する技術動向等調査））

- 本調査では、化学物質管理に関する直近（2030年目途）の規制・技術動向や、2050年における資源循環やカーボンニュートラル等を考慮した社会全体の絵姿を踏まえ、**2050年の化学物質管理に関わる「技術的論点」を整理**するとともに、**2050年の化学物質管理の在り方について検討**する。
- 本調査は、経産省のみならず、**産総研及びNITEとも連携**して実施。とりわけ、**化学物質管理行政の将来を担う各機関の中堅～若手**を中心に調査・検討を実施。



＜化学物質管理に関する技術動向等に関する有識者会議＞ ※敬称略、五十音順

- 織 朱實（上智大学大学院地球環境学研究所 教授）
- 岸本 充生（大阪大学 社会技術共創研究センター長）
- 竹ヶ原 啓介（政策研究大学院大学 教授）
- 東海 明宏（(独)国立高等専門学校機構新居浜工業高等専門学校 校長）
- 中谷 隼（東京大学大学院工学系研究科 准教授）

68

調査結果の概要

- 規制動向を含む化学物質管理を取り巻く環境変化を踏まえ2050年の化学物質管理に関わる技術的論点を設定し、関連する技術動向を調査した上で、2050年を念頭に今後の化学物質管理の在り方について考察した。

化学物質管理を取り巻く環境変化

化学物質の増大や
試験方法の多様化

循環型社会

カーボン
ニュートラル社会

自然共生社会

テクノロジーの発展

人口・産業構造や
国際情勢の変化

2050年の化学物質管理に関わる12の技術的論点

① 動物実験代替法

② 排水・排ガスの
リアルタイムモニタリング

③ 多様な化学物質の同定・定量を
可能にするノンターゲット分析

④ AI等の利用による
データ整理・活用的高度化

⑤ 生物多様性を踏まえた
リスク評価の高度化

⑥ ライフサイクル全体を通じた
化学物質情報の伝達

⑦ サステナビリティ関連項目も
踏まえた統合評価

⑧ 化学物質管理と企業価値の連動

⑨ プラスチックの
計測・分析手法の高度化

⑩ ステークホルダーの多様化や費
用対効果等を考慮した制度設計

⑪ リスクの早期発見と
その多様な管理アプローチ

⑫ 情報化学

今後の化学物質管理の在り方 (2050年)

データに基づくリスクを基軸に評価・管理を一層高度化し、規制のみならずインセンティブ付与等も組み合わせながら、事業者による自主的管理と必要なデータ開示を促進する制度を構築。また、当該制度を支える情報基盤の整備や人材育成・確保も必要。

具体化の視点①
技術革新を前提としたリスク評価・管理の高度化

具体化の視点②
化学物質管理のスコープ拡大への対応

具体化の視点③
化学物質管理と産業競争力・企業価値の連動

69

背景・目的 ～化学物質管理を巡る環境変化・課題～

- 化学物質が世界中で広く利用されていることはもとより、サプライチェーンのグローバル化等も踏まえ、化学物質管理の国際協調を図ることが重要である。近年では、国際条約における規制対象物質が増加・複雑化している中で、また、我が国ではリスクベースの化学物質管理を推進しているのに対し、欧州などでは予防原則に基づく措置を推進しつつある中で、どのように国際協調を図るかが課題となっている。
- 加えて、規制対象物質の増加に伴う代替物質の登場や、技術革新による未知の物質の登場など、今後、化学物質の増大が見込まれるだけでなく、動物実験廃止等に伴い化学物質に関する試験方法の多様化も見込まれる中で、これらへの対応に係る検討が不可避。
- さらに、循環型社会を念頭に、化学物質のライフサイクル全体を対象とする新たな国際枠組み (GFC) が採択されただけでなく、カーボンニュートラル社会や自然共生社会等への移行が進む中これらの動きとの調和も含めて、化学物質管理のスコープが拡大しつつある。
- 引き続き我が国産業の健全な発展と国民の安全安心な暮らしの実現の両立を大前提にしつつ、上記のような環境変化や課題に加え、人口構造や産業構造の変化等も踏まえながら、持続可能な化学物質管理制度を検討する必要がある。

70

【参考 1】ストックホルム条約における廃絶・制限対象

追加時期	附属書A (廃絶) 【35物質群】	附属書B (制限) 【2物質】	附属書C (非意図的生成物) 【7物質】
条約発効時 (2004年5月)	●アルドリン ●クロルデン ●ディルドリン ●エンドリン ●ヘプタクロル ●マイレックス ●トキサフェン ●ヘキサクロロベンゼン ●ポリ塩化ビフェニル (PCB)	●DDT	●ヘキサクロロベンゼン ●ポリ塩化ビフェニル (PCB) ●PCDD ●PCDF
COP4 (2009年5月)	●テトラブロモジフェニルエーテル ●ペンタブロモジフェニルエーテル ●クロルデコン ●ヘキサブロモジフェニル ●リンデン ●α-ヘキサクロロシクロヘキサン ●β-ヘキサクロロシクロヘキサン ●ヘキサブロモジフェニルエーテル ●ヘプタブロモジフェニルエーテル ●ペンタクロロベンゼン	●ペルフルオロオクタン スルホン酸 (PFOS) とその塩 及びPFOSF	●ペンタクロロベンゼン
COP5 (2011年4月)	●エンドスルファン		
COP6 (2013年4-5月)	●ヘキサブロモシクロドデカン		
COP7 (2015年5月)	●ポリ塩化ナフタレン (塩素数 2~8 のものを含む) ●ヘキサクロロプタジエン ●ペンタクロロフェノール (PCP) とその塩及びエステル類		●ポリ塩化ナフタレン (塩素 2 ~8 のものを含む)
COP8 (2017年4-5月)	●デカブロモジフェニルエーテル ●短鎖塩素化パラフィン (SCCP)		●ヘキサクロロプタジエン
COP9 (2019年4-5月)	●ペルフルオロオクタン酸 (PFOA) とその塩及びPFOA関連物質 (※) ●ジコホル		
COP10 (2022年6月)	●ペルフルオロヘキサンスルホン酸 (PFHxS) とその塩及びPFHxS関連物質 (※)		
COP11 (2023年5月)	●デクロランプラス ●UV328 ●メトキシクロル		
COP12 (2025年4-5月)	●クロルピリホス ●中鎖塩素化パラフィン (MCCP) ●長鎖ペルフルオロカルボン酸 (LC-PFCA) とその塩及びLC-PFCA関連物質 (※)		

※ 関連物質とは、微生物の作用などで分解してPFOA等に変化する物質。なお、化審法では、PFOA関連物質として140物質を指定済み、PFHxS関連物質として117物質を指定予定。

【参考 2】欧米の化学物質管理政策

- 欧州では事業者主体のリスク評価制度を採用している一方、米国では国主体のリスク評価制度を採用。

欧州の化学物質管理政策 (REACH規則の概要)

- 欧州連合では、REACH (Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals) 規則により、化学物質の登録・評価・認可・制限を定めた包括的な化学物質管理規制を実施。
- 本規則は、人の健康と環境の保護に加え、**欧州化学産業の競争力強化**を目的とする。
- 本規則では**予防原則**を基本的な考え方とする。当該考え方の下、近年では、PFASの包括的な制限案が検討されている。
- また、産業界が予見可能な状況下で人の健康と環境に悪影響を及ぼさないよう、化学物質を製造、輸入、使用し、または市場に供給すべきであるという原則に基づいている。特に新規化学物質の登録プロセスにおいては、事業者は自ら取扱う物質に関連するリスクを特定し、その管理方法を示す必要があるなど、**事業者主体のリスク評価**を採用している。

米国の化学物質管理政策 (TSCAの概要)

- 米国では、TSCA (Toxic Substances Control Act) により、化学物質の製造・輸入・使用・処分を規制。
- 本規制法は、有害な化学物質による人の健康と環境への不当なリスクを防止することを目的とする。
- 新規化学物質の製造・輸入に際して、事業者は事前に当該物質のハザード情報等を添えて届出を行い、米国環境保護庁 (EPA) は、これらの情報に基づきリスク評価等を行う、**国主体のリスク評価**を採用している。
- 既存化学物質についても、**新たな用途によるリスクの増加が懸念される場合**、当該用途で製造等を行う事業者に対して、EPAへの**事前届出を義務付け**ている。
- なお、**本規制法の十分な実施にはリソース面で課題**があるとされている。
※2024年1月24日の米国上院環境・公共事業委員会におけるミハル・フルードホフ化学安全・汚染防止局長の発言より

【参考 3】化学物質の増大や試験方法の多様化の見通し

- Global Chemicals Outlook II (UNEP, 2019) では、近年、化学物質の登録数が大きく増加傾向にあることを指摘するとともに、今後も増加傾向が続くと見ている。
- 試験方法については、欧米において、新しい評価手法 (NAMs : New Approach Methodologies) の開発等に係るロードマップ等の検討が進められている。

化学物質の増大に関するUNEPの指摘

<Global Chemicals Outlook II (UNEP, 2019) >

- CAS (Chemical Abstracts Service) に登録された物質数は、14,200万件を超えている。
- 登録数が1億件に到達するまでに50年を要したが、その後2年間でさらに3,000万件が登録された。
- 世界的な化学物質と廃棄物の増加傾向は続いており、2030年に向けてより野心的な対策が必要であることを指摘。

NAMsに関する欧米の動き

<欧州>

- 欧州委員会において「Roadmap Towards Phasing Out Animal Testing for Chemical Safety Assessments」を策定中。動物実験代替法の開発等に係るロードマップを2026年初頭までに公開予定。

<米国>

- 米国環境保護庁 (EPA) は、脊椎動物実験を削減しつつ、人健康と環境の保護の継続に向けた戦略的計画として、「New Approach Methods Work Plan (2020)」を発表。
- また、EPAは、2035年までに動物実験を廃止するという野心的な目標に取り組むことを発表している。

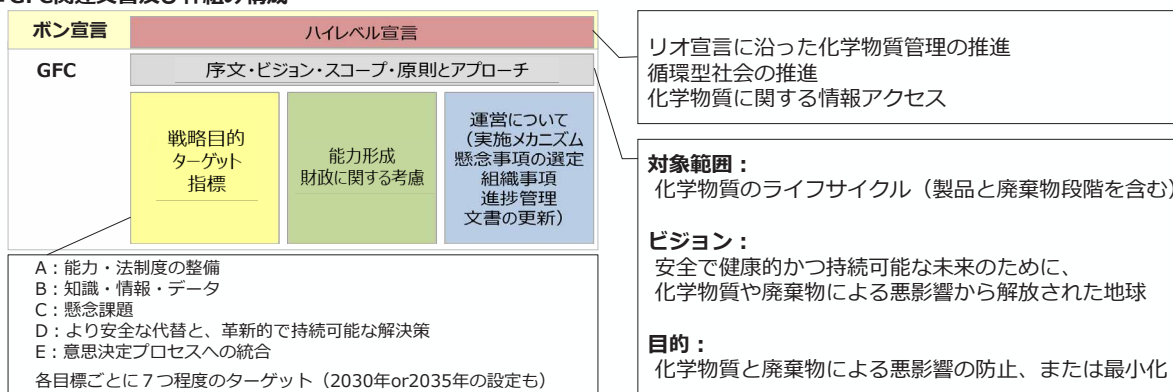
73

【参考 4】化学物質に関するグローバル枠組み (GFC)

(Global Framework on Chemicals –For a planet free of harm from chemicals and waste)

- 2023年9月の第5回国際化学物質管理会議 (ICCM5) において、2006年に策定された「国際的な化学物質管理のための戦略的なアプローチ (SAICM)」の後継となる、「**化学物質管理に関するグローバル枠組み (GFC) –化学物質や廃棄物の有害な影響から解放された世界へ**」が採択。
- **マルチセクター** (環境、経済、社会、保健、農業、労働等) における、**マルチステークホルダー** (政府、政府間組織、市民社会、産業界、学術界等) による、製造から製品への使用等を経て廃棄までの**ライフサイクル全体**を通じた、**法的拘束力のない**化学物質管理の枠組み。

■ GFC関連文書及び枠組み構成



74

【参考 5】化学物質管理と循環型社会、CN社会、自然共生社会の関連性

- 国際的に、化学物質管理と「循環型社会」、「カーボンニュートラル社会」、「自然共生社会」との関連性が指摘されつつある。

循環型社会との関連性

- 世界経済フォーラム (WEF) は、現状、製品中の化学物質の情報が不透明であるとして、化学物質が循環性の障壁となり得ることを指摘。(2025年10月)
- OECDは、材料、製品、化学物質管理に関する政策の統合が循環経済に向けた課題であることを指摘。(2025年11月)

カーボンニュートラル社会 (CN社会) との関連性

- 持続可能な開発のための世界経済人会議 (WBCSD) は、化学産業は世界の温室効果ガス排出の約 6%程度を占める (2019年の推計) として、化学物質管理の高度化と循環経済の導入が化学産業のネットゼロ達成の鍵だと強調。(2024年10月)
- UNEPは、氷河等の融解に伴う化学物質の再移動、脱炭素化に向けた化学的ソリューションの実現への貢献など、化学物質とカーボンニュートラルの関連性が多岐にわたることを指摘。(2019年4月)

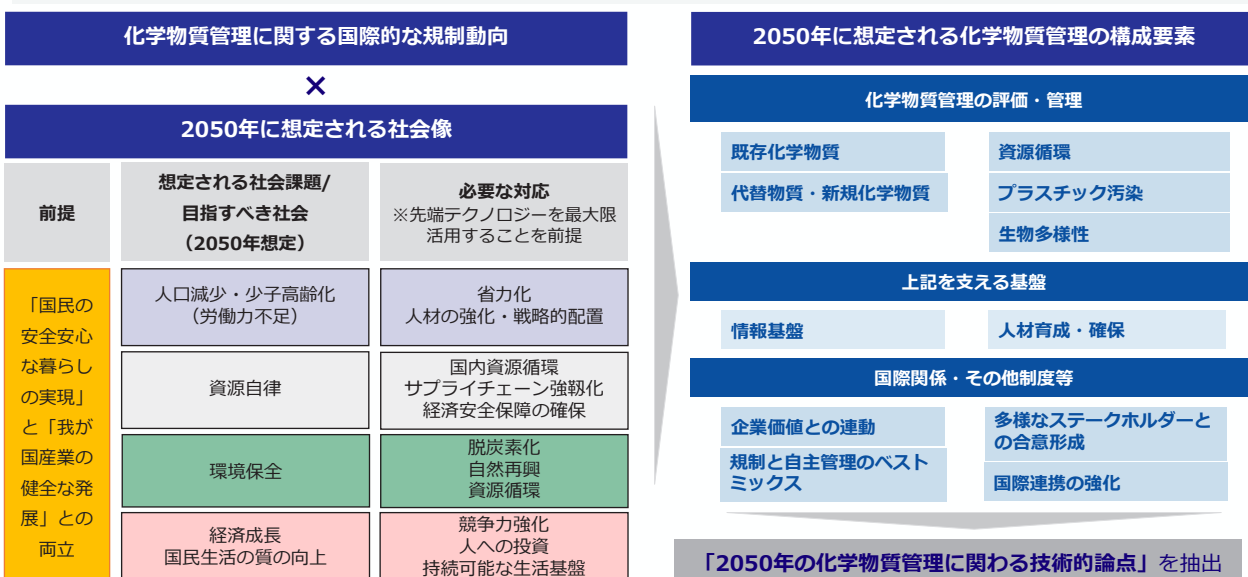
自然共生社会との関連性

- 「昆明・モントリオール生物多様性枠組」(2022年12月採択) では、2030年グローバルターゲットにおいて、有害性の高い化学物質による全体的なリスクを半減させることを指摘。
- WBCSDは、2030年までに化学産業の自然への影響を反転 (自然損失の停止・回復) させることを提唱。(2024年10月)

75

調査結果 ～2050年の化学物質管理に関わる技術的論点～

- 化学物質管理に関する規制動向から想定される我が国への影響等については、2050年に想定される社会像も踏まえつつ、2050年に想定される化学物質の構成要素毎に整理した。その上で、「2050年の化学物質管理に関わる技術的論点」を抽出した。



76

調査結果 ～2050年の化学物質管理に関わる技術的論点～

No	2050年の化学物質管理に関わる技術的論点
①	動物実験代替手法 (in silico、in vitro及びこれらの組合せ)
②	排水・排ガスのリアルタイムモニタリング
③	多様な化学物質の同定・定量を可能にするノンターゲット分析
④	AI等の利用によるデータ整理・活用の高度化
⑤	生物多様性を踏まえたリスク評価の高度化
⑥	ライフサイクル全体を通じた化学物質情報の伝達
⑦	サステナビリティ関連項目も踏まえた統合評価
⑧	化学物質管理と企業価値の連動
⑨	プラスチックの計測・分析手法の高度化
⑩	ステークホルダーの多様化や費用対効果等を考慮した制度設計
⑪	リスクの早期発見及びその多様な管理アプローチ
⑫	情報化学 (ケモインフォマティクス、マテリアルインフォマティクス)

77

【参考 6】 2050年の化学物質管理に関わる技術的論点 (詳細その 1)

① 動物実験代替法 (in silico、in vitro及びこれらの組合せ)

動物実験廃止の国際的潮流を背景に、in silicoやin vitro等を用いた化学物質に係る評価の拡大が見込まれる。

<現状>

- 一部エンドポイント (創薬分野、農薬分野等) において、in silico (コンピューター上で行う評価) やin vitro (試験管等の生体外で行う実験) が活用。
- 化学物質管理分野では、OECDでガイドライン整備が進展する一方、制度利用は限定的。

<2050年の見通し>

- in silicoを中心に、必要に応じin vitro等を組み合わせた評価が主流化。
- in vivo (生体内で行う試験) についても、新規化学物質開発等において一定程度活用。

<主な課題>

- データ整理、データの信頼性確保。
- 評価フローの標準化等による再現性の確保。
- 専門人材の育成。

② 排水・排ガスのリアルタイムモニタリング

デジタル技術の進展等により、化学物質の排出を常時把握し、リスクを早期に検知可能になることが見込まれる。

<現状>

- 個別物質を定量する上での前処理がボトルネックとなり、リアルタイムで分析する技術は限定的。

<2050年の見通し>

- AIをはじめとする各種デジタル技術の進展等により、排出状況をリアルタイムで把握し、異常排出やリスク兆候を早期に検知可能に。

<主な課題>

- 定量精度の向上。
- 前処理の自動化、センサーの普及。
- データの管理・共有に係る体制整備。

78

【参考 6】2050年の化学物質管理に関わる技術的論点（詳細その 2）

③多様な化学物質の同定・定量を可能にする
ノンターゲット分析

AI活用等により、対象物質を限定することなく、製品含有化学物質等も含め、化学物質の網羅的な把握が可能になることが見込まれる。

<現状>

- 主に水質試料で実用段階にあるものの、生物や土壌等の複雑なマトリックスを持つ試料では研究段階。

<2050年の見通し>

- 製品含有化学物質や生物試料等も含め、多様な化学物質を網羅的に同定・定量することが可能に。
- 標準物質に依存しない評価 (in silico) についても、物質群ごとの相対定量は可能に。

<主な課題>

- データフォーマットの統一化。
- データベースの構築。

④AI等の利用によるデータ整理・活用の高度化

AI活用等により、化学物質に関するデータについて一元的な収集・整理・解析が可能になることが見込まれる。

<現状>

- 化学物質の有害性情報やモニタリングデータ等の情報は制度・機関ごとに分散管理されている。
- データベースもAI活用を念頭にした設計になっていない。

<2050年の見通し>

- AI活用等により、データの収集・整理が自動化。
- データ解析についても、データ量が豊富なものを中心にAIモデルによる解析が可能に。

<主な課題>

- 化学物質の同一性情報も考慮したデータフォーマットの統一化。
- データの信頼性確保。
- データの管理・共有に係る体制整備（ネガティブデータも含む）。

79

【参考 6】2050年の化学物質管理に関わる技術的論点（詳細その 3）

⑤生物多様性を踏まえたリスク評価の高度化

自然共生社会への移行に伴い、生物多様性を踏まえたリスク評価の高度化が見込まれる。

<現状>

- 生物多様性に係る評価指標は未確立。
- 現行の化学物質管理制度では藻類・甲殻類・魚類を主体とした評価が行われているが、近年では化学物質に対する生物種間の感受性のばらつきも踏まえた検討が行われている。

<2050年の見通し>

- デジタルツイン等の活用により、生物多様性に係る相互作用をパラメータ化したシステムが構築され、その中で化学物質の影響も加味した変化予測が可能に。

<主な課題>

- 評価の指標・手法の確立。
- 地域特性を踏まえた高精度推計の確立。
- 複合分野の人材育成。

⑥ライフサイクル全体を通じた化学物質情報の伝達

循環型社会への移行に伴い、製品含有化学物質の情報がライフサイクル全体で可視化・伝達可能になることが見込まれる。

<現状>

- SDSは主に製造～成形品段階まで。
- 動脈産業・静脈産業の双方で製品含有化学物質の情報の可視化・伝達に向けた取組が進められるとともに、両者の連携に向けた検討が行われている。

<2050年の見通し>

- 製品のライフサイクル全体で、含有化学物質の情報が可視化され、その情報が円滑に伝達される。

<主な課題>

- 情報伝達に係る基盤や制度の構築。
- サプライチェーンのグローバル化も踏まえた国際整合性の確保。

80

【参考 6】2050年の化学物質管理に関わる技術的論点（詳細その 4）

⑦サステナビリティ関連項目も踏まえた統合評価

CN社会への移行等に伴い、化学物質のリスクについて他の環境課題との横断的な評価の進展が見込まれる。

<現状>

- ▶ 日本では化学物質、脱炭素、生物多様性は個別評価が中心だが、海外では政策活用を念頭にこれらの統合評価に係る検討が進められている。

<2050年の見通し>

- ▶ 複数の影響領域を横断した統合評価が政策判断に活用。

<主な課題>

- ▶ 指標・マルチクライテリアの整備。
- ▶ PRTRのアジア展開等によるインベントリデータの充実化。

⑧化学物質管理と企業価値の連動

サステナブルファイナンスとの連動により、化学物質管理が企業評価や投資判断に反映されることが見込まれる。

<現状>

- ▶ 金融における化学物質管理は、主に法令遵守等のコンプライアンスの一環として最低限の確認がなされる程度。
- ▶ 管理状況と企業評価・投資判断の連動は限定的。

<2050年の見通し>

- ▶ 化学物質管理もサステナビリティ関連財務情報の1つとして位置付け。
- ▶ 化学物質管理の取組が企業価値として評価。

<主な課題>

- ▶ 開示指標・評価手法の整理。
- ▶ 開示データの第三者認証の仕組み構築。

81

【参考 6】2050年の化学物質管理に関わる技術的論点（詳細その 5）

⑨プラスチックの計測・分析手法の高度化

プラスチック汚染への関心の高まりを背景に、微細なプラスチックの環境動態把握に係る分析技術の高度化が見込まれる。

<現状>

- ▶ 粒径300 μ m以上の微細なプラスチックについては、計測プロトコルが確立され、存在状況の実態把握が進められている。
- ▶ 粒径300 μ m未満の分析方法は開発段階。

<2050年の見通し>

- ▶ 蛍光染色を用いた画像解析技術の実用化やAI活用により、分析技術の高度化が図られ、微細なプラスチックに関する科学的知見の蓄積が進む。

<主な課題>

- ▶ 評価に用いる標準物質（自然環境中の性状を模したモノ）や試験法の開発。
- ▶ データの管理・共有に係る体制整備。

⑩ステークホルダーの多様化や費用対効果等を考慮した制度設計

ステークホルダーの多様化に伴う合意形成手法の変化、また、海外における化学物質に特化した規制影響評価の動き等が、今後の制度設計に影響を与える可能性あり。

<現状>

- ▶ 規制影響評価に関して、日本では分野横断的にRIA (Regulatory Impact Analysis) が実施されているが、欧州では化学物質に特化した評価が行われている。

<2050年の見通し>

- ▶ リスクやコストのみならず、サプライチェーン等も含めた多様な影響が可視化。

<主な課題>

- ▶ 事業者や専門家等から評価に必要なデータを収集する仕組みの整備。

82

【参考 6】2050年の化学物質管理に関わる技術的論点（詳細その6）

① リスクの早期発見及びその多様な管理アプローチ

化学物質の増大や新技術導入等に伴うリスクも見込まれる中、これを早期に把握して、規制と自主管理のベストミックスによる最適なリスク管理アプローチを行うことが期待される。

<現状>

- ▶ 今後、化学物質の増大や新技術導入等に伴う多様なリスクに対し、柔軟かつ迅速な管理が求められる。
- ▶ 現状日本では、細部まで管理する形で規制を実施しているが、欧州では、アウトカムを設定し、その達成方法に自由度を持たせるような形で規制を実施している。

<2050年の見通し>

- ▶ リスク兆候を早期に把握し、蓄積されたデータ等を用いて、その様態に応じた最適な管理アプローチが行われる仕組みが確立。

<主な課題>

- ▶ リスクの把握体制の整備、データの蓄積。
- ▶ 複合分野の人材育成（行政も含む）。

② 情報化学（ケモインフォマティクス、マテリアルインフォマティクス）

デジタル技術の進展等により、新規化学物質の開発や代替物質の探知において、ケモインフォマティクス・マテリアルインフォマティクスの導入が進むことが見込まれる。

<現状>

- ▶ 一部企業において、マテリアルインフォマティクス（材料の性能等をデータで最適化）が新規素材開発に活用。
- ▶ 海外では、動物実験からの脱却に向け、情報化学に関する大型プロジェクトを実施。

<2050年の見通し>

- ▶ ケモインフォマティクス（分子の性質等をデータで予測）の浸透により、高い信頼性を持って化学構造を予測することが可能に。
- ▶ 新規化学物質・代替物質の開発や評価が大幅に効率化。

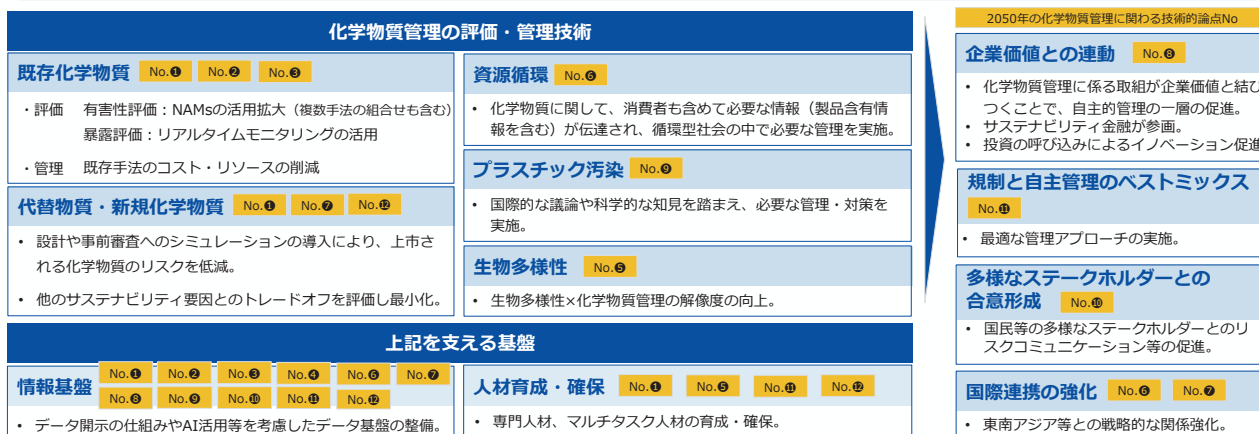
<主な課題>

- ▶ データの信頼性確保。
- ▶ データの管理・共有に係る体制整備。
- ▶ 複合分野の人材育成。

83

【参考 7】2050年の化学物質管理に関わる技術的論点（まとめ）

- 「2050年の化学物質管理に関わる技術的論点」について、2050年に想定される化学物質の構成要素との関係を体系的に整理した。
- 化学物質管理のスコープ拡大に対応しながら、リスク評価・管理の高度化を図るとともに、これらを支える情報基盤の整備や人材育成・確保が必要になるのではないか。また、規制のみならず、事業者による自主的管理やインセンティブ付与等を適切に組み合わせた制度の検討が必要になるのではないか。



84

考察 ～今後の化学物質管理の在り方を検討する上での視点～

- 化学物質は、国民生活の質の向上に大きく寄与している一方、潜在的に人健康や環境に悪影響を与え得るものであることを踏まえ、経済産業省の化学物質管理政策は、国民の安全安心な暮らしを実現することはもとより、我が国産業の健全な発展との両立を図ることが重要。
- 今後、2050年においては、循環型社会、カーボンニュートラル社会、自然共生社会等の実現、また、テクノロジー、人口構造・産業構造、国際情勢等も大きく変化していることが想定される。
- こうした変化等を踏まえつつ、経済産業省（行政）にとっては、化学物質管理に関する国際的な議論や動向を注視しながら、国内における化学物質管理が**産業競争力の基盤**になると共に、**事業者の自律的な管理**によって、将来にわたって**化学物質に関する悪影響（環境汚染等）が防止**されている状態が望ましい。
- 事業者にとっては、化学物質管理の効果を高めつつ**規制対応コストが最小化**され、それにより創出されたりソースの投資により**イノベーションが促進**されることに加え、**化学物質管理に積極的に取り組む事業者が市場で正当に評価**される状態が望ましい。
- 国民にとっては、工場等からの化学物質排出量や製品含有化学物質の有害性等について、第三者認証等を経た**透明性や信頼性の高い情報を入手**でき、これらにより**安心して企業や製品等を選択**できる状態が望ましい。
- 三者（行政・事業者・国民）の理想状態を実現する政策として、**適切なガバナンス設計、市場インセンティブの設計、共通のデータ基盤の構築**、さらに、**これらを相互接続**させること（三者を繋ぐ関係者を含む）が重要になるのではないかと。

85

考察 ～今後の化学物質管理の在り方について～

- 我が国は、**行政主導の下で信頼性の高い化学物質関連データを長年にわたり蓄積してきた強み**を有しており、これを最大限活かす化学物質管理の在り方として、**2050年に至る環境変化を的確に捉えつつ、データに基づく、リスクを基軸とした評価・管理の一層の高度化**を図るとともに、**規制のみならずインセンティブ付与等の手法も組み合わせながら、事業者による自主的管理や必要なデータの開示を一層促進するような制度の構築**が考えられる。また、当該制度を支える**情報基盤の整備や人材育成・確保**も必要となることが考えられる。

具体化の視点① 技術革新を前提としたリスク評価・管理の高度化

- 本調査で整理した「動物実験代替法」や「情報化学」等の技術的論点は、**2050年の化学物質管理の基盤技術**となり得るもの。
- 技術革新の進展を見据えながら、技術開発はもとより、技術の信頼性確保、評価手法の標準化、データの管理・共有体制、人材育成・確保など、**制度整備の加速化も含めた戦略的な取組**を進めていくことが重要。

具体化の視点② 化学物質管理のスコープ拡大への対応

- 国際的な循環経済、CN社会、自然共生社会等への移行等に伴う化学物質管理のスコープ拡大は、化学物質管理を単独の政策分野として捉えるのではなく、GX、DX、AXといった**社会全体の構造転換と一体的に捉えることの重要性**を示している。
- 他方、リスクの多様化・複雑化と将来的なリソース制約を踏まえ、**規制、自主的管理、インセンティブ等の適切な組合せ**が不可欠。

具体化の視点③ 化学物質管理と産業競争力・企業価値の連動

- 化学物質管理を**産業競争力の基盤**として位置付け、その取組が**企業価値等に適切に反映される仕組みの整備**等が不可欠。
- また、本調査で整理した技術的論点について、優先順位を明確化し、**産学官連携・国際連携の下で戦略的に取組**を進め、**国際的なルール形成等において我が国が主体的な役割**を果たすことが、**我が国の勝ち筋**と考えられる。

※本報告書は経済産業省の化学物質管理政策の視点に基づき作成したものであるが、その具体化に当たっては、関係省庁の政策との整合性にも十分留意する必要がある。また、本報告書はあくまでも現時点で入手可能な情報に基づき作成したものであり、今後の国際動向や技術動向等も踏まえ、定期的・継続的に見直しを行うことも必要である。

86

PFASについて

- PFAS (Per- and PolyFluoroAlkyl Substances) とは、**パーフルオロアルキル化合物及びポリフルオロアルキル化合物 (いわゆる有機フッ素化合物) など、約10,000種超の有機フッ素化合物の物質群の総称。** (OECDでは、フッ素化されたメチル (CF₃-) 又はメチレン (-CF₂-) を含む化学物質の総称。)
- PFASは、**様々な性質 (耐熱性、化学的安定性、耐薬品性、難燃性、撥水性、潤滑性等) を有し、泡消火薬剤、金属めっき、織物、洗浄剤、コーティングなどで半導体製造、自動車部品、各種機械器具、医療まで幅広い用途に使用。**

PFAS

【規制対象】
原則製造・輸入・使用禁止

PFOS (2010年)
PFOA (2021年)
PFHxS (2024年)

PFAS類の使用例			
Non-polymer		Polymer	
業界/用途	使用例	業界/用途	使用例
航空	油圧作動油の添加剤	自動車	シール材、低摩擦ペーキング
建設	塗料の添加剤	航空	はんだスリブ(絶縁材)
電気電子機器	難燃剤	ケーブル/ワイヤ	耐熱・耐環境用被覆材
消火用途	水性フィルム形成フォーム (AFFF)	建設	建築資材塗装用塗料の添加剤
家庭用	床の清掃ポリッシング液中界面活性剤	電気電子機器	はんだスリブ(絶縁材)
金属メッキ	穴掘りロムメッキの添加剤	太陽光発電	パネル保護用フィルム
石油/鉱業	採掘時のSimulator中界面活性剤	消火用途	耐火防護服材料
重合工程	(乳化) 重合加工助剤	家庭用	揚げ付き防止コーティング(フライパンなど)
冷凍空調	冷媒(PFC,HFC,HFO,HFEなど)	医療	移植用材料(血管など)、手術用ガウン
		半導体	製造装置内部の配管、ポンプなど接液材
		繊維	撥水、撥油繊維

(出典) 内閣府・第4回マテリアル戦略有識者会議 JBCE資料 (2021年1月25日)

欧州 PFAS規制 (REACH規則) の動向

- REACH規則の制限プロセスとPFAS規制スケジュール

制限提案国
(加盟国)

→

ECHA
(欧州化学庁)

→

欧州委員会

制限提案の準備と準備
Preparation and submission of a restriction proposal

制限提案国: オランダ、ドイツ、デンマーク、ノルウェー、スウェーデン

① 2021年7月15日
Registry of Intentions

② 2023年1月13日
Preparing the restriction dossier

③ 2023年3月22日
(制限提案の正式公開)

④ 2023年3月22日
Restriction report submission

意見募集
Consultations

制限提案に対する意見募集
③ 2023年3月22日～9月25日

SEAC案に対する意見募集
④ 2026年3月26日～5月25日 (60日間)

法案決定と制限準備
Decision and follow-up ※ 予定2027年～

⑤ 2026年3月2日
RACは最終意見を採用

⑥ 2026年3月11日
SEACが意見案に合意

REACH制限プロセス	期間	PFAS制限
① 制限提案の意図登録		2021年7月
② 制限提案書提出 (提案国→ECHA)		2023年1月
③ 制限提案書	6ヶ月間	2023年3～9月
④ SEAC意見書案	60日間	2026年3月26日～5月25日
⑤ 欧州委員会案	4週間	未定
⑥ 官報公布		未定
⑦ 適用開始	官報公布後 18～36ヶ月	未定 (18ヶ月提案)

RAC : Risk Assessment Committee (リスク評価委員会) / SEAC : Socio-Economic Analysis Committee (社会経済分析委員会)

2026年3月26日～5月25日 (60日間) : SEAC意見案に対する意見募集を実施

※ 欧州委員会が法案を策定する前の最後の意見募集 ECHAガイダンス資料・動画 <https://echa.europa.eu/-/webinar-consultation-on-pfas-draft-opinion>

ご清聴ありがとうございました

<化学物質管理法令の詳細につきまして>

- 化学物質管理法令の詳細や細かな手続き方法等については、当課のHPでも掲載しておりますので、ご覧いただければと思います。
- 化審法、化管法及びフロン排出抑制法については、チャットボットもご利用いただけます。

https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/index.html

経済産業省 化学物質管理



<お問合せにつきまして>

- お手数をおかけしますが、お問い合わせいただく場合には、以下のメールフォームからご連絡いただきますようお願いいたします。

https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/contact.html

ご不便をおかけしますが、ご理解・ご協力のほど、よろしくお願いいたします。

研 究 発 表

- 1) LLNA: BrdU-ELISA 法による GHS 皮膚感作性細区分基準の
確立と国連 GHS 文書改訂に向けた取組み

日田事業所 小林 俊夫

- 2) LLNA をベースにした新規光アレルギー性試験法の開発と
応用

安全性評価技術研究所 前田 洋祐

- 3) 海洋生分解性プラスチックの評価法の開発
(ムーンショット型研究開発プロジェクト)

東京事業所高分子技術部 菊地 貴子

LLNA: BrdU-ELISA 法による GHS 皮膚感作性細区分基準の確立と 国連 GHS 文書改訂に向けた取り組み

発表者：小林 俊夫 (日田事業所)

1. 背景及び目的

「化学品の分類及び表示に関する世界調和システム (The Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals、以下 GHS)」は、国際的に統一された化学物質の有害性情報の伝達システムであり、ヒト健康、環境等に対する有害性の有無並びに強度に応じた分類方法が制定されている。皮膚感作性については、感作性物質は「区分 1」と分類され、さらにその強度に応じ「区分 1A: 強い感作性物質」及び「区分 1B: その他の感作性物質」の細区分が規定されている。皮膚感作性の GHS 分類は OECD で承認された試験法 (TG、テストガイドライン) で得られた結果から判定可能であり、動物を用いる代表的な皮膚感作性試験としてマウスを用いる Local Lymph Node Assay (以下 LLNA) が使用されている。LLNA は、化学物質をマウスの耳介に塗布し、耳介リンパ節で誘導されるリンパ球増殖を指標として化学物質の感作性の有無を判定する試験法であり、リンパ球増殖の定量に放射性同位元素 (RI) を用いる LLNA-RI 法 (OECD TG429、以下 LLNA-RI) のほか、プロモデオキシウリジン (BrdU) を用いる LLNA: BrdU-ELISA 法 (OECD TG442B、以下 LLNA: BrdU-ELISA) が公定化されている。リンパ球増殖の指標である Stimulation index (SI) が LLNA-RI では 3 以上、LLNA: BrdU-ELISA では 1.6 以上の場合、原則陽性 (区分 1) と判定する。また、SI が 3 又は 1.6 となるときの被験物質濃度 (EC3 値又は EC1.6 値) を算出することにより、感作性強度を推定することが可能であり、細区分は LLNA-RI で得られる EC3 値に基づき 1A (EC3 値 \leq 2%) 又は 1B (2% < EC3 値) と規定されている。一方で、放射性物質を用いない汎用的な手法である LLNA: BrdU-ELISA で得られる EC1.6 値による細区分基準は確立されていない。しかしながら、EC1.6 値について 2% に基づいて細区分した、基準の誤用事例が報告された。

そこで本研究では、LLNA: BrdU-ELISA の OECD TG 化に先立って実施された国際バリデーション研究データを再解析し、EC1.6 値に基づく最適な GHS 細区分基準を設定するとともに、現在国内で使用可能な汎用系統である CBA/J マウスを用いて代表的な感作性物質について LLNA: BrdU-ELISA を実施し、細区分基準の適用性を検証した。また、本細区分基準は 2025 年に OECD TG442B に収載され、現在 GHS 文書の収載に取り組んでいるのでその進捗も紹介する。

表 1 再解析に用いた感作性物質の細区分と EC3 値及び EC1.6 値

物質名	細区分	EC3 値 (%)	EC1.6 値 (%)
5-Chloro-2-methyl-4-isothiazolin-3-one	1A	0.009	0.065
<i>p</i> -Benzoquinone	1A	0.01	0.15
2,4-Dinitrochlorobenzene	1A	0.049	0.032
Diphenylcyclopropanone	1A	0.05	0.45
Glutaraldehyde	1A	0.083	0.115
1,4-Phenylenediamine	1A	0.11	0.285
Formaldehyde	1A	0.5	0.163
Cobalt(II) chloride	1A	0.66	0.316
4-Methylaminophenol sulfate	1A	0.8	1.081
<i>trans</i> -Cinnamaldehyde	1A	1.4	1.53
Isoeugenol	1A	1.5	5.156
2-Mercaptobenzothiazole	1A	1.7	12.907
Cinnamic aldehyde	1A	1.9	4.808
3-Aminophenol	1B	3.2	2.99
Diethyl maleate	1B	3.6	8.049
Trimellitic anhydride	1B	4.7	0.862
Nickel sulfate	1B	4.8	1.027
4-Chloroaniline	1B	9	11.029
Sodium lauryl sulfate	1B	8.1	13.334
Citral	1B	9.2	7.143
α -Hexylcinnamaldehyde	1B	9.7	12.92
Eugenol	1B	10.1	8.851
Phenyl benzoate	1B	13.6	16.954
Cinnamic alcohol	1B	21	24.091
Cyclamen aldehyde	1B	22.3	41.496
Hydroxycitronellal	1B	24	13.636
Imidazolidinyl urea	1B	24	49.545
Ethylene glycol dimethacrylate	1B	28	31.751
Linalool	1B	30	27.596
Ethyl acrylate	1B	32.8	33.333
Isopropyl myristate	1B	44	9.44
Aniline	1B	47.5	73.596

2. 方法

2.1 EC1.6 値を用いた細区分基準の設定

2.1.1 解析方法

国際バリデーション研究において、当時汎用系統であった CBA/JN マウスを用いて取得された 32 物質（細区分 1A：13 物質、1B：19 物質）のデータを解析した（表 1）。任意の EC1.6 値を基準として 32 物質の細区分判定を行ったときの判定一致率を考慮し、最適な細区分基準を設定した。

2.1.2 解析結果と最適な判定基準

表 2 に、EC1.6 値=1~10%の任意の濃度を基準として細区分したときの判定一致率及び一致した物質数を示す。細区分 1A については、細区分基準を 6~10%としたときの一致率が 92.3%（12/13 物質）であり、最も高かった。6~10%の範囲における細区分 1B の一致率は、細区分基準が 6 又は 7%のとき、84.2%（16/19 物質）であった。したがって、EC1.6 値の細区分は 6 又は 7%を基準とすることが最適であると考えられた。ここでは、EC1.6 値=6%を細区分のための暫定基準とした。

表 2 任意濃度を細区分基準としたときの判定一致率及び物質数

細区分基準 (%)	細区分 1A	細区分 1B
1	61.5% (8/13)	94.7% (18/19)
2	76.9% (10/13)	89.5% (17/19)
3, 4	76.9% (10/13)	84.2% (16/19)
5	84.6% (11/13)	84.2% (16/19)
6, 7	92.3% (12/13)	84.2% (16/19)
8	92.3% (12/13)	78.9% (15/19)
9	92.3% (12/13)	73.7% (14/19)
10	92.3% (12/13)	68.4% (13/19)

2.2 CBA/J マウスにおける細区分判定基準の検証

2.2.1 実験方法

暫定基準の適用性を検証するため、現在国内で入手可能な汎用系統である CBA/J マウスを用い、LLNA の性能確認に使用される技能確認物質 15 物質を検証物質として OECD TG442B に従い LLNA: BrdU-ELISA を実施した。得られた SI から EC1.6 値を算出して、暫定基準に従い細区分判定を行った。また、汎用系統における暫定基準の妥当性を確認するため、得られた EC1.6 値と既知の EC3 値との相関解析を行った。

2.2.2 実験結果

表 3 に、各物質の細区分と得られた EC1.6 値及び暫定基準で判定した細区分結果を示す。EC1.6 値=6%を基準として判定した細区分結果は、全ての検証物質で既知の細区分

と一致した。また、CBA/J マウスにおける EC1.6 値は、既知の EC3 値と強い相関関係を示した ($r=0.9076$)。以上の結果から、EC1.6 値を用いた細区分判定基準は、汎用系統である CBA/J マウスに適用可能であることが示された。

表 3 検証物質の細区分と EC1.6 値及び細区分判定結果

物質名	細区分	EC1.6 値(%)	判定結果
<u>5-Chloro-2-methyl-4-isothiazolin-3-one</u>	1A	0.0095	1A
<u>2,4-Dinitrochlorobenzene</u>	1A	0.029	1A
<u>Cobalt(II) chloride</u>	1A	0.10	1A
<u>1,4-Phenylenediamine</u>	1A	0.22	1A
<u>Isoeugenol</u>	1A	1.3	1A
<u>2-Mercaptobenzothiazole</u>	1A	5.03	1A
<u>Eugenol</u>	1B	6.03	1B
<u>Imidazolidinyl urea</u>	1B	6.43	1B
<u>α-Hexylcinnamaldehyde</u>	1B	7.07	1B
<u>Cinnamic alcohol</u>	1B	10	1B
<u>Citral</u>	1B	11.7	1B
<u>Phenyl benzoate</u>	1B	24.3	1B
<u>Ethylene glycol dimethacrylate</u>	1B	28.18	1B
<u>Xylene</u>	1B	43.3	1B
<u>Methyl methacrylate</u>	1B	75	1B

下線：2.1 と共通の物質 (13 物質)

2.3 GHS 文書への収載に向けた取組み

2.1 及び 2.2 で得られた成果を基に、国連 GHS 小委員会に LLNA: BrdU-ELISA による細区分基準収載のための GHS 文書の改訂提案を行った。しかし、本基準が OECD TG442B に未収載であることから、改訂 10 版 (2023 年) では任意に適用可能な基準という補足的な付記に留まった。このため、OECD TG442B の改訂の提案を行うとともに再度 GHS 文書の改訂提案を行った。本基準は 2025 年に OECD TG442B に収載され、現在は GHS 文書改訂 12 版に正式な基準として収載されるよう議論を行っている。

3. まとめ

本研究により、実用的な LLNA: BrdU-ELISA による GHS 細区分基準を確立した。本基準は国連 GHS 文書への収載に向けて提案を行っており、2026 年 7 月に開催される GHS 小委員会において正式に承認された場合、2027 年発行の改訂 12 版に収載される予定である。

LLNA をベースにした 新規光アレルギー性試験法の開発と応用

発表者：前田 洋祐 (安全性評価技術研究所)

1. 背景及び目的

光アレルギー性皮膚炎は、化学物質にばく露されたのち、紫外線に曝されたときに生じるアレルギー反応のことであり、主に皮膚適用後の化粧品、医薬品等の化学物質によって生じることがある。また、近年、国内外でウェアラブル医療機器による接触性皮膚炎が複数報告されており、報告のあった医療機器材料には光アレルギー性物質の含有が確認されたものもある。このように、光アレルギー性はヒトにとって非常に重要な健康問題である。

化学物質の光アレルギー性を予測するために、Adjuvant and Strip 法¹⁾のようなモルモットを用いた試験法が一般的に用いられてきた。しかし、実験動物を用いた既存の光アレルギー性試験法は、炎症反応を観察して評価するため、実験動物の苦痛が強い上、長期の実験期間が必要であった。さらに、医薬品規制調和国際会議 (ICH) による「医薬品の光安全性評価ガイドライン」²⁾では、既存の光アレルギー性試験法は、ヒトに対する予測可能性が未知であることから、経皮ばく露される光アレルギー性評価に用いることは推奨されていない。

以上のことから、化学物質の光アレルギー性の評価は、ヒトの健康にとって重要であるものの、効果的な予測方法及び公定法は存在しない。

そこで本研究では、定量的に皮膚感作性を評価できる Local Lymph Node Assay (LLNA)³⁾を応用し、光アレルギー性を高精度かつ定量的に評価可能であり、ヒトでの予測可能性が高い試験法を開発を行った (研究①)。また、光アレルギー性が陽性となる標準試料を作製し、その抽出液の光アレルギー性を評価することで開発した試験法の医療機器への応用も試みたので報告する (研究②)。

2. 方法

2.1 研究① 光安全性 LLNA の開発

実験には雌性 CBA/Ca マウス (日本エスエルシー) を用い、被験物質にはヒトで光アレルギー性を有することが既知の 7 物質及び光アレルギー性陰性と推定される 6 物質の合計 13 物質を用いた。

光アレルギー性評価を行うために図 1 に示すフローからなる光安全性 LLNA を考案した。ステップ 1 で光アレルギー性を評価する判断のため、被験物質の UV 吸収の程度か

ら、モル吸光係数 (ϵ) 1,000 未満で光アレルギー性陰性と評価¹⁾し、1,000 以上でステップ 2 へ進むフローとした。ただし、本研究では、検証のため全 13 物質について、全ステップを実施した。

ステップ 2 では、光アレルギー性評価を行うための被験物質の用量設定に必要な情報として、LLNA による皮膚感作性評価を実施し、陽性の場合には皮膚感作性を示す最小濃度 (EC3) を求めた。また、耳介厚さの変化を指標とした光毒性を実施した。

ステップ 3 では、ステップ 2 で求めた皮膚感作性及び光毒性の認められなかった最高用量を試験濃度として用い、媒体対照群及び被験物質群にそれぞれ UV 照射群 (UV+) と UV 非照射群 (UV-) を設定し、光アレルギー性の評価を行った。その他の試験条件は LLNA に従った。また、被験物質群の各個体の H³-thymidine 取込量を媒体対照群の平均 H³-thymidine 取込量で除した値である photo Stimulation Index (pSI) を求めた。光アレルギー性評価は被験物質の pSI について UV (+/-) 群間で有意差検定 ($p < 0.05$) を実施し、有意差が生じた場合を陽性と判断した。

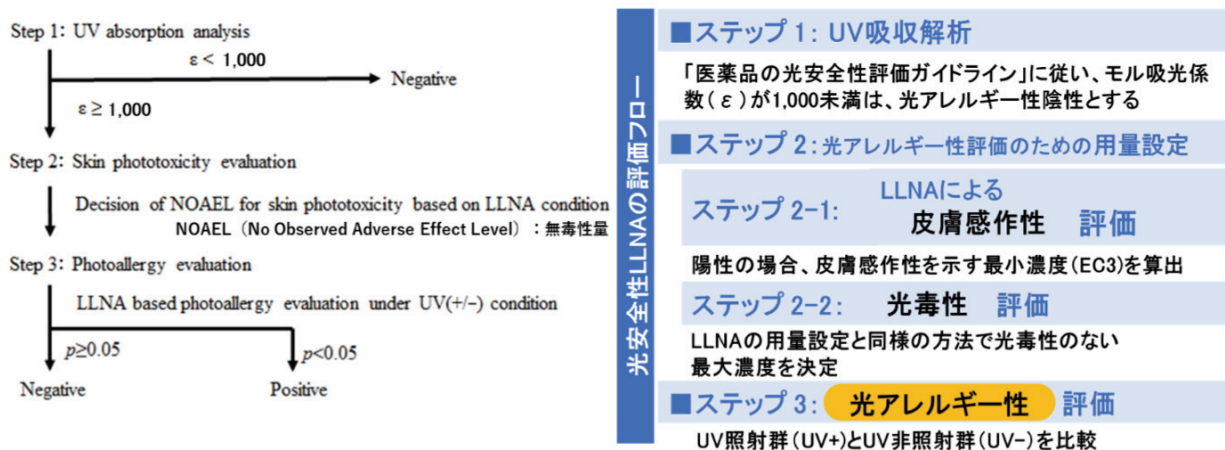


図 1 考案した光安全性 LLNA のフローチャート

2.2 研究② 医療機器への応用

母材となるポリマーとして、低温で成形が可能な直鎖状低密度ポリエチレン (LLDPE) を用いた。85°C に設定した熱ロール機で LLDPE のペレットを可塑化させ、光アレルギー性陽性物質である 3,3',4',5-Tetrachlorosalicylanilide (TCSA)、8-Methoxypsoralen (8-MOP) 及び Chlorpromazine hydrochloride (CPZ) の配合剤を混練した後に 120°C で圧縮成形することで、シート状の陽性材料を作製した。作製した陽性材料を細断し、材料/溶媒比が 0.2 g/mL になるようエタノールを加え、25°C で 24 時間振とうした。得られた抽出液を光安全性 LLNA に供した。

3. 結果

3.1 光安全性 LLNA の開発

各物質の光安全性 LLNA の結果を表 1 に示す。光アレルギー性陽性の 7 物質についてはいずれも陽性と判定された。また、光アレルギー性陰性と推定される 6 物質については陰性と判定され、既報の情報と合致した。同じテトラサイクリン系抗生物質であり、共に UV 吸収を有するが、光アレルギー性が陽性の Doxycycline Hydrochloride と陰性予想の Minocycline hydrochloride を明確に区別できた。

表 1 各被験物質の光安全性 LLNA による光アレルギー性評価結果

被験物質	試験濃度 (%)	UV +/-	pSI		光アレルギー性	
			平均	SE	判定	既報
Ethanol	100	-	0.8	0.1	N	EN
		+	0.6	0.0		
Propyleneglycol	100	-	1.0	0.2	N	EN
		+	0.7	0.1		
1,3-Butyleneglycol	100	-	1.0	0.1	N	EN
		+	0.7	0.1		
2-Propanol	100	-	0.8	0.1	N	EN
		+	0.7	0.1		
2-Ethylhexyl methacrylate	6.5	-	3.2	0.2	N	EN
		+	3.7	0.3		
Minocycline hydrochloride	5	-	1.8	0.4	N	EN
		+	1.5	0.2		
Ketoprofen	1	-	2.4	0.2	P	P
		+	4.1 **	0.4		
Piroxicam	0.25	-	1.8	0.2	P	P
		+	3.6 **	0.6		
Doxycycline hydrochloride	5	-	1.9	0.1	P	P
		+	3.0 **	0.4		
Promethazine hydrochloride	25	-	1.3	0.2	P	P
		+	12.7 **	2.0		
8-Methoxypsoralen	0.025	-	1.4	0.1	P	P
		+	3.9 **	0.6		
3,3',4',5-Tetrachlorosalicylanilide	0.006	-	1.6	0.3	P	P
		+	3.5 **	0.3		
Chlorpromazine hydrochloride	0.1	-	1.3	0.2	P	P
		+	13.3 **	2.3		

pSI: photo Stimulation Index, N: Negative, EN: Expected Negative,

P: Positive, SE: Standard Error, **: $P < 0.01$ (Unpaired t -test)

3.2 医療機器の光アレルギー性評価への応用

材料抽出液を用いた光安全性 LLNA の結果を図 2 に示す。光アレルギー性物質を含む 3 種の材料抽出液はいずれにおいても UV 照射群で pSI が有意に増加し、抽出液においても光アレルギー性陽性と判定することができた。

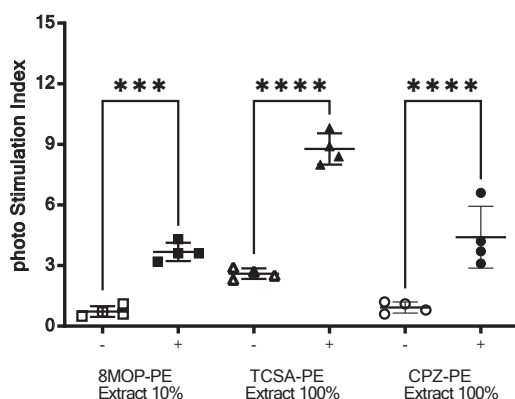


図 2 各陽性材料抽出液の光安全性 LLNA による光アレルギー性評価結果

*** : $P < 0.005$, **** : $P < 0.0001$ (Unpaired t -test)

4. まとめ

本研究では LLNA を適用して、光アレルギー性を高精度かつ定量的に評価可能であり、ヒトでの予測可能性が高い試験法として、光安全性 LLNA を開発した。本法の予測精度を検証した結果、13 物質について光アレルギー性の陽性/陰性の判定が既報と全て合致した。共に UV 吸収を有するものの光アレルギー性が異なるテトラサイクリン系抗生物質についても明確に光アレルギー性を区別できた。これらのことから、本法はヒトの光アレルギー性に対して高い予測精度を有し、定量的に評価可能であることが示唆された。さらに本法は炎症反応までの観察を必要としないため、従来法と比較して短期間かつ動物への苦痛も少なく、3R (代替、削減、苦痛の軽減) に配慮された試験法である。

さらに、開発した試験法の医療機器への応用として、光アレルギー性陽性の物質を含有する材料を開発し、抽出操作を含む抽出液の光安全性 LLNA への適用可能性について検討した。その結果、開発した材料の抽出液を全て陽性と判定できたことから、光安全性 LLNA の医療機器材料抽出液の光安全性評価への適用可能性が示唆された。

4. 参考文献

- 1) Sato, Y. et al. The Nishinohon journal of dermatology. 1980, 42(5), 831-837.
- 2) ICH (2013) Photosafety Evaluation of Pharmaceuticals S10
- 3) OECD (2010) Skin Sensitization: Local Lymph Node Assay No. 429

海洋生分解性プラスチックの評価法の開発 (ムーンショット型研究開発プロジェクト)

発表者：菊地 貴子 (東京事業所高分子技術部)
共同研究者：田口 浩然 (東京事業所高分子技術部)
尾坂 奈生 (東京事業所高分子技術部)

1. はじめに

近年、気候変動、海洋プラスチック問題、さらにはマイクロプラスチック問題など、地球規模の環境課題が深刻化している。これらの課題解決には従来技術の延長線上では不十分であり、革新的な研究開発が求められている。このような背景のもと、2020 年に「科学技術基本法」は「科学技術・イノベーション基本法」へと改正され、社会課題の解決と新たな価値創出を志向する政策へと転換された。その代表的な取り組みとして、ムーンショット型研究開発事業がある。

本機構は、目標 4「2050 年までに、地球環境再生に向けた持続可能な資源循環の実現」Cool Earth 及び Clean Earth のうち、Clean Earth 領域の「非可食性バイオマスを原料とした海洋分解可能なマルチロック型バイオポリマーの研究開発」のプロジェクトの一つに参画している。本プロジェクトでは、最先端ポリマー技術を活用し、農業用資材、漁業用資材、さらにはタイヤ摩耗粉など、環境中への流出が避けられず回収が困難なプラスチックを対象として、分解性と耐久性を両立する材料設計を目指している。本機構は本プロジェクトにおいて、海洋生分解性プラスチックの評価法の開発を担当している。

2. 海洋生分解性プラスチックの加速試験法の開発

既存の海洋生分解性試験 (ISO 23977、ISO 19679、ISO 18830、ISO 22404 など) は、天然海水、天然堆積物などを植種源として用いるため、採取場所、時期による微生物叢の差異に起因するばらつきが大きく、再現性が低い。また、試験期間が 6 か月から 24 か月と長期間を要することが課題である。

そこで、堆積物中の豊富な微生物を海水中に抽出した「抽出海水」を用い、さらに窒素源 (NH_4Cl) 及びリン源 (KH_2PO_4) を添加する加速試験法を開発した。この方法により、簡便な操作で迅速に試験液を調製でき、生分解速度の向上が確認された。

国内 16 地点及び海外 2 地点 (イギリス海峡、タイ湾) の植種源を用い、生分解性プラスチックであるポリカプロラクトン (PCL) を試料とし、ISO 23977-1 法との比較を行った結果、分解が遅い地点において試験期間の短縮が可能となり、地点間のばらつきも低減した。本手法は再現性良く材料の海洋生分解性を評価できる手法であることを確認

した¹⁾。本成果は、日本提案により国際標準化を進めている (ISO/DIS 18957)。

3. ナイロン (ポリアミド : PA) の海洋生分解性

本プロジェクトでは、新たに PA6 と PA6/66 共重合体が海洋生分解性を有することを見出した²⁾。PA6 及び PA6/66 共重合体について、開発した加速試験法を用いて評価した結果、PA6 では相対生分解度 91%、PA6/66 (95/5) では生分解度 97%を示し、本質的生分解性を有することを確認した。さらに、PA6 系オリゴマー (モノマー、ダイマー、トリマー) についても海洋生分解性を示し、海洋微生物による分解が進行することが示唆された³⁾。

PA6 の分解メカニズムを明らかにするため、高分解能 LC/MS (LC-LTQ Orbitrap XL) を用いて分解中間体の構造解析を行った。海洋生分解試験中の PA6 試料からバイオフィルムごとサンプルを取り出し、メタノールに浸漬して得られたメタノール抽出液を分析に用いた。高分解能 LC/MS の測定の結果、複雑な混合物であったため、マススペクトルから検出された物質の全体像を把握する目的で、Kendrick Mass Defect (KMD) 解析を行った。KMD 解析の結果、海洋生分解過程の PA6 サンプルから直鎖オリゴマー (1~3 量体) を検出した。一方、比較のために実施した人工海水浸漬試験及び未処理試料からは直鎖オリゴマーは検出されなかった。このことから、PA6 の主鎖切断は単純な加水分解ではなく、海洋微生物による解重合によって進行していることが示唆された。

4. まとめ

本研究では、海洋生分解性プラスチックの加速試験法を開発し、現在 ISO 規格化を進めている。また、ポリアミドに海洋生分解性を有することを明らかにし、海洋生分解過程の PA6 から分解中間体として直鎖状のオリゴマーを検出した。今後は、分解メカニズムの詳細説明を進め、海洋生分解プラスチックの社会実装への貢献を目指す。

5. 謝辞

本研究は、NEDO のムーンショット型研究開発事業の「非可食性バイオマスを原料とした海洋分解可能なマルチロック型バイオリマーの研究開発」により実施した。

6. 参考文献

- 1) Taguchi, H. et al. *Science of The Total Environment*. 2025, 1002, 180597.
- 2) Ando, S. et al. *ChemRxiv*. 2025.
- 3) Kubo, T. et al. *Macromolecules*. 2025, 58 (16), 8649-8657.

技 術 報 告

- 1) 医薬品・医療機器の抽出物・溶出物（E&L）試験における
化学的キャラクタリゼーションの最近の動向

高分子技術部門 三輪 怜史

- 2) 分取 HPLC による有用成分の受託精製

クロマト技術部門 坂牧 寛

- 3) GHS に基づく化学品の分類方法及び SDS・ラベル作成
—2025 年の JIS 改正を踏まえて—

安全性評価技術研究所 石井かおり

- 4) 底質環境における生態影響評価

化学物質安全部門 安達 竜太

- 5) 希土類元素（レアアース）評価の信頼性を高める JCSS 希
土類元素標準液の開発

化学標準部門 沢田 貴史

- 6) PFAS 追加規制に対応した製品中 PFAS 含有分析

環境技術部門 岩崎 圭

医薬品・医療機器の抽出物・溶出物 (E&L) 試験における化学的キャラクタリゼーションの 最近の動向

発表者： 三輪 怜史 (高分子技術部門)

1. 背景及び目的

医療機器及び医薬品の製造・包装・投与プロセスにおいて、材料から溶出する不純物が患者の安全性に及ぼす影響を評価することは、極めて重要な課題となっている。近年、動物福祉 (3R) の観点から、生体適合性評価は従来の動物試験 (*in vivo*) から機器分析 (*in chemico*) を用いた評価へと歴史的な転換を遂げている。特に、バイオ医薬品の製造現場においては、従来のステンレス設備からポリマー製のシングルユースシステム (SUS) への移行が進んでおり、ポリマー材料由来の溶出物に対するリスク評価の重要性が高まっている。

これに伴い各国の規制当局は、デバイス又は SUS から「何が、どれだけ溶出するか」を定量的に明らかにする化学的キャラクタリゼーションを推奨している。これにより、承認申請者には極微量な化合物の特定と、それに基づく毒性学的根拠の提示という、高度な分析化学スキルとリスク評価能力が求められるようになっている。

本技術報告では、Extractables & Leachables (E&L) 試験を取り巻く最新のグローバル規制動向を概説するとともに、これらの要求水準に応えるための化学的キャラクタリゼーション技術、及び毒性評価を統合した本機構のアプローチについて報告する。

2. グローバルガイドラインの最新動向

現在、E&L 試験は「医療機器」「製造設備 (SUS 等)」「医薬品」の 3 分野において、表 1 に示す法規制の適用が進められている。いずれのガイドラインも「リスクベースアプローチ」を基盤としており、申請者には高い技術的ハードルが課せられている。

表 1 E&L 試験のガイドライン

分野	ガイドライン及びその概略
医療機器	医療機器の化学的評価のグローバル基準である ISO 10993-18:2020 では、段階的アプローチ、網羅的抽出、及び分析評価閾値 (AET) に基づく未知物質の同定が明確に義務付けられた。日本の PMDA、米国の FDA、欧州の MDR においても本規格に基づく運用がなされている。さらに FDA

	は 2024 年に試験の推奨事項を示す Draft Guidance ¹⁾ を発行しており、より詳細かつ厳格な分析要件が提示されている。
製造設備	医薬品製造ラインで使用されるコンポーネントに対する評価として、法的拘束力を持つ米国薬局方 USP <665> (2026 年 5 月施行) と、製薬業界のベストプラクティスとして定着している BioPhorum プロトコル ²⁾ が双璧をなしている。
医薬品	抽出物及び溶出物評価の基準として ICH Q3E の議論が進んでおり、2025 年にステップ 2 合意、2027 年にステップ 4 (最終化) が予定されている。製剤容器にとどまらず、製造プロセス全体を通じた累積的リスク評価及び、分析化学と毒性学の包括的な統合が求められている。

3. 段階的アプローチによる評価プロセスの確立

化学的キャラクタリゼーションは、むやみに機器分析を行うのではなく、合理的かつ科学的な段階的アプローチによって進めることが鉄則である。

第一段階の抽出物試験では、材料に対して臨床における実使用環境より過酷な条件 (高温、長時間の溶媒浸漬など) を負荷し、強制的に化合物を抽出する。これにより、潜在的なリスク (ワーストケース) を特定し、その後の毒性評価及び/又は溶出物試験のターゲットを決定する。

第二段階の溶出物試験では、抽出物試験で特定された高リスク物質をターゲットとし、実際の使用条件において製剤又は体内へ実際に移行する患者への曝露量を定量的に評価する。

3.1. 網羅的抽出の証明

長期接触デバイス等においては、部材からの網羅的抽出が要求される。これを証明するためには、極性、準極性、非極性という異なる極性を持つ複数の溶媒による抽出が不可欠である。

溶媒選定においては、材料から化合物を抽出することと、材料自体を破壊 (劣化) させることを明確に区別しなければならない。非現実的な過酷条件で生じた材料の分解物は、その後の毒性評価においてノイズとなる。また、抽出用溶媒に関しては、FDA Draft Guidance では過去頻繁に用いられてきた 50%エタノール等のアルコール水溶液について、相分離及び/又は予期せぬポリマー膨潤を引き起こすとして原則非推奨としている一方、USP <665>及び BioPhorum では 50%エタノールの使用が規定されている。申請先のガイドラインに合わせた柔軟かつ理論的な試験設計が不可欠である。

3.2. 分析評価閾値 (AET) の厳格化と分析不確実性係数 (UF) の正当化

E&L 試験の最大の技術的ハードルが、クロマトグラム上に現れる無数の微量ピークの

うち、どのピークまでを同定・毒性評価の対象とするかを定める AET の科学的な設定である。AET は次式により求める。

$$AET = \frac{DBT \times Dose\ Unit}{D \times UF}$$

ここで、DBT は安全性・毒性学的懸念に基づく用量ベースの閾値、Dose Unit は容器の容量等、D は最大 1 日曝露量を指す。

近年、規制当局の審査において問われるのが、化合物のレスポンスを補正する係数である UF の取り扱いである。分析メソッドによって作成された相対応答係数 (RRF) のデータベースに基づき、設定した UF の妥当性を科学的に正当化する能力が強く求められている。

4. 未知物質の特定に向けた高度分析ソリューション

4.1. 最新ガイドラインが要求する高分解能質量分析 (HRMS)

本機構では、揮発性 (VOC)、準揮発性 (SVOC)、難揮発性 (NVOC)、金属元素 (Element) の全プロファイルに対して、ヘッドスペース-ガスクロマトグラフィー質量分析法、ガスクロマトグラフィー質量分析法、液体クロマトグラフィー質量分析 (LC/MS) 法、誘導結合プラズマ質量分析法を網羅した分析体制を構築している。

特に、NVOC の LC/MS 分析において、FDA Draft Guidance は「質量精度：親イオン 10 ppm 未満、プロダクトイオン 20 ppm 未満」「質量分解能：最低 10,000」という高いハードルを設定している。これに対し、本機構では質量精度 1 ppm 未満、最高分解能 40,000 を有する LC/四重極飛行時間質量分析 (Q-TOFMS) を適用し、化合物の元素組成を一意に決定できる分析インフラを有している。

4.2. 同定レベルの向上と網羅的スクリーニング

FDA のガイダンスでは、化合物の同定レベルを 4 段階 (Confirmed, Confident, Tentative, Unknown) に分類し、毒性評価には原則として Confirmed (真物質と一致) 又は Confident (ライブラリデータ等と十分に一致) レベルを推奨している。構造が特定できない Unknown (不明) のままでは、リスク評価を前に進めることができない。

Unknown を上位レベルへ引き上げるため、本機構は独自の添加剤データベース及び標準ポリマーのデータを有している。これに加え、HRMS において、全ての親イオンとフラグメント (子) イオンの情報を自動取得する Data Independent Acquisition (DIA) 法を採用している。この閾値を持たない完全網羅的スクリーニングにより、ポリマー添加剤の微量な分解物を見逃しリスクを排除している。また、全データは完全なデジタルアーカイブとして保存されるため、申請後に当局から追加の解析報告を求められた場合でも、サンプルの再抽出及び再測定を行うことなく遡及的に構造推定を行うことが可能である。

5. 化学分析と毒性学のシームレスな統合

E&L 試験の最終目的は、特定された化合物のプロファイルが患者の人体に対して安全かを証明する毒性学的リスク評価 (TRA) を完了させることである。単に「言われた通りに測定するだけの受託分析」では、年々複雑化・厳格化する承認の壁を乗り越えることはできない。

本機構の強みは、化学分析の専門家と、日本毒性学会認定トキシコロジスト等の毒性評価の専門家が常駐し、シームレスな連携体制を構築している点にある。ISO 10993-17:2023 に準拠した評価手法はもちろんのこと、未知化合物に対する *in silico* 予測 (QSAR による発がん性・変異原性予測など) を駆使し、分析結果を直接安全性証明へと変換するデータパッケージを提供する。

6. まとめ

医療機器又は医薬品の製造プロセスを取り巻く規制環境は大きな転換期を迎え、高度な化学的キャラクタリゼーション技術と毒性評価の統合が求められている。網羅的抽出の科学的証明、AET の算出と正当化、HRMS を用いた未知化合物の特定、そして専門的な毒性評価は、製品を迅速に市場へ送り出すための生命線である。

本機構は、長年にわたり蓄積した高度な分析化学的知見と毒性学の専門性を融合させたワンストップソリューションにより、規制要件の壁を超えて、皆様の革新的な製品を安全かつ速やかに市場へ届けるためのパートナーとして貢献していく所存である。

7. 参考文献

- 1) FDA (2024) Chemical Analysis for Biocompatibility Assessment of Medical Devices Draft Guidance for Industry and Food and Drug Administration Staff
- 2) BioPhorum (2020) Biophorum best practice guide for extractables testing of polymeric single-use components used in biopharmaceutical manufacturing

分取 HPLC による有用成分の受託精製

発表者：坂牧 寛 (クロマト技術部門)

1. はじめに

本機構は、1990 年に高速液体クロマトグラフィー (HPLC) 用逆相カラムである *L-column* シリーズを開発して以来、ユーザーの多様なニーズに対応するため、製品ラインアップを拡充してきた。2007 年には微量分析に対する需要の高まりに対応し、低吸着特性を有する *L-column2* を、2017 年には耐久性を著しく向上させた *L-column3* を上市している。*L-column3* は、溶離液の使用可能な pH 範囲が広く、比較的高いカラム温度条件下においても長時間使用が可能であり、劣化しにくい点を特長とする。

本機構では、2024 年より HPLC 分析メソッド開発支援及び分取 HPLC による受託精製を開始した。分析メソッド開発支援では、検討工程の自動化と、本機構が有する豊富な知識及び経験を活用することで、目的に即した高精度な分析メソッドを提供している。分取 HPLC による受託精製では、分析メソッド開発により得られた知見を分取 HPLC へ応用し、*L-column* シリーズを分取カラムとして用いることで、高精度かつ高効率な分画を可能としている。

また、カラム製造を通じて蓄積された精製技術を活かし、99% 以上の高純度精製品の提供が可能である。さらに、得られたフラクション又は精製品については、高分解能質量分析計 (高分解能 MS) による構造解析及び核磁気共鳴装置 (NMR) による構造決定にも対応している。本技術報告では、これらの受託精製サービスのモデルケースとして、生薬中の有用成分の精製、標準試料の高純度化とその不純物分取、並びにバイオ生産物評価のための代謝物精製と構造解析について紹介する。

2. 分取 HPLC による分取の流れ

分取 HPLC を用いた有用成分の精製では、まず前処理として、目的有用成分を効率的に回収するため、抽出方法を検討し、抽出溶媒及び抽出条件を最適化する。得られた抽出物については、分析及び分取操作に適した溶解溶媒への転溶を含め、必要に応じて検討を行う。

次に、目的成分を高効率に分離するため、分取用 HPLC メソッド及び純度測定用 HPLC メソッドを開発し、移動相組成、グラジエント条件などを最適化する。併せて、目的成分の純度及び回収効率を考慮し、分取時の注入量を検討する。確立した条件に基づき、目的成分を得るために必要回数の分取 HPLC を実施する。

回収したフラクションについては、エバポレーター等による溶媒除去、析出、ろ過などの条件を適宜選択し、有用成分を回収する。得られた試料は HPLC により純度を測定

する。構造評価が必要な場合には、高分解能質量分析計 (MS) により精密質量情報取得して分子式を推定した後、赤外分光分析 (IR) 及び核磁気共鳴分光法 (NMR) を用いて最終的な構造決定を行う。さらに本機構では、決定された構造情報に基づき、*in silico* 解析による毒性評価の提供までをワンストップで実施することが可能である。

3. 生薬中の有用成分の精製 (サンシシ末)

生薬などの天然物には多様な成分が含まれるため、高純度な目的成分を得る手段として、分取 HPLC による精製は有効である。本検討では、生薬サンシシ末中に含まれる有用成分であるゲニポシドを対象として、分取 HPLC 条件の検討を行った。

まず、分離条件の最適化を目的として、分析 HPLC によりゲニポシド及び隣接ピークとの分離度向上を目指し、カラム及び溶離液の検討を行った。その結果、*L-column3 C18* とアセトニトリル/水の組合せが最適であることを確認した。次に、自動分析ソフトウェアを用いた条件検討により、分析時間が短く、かつ良好な分離が得られる分析条件を選択した。

選定した分析条件を基に、内径 20 mm のカラムを用いた分取 HPLC ヘスケールアップを行った。カラム長の変更に伴い、流量の補正に加えてグラジエント時間の補正も行った。さらに、分離状態及び注入量の検討を行った結果、最大 2000 μL の注入量においても 99.9% の純度を有するゲニポシドが得られる条件を確立した。

回収したフラクションを減圧乾燥して精製したところ、1 回の注入あたり 8.46 mg のゲニポシドを純度 99.9% 以上で得ることができた (図 1)。以上より、分取 HPLC を用いることで、生薬由来の有用成分を高純度で分取・精製できることを示した。

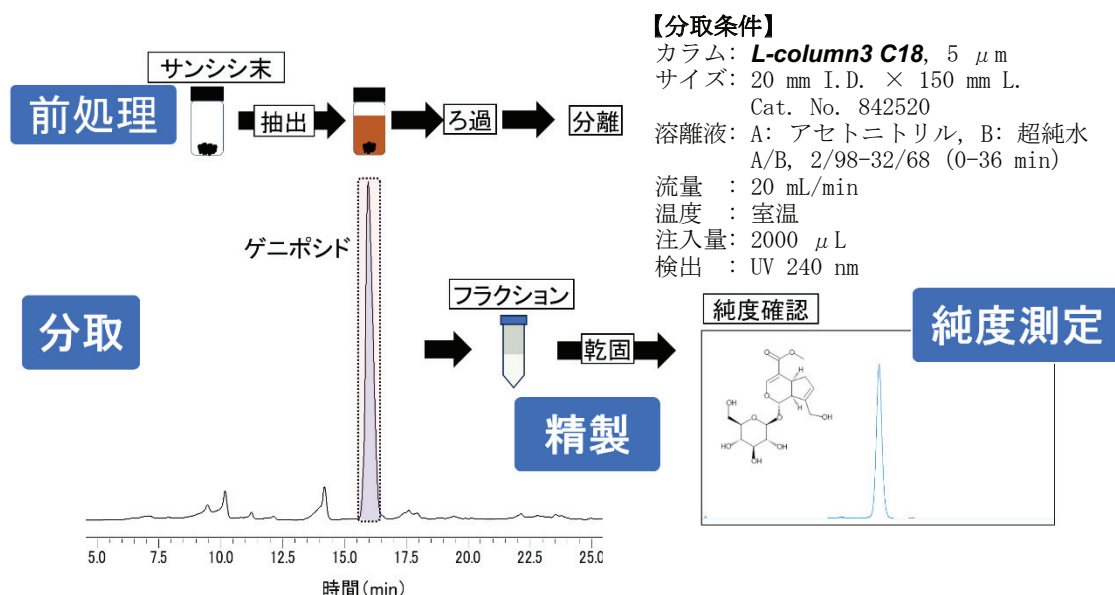


図 1 分取・精製結果 (ゲニポシド)

4. プラノプロフェンの高純度化とその不純物分取

標準品は分析における基準物質であるため、純度が同定及び定量結果の信頼性を大きく左右する。購入した医薬品の主成分であるプラノプロフェンは、HPLC の面積百分率法により純度 96.9% と評価された。本検討では、標準品の純度向上を目的として、分取 HPLC による精製を行った。

まず、標準品に含まれる不純物を分離可能な分析メソッドを検討し、次に内径 20 mm のカラムを用いた分取 HPLC へスケールアップした。このような標準品の高純度化を目的とした分取においては、試料を可能な限り高濃度で溶解させることが重要である。今回は DMSO を用いることで 200 mg/mL 以上の溶解が可能であったが、試料注入時に析出が生じたため、最終的に試料濃度 100 mg/mL、注入量 1000 μ L とした。その結果、1 回の注入で純度 99.1% のプラノプロフェンを 86.9 mg 得ることができた。また、不純物も同様に 1 回の注入で純度 97.2%、0.3 mg 得ることができた。

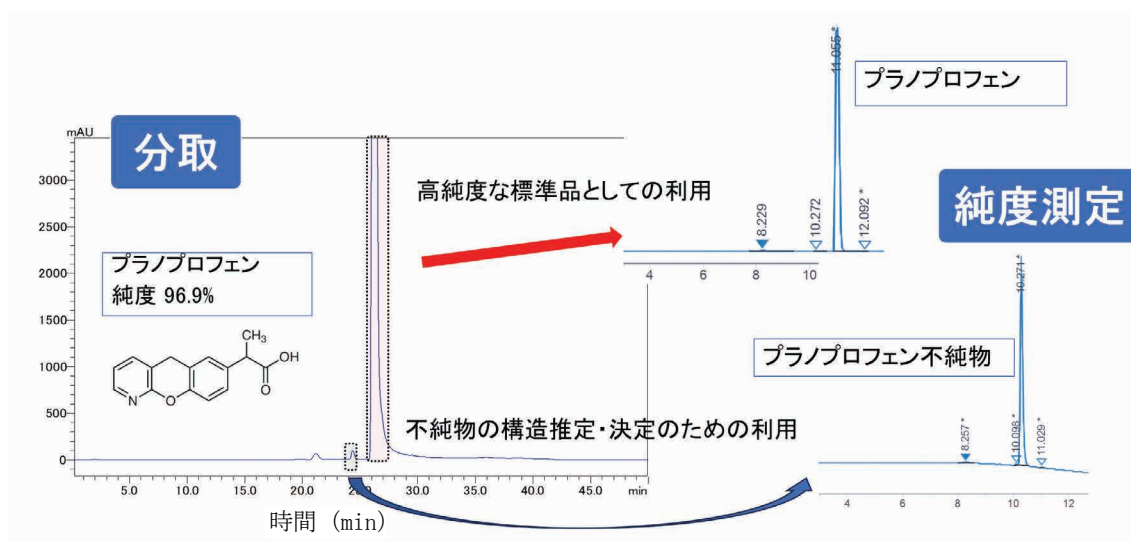


図 2 プラノプロフェンの高純度化

5. バイオ生産物評価のための代謝物精製と構造解析

高分解能 MS では、測定される精密質量に基づき、分析対象物の化学式を推定することが可能である。本検討では、細胞に EPA を添加して培養した後に得られた代謝物を試料とした。試料には高濃度成分から微量成分まで多様な成分が含まれており、直接高分解能 MS に注入すると装置汚染及び測定への悪影響が懸念される。

そこで、前処理として分取 HPLC により分画を行い、得られた画分を対象として高分解能 MS による構造推定を実施した。MS スキャン分析の結果、分子式 $C_{20}H_{30}O_3$ の成分が検出された。さらに、MS/MS スキャンによりプロダクトイオンを確認したところ、得られたフラグメントパターンが 5-ヒドロキシエイコサペンタエン酸 (5-HEPE) と一致したことから、本成分は 5-HEPE であると推定された (図 3)。

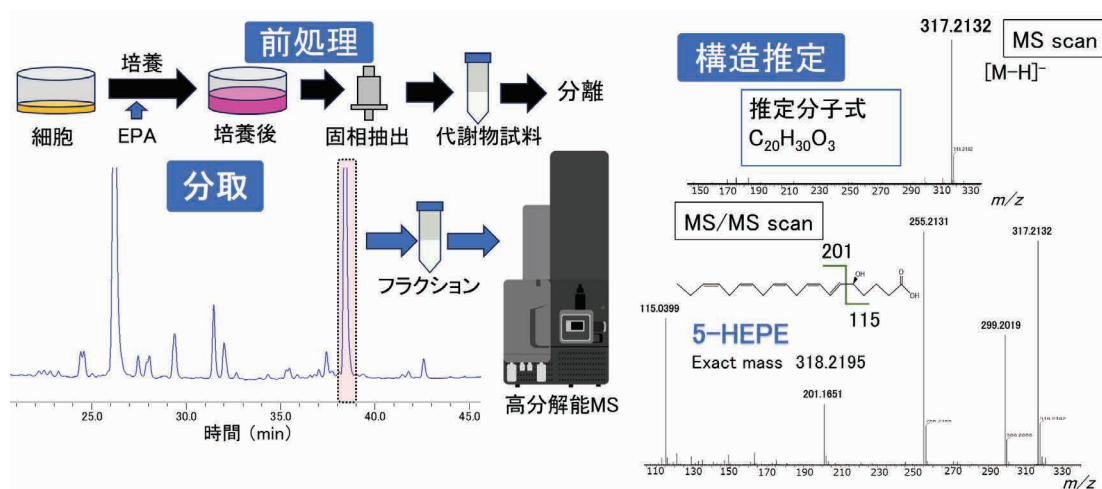


図 3 EPA 代謝物の測定

6. おわりに

本技術報告では、分取 HPLC を用いた精製について、複数のモデルケースを通じてその有効性及び実用性を示した。本手法は、医薬品原料、天然物など多様な試料に適用可能であり、目的に応じて高純度な目的成分の分取・精製を実現できる。

本機構は、従来のカラム製造に加え、分析メソッド開発支援及び分取 HPLC による受託精製を高付加価値サービスとして展開することを目指している。今後は、より多様な分析対象及び業界ニーズに対応するため、技術的知見の更なる蓄積及び試験体制の強化に取り組む予定である。

GHS に基づく化学品の分類方法及び SDS・ラベル作成 —2025 年の JIS 改正を踏まえて—

発 表 者：石井 かおり (安全性評価技術研究所)

1. はじめに

SDS とは「安全データシート (Safety Data Sheet)」の略で、化学品 (化学物質及び混合物) の危険有害性及び安全に取り扱うための注意事項等を伝達する文書である。事業者が化学品を他の事業者に譲渡・提供する、又は労働者に使用させる場合の情報伝達の手段として広く活用されている。

GHS とは、国連から勧告された「The Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (化学品の分類および表示に関する世界調和システム)」の略称で、化学品に固有な危険有害性を特定し、その危険有害性に関する情報を取り扱う全ての人々に伝達することを目的としている。GHS では、危険有害性を判定するための国際的に統一された「分類基準」と、危険有害性の情報伝達様式 (「SDS・ラベル」) が決められている。

GHS に準拠した SDS が各国の法規制において導入されおり、日本では、労働安全衛生法 (安衛法)、化学物質排出把握管理促進法 (化管法)、毒物及び劇物取締法 (毒劇法) において SDS の提供を事業者に義務付けている。ラベル表示については、安衛法と毒劇法では義務となっており、化管法では努力義務となっている。また、日本では、日本産業規格 (JIS) による GHS に基づく化学品の分類方法 (JIS Z 7252)、SDS・ラベル表示等の情報伝達の標準化に関する規格 (JIS Z 7253) が、それぞれ制定されており、これらに従うことで、安衛法、化管法、毒劇法に準拠し、GHS にも対応した SDS、ラベルを作成・提供することが可能である (図 1)。

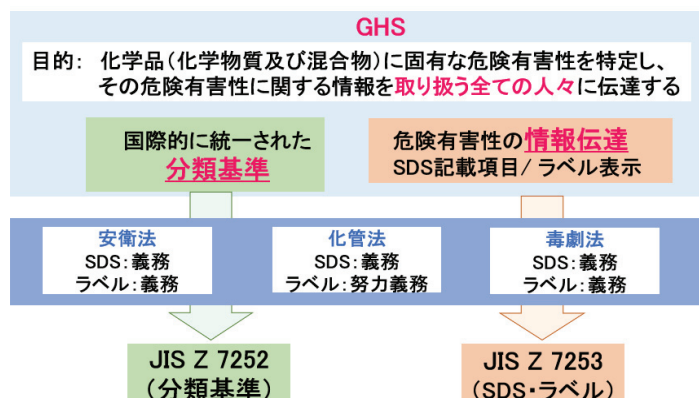


図 1 GHS と JIS Z 7252/7253 の関係

国連 GHS 文書は 2 年に一回の頻度で改訂されており、最新の国連 GHS 文書は改訂 11 版 (2025) となっている。JIS Z 7252 及び JIS Z 7253 は、国連 GHS 文書に基づいて制

定されており、今回の改正前の JIS は、国連 GHS 文書改訂 6 版 (2015) に準拠した内容であった。今回 6 年ぶりに改正された JIS は、国連 GHS 文書改訂 9 版 (2021) に準拠している (一部、最新の改訂 11 版の内容も含む)。JIS Z 7252 及び JIS Z 7253 の主な改正内容を以下に紹介する。

2. JIS Z 7252 (分類基準に関する JIS) の主な改正点

2.1 物理化学的危険性に関する分類の見直し

今回の JIS 改正では、物理化学的危険性の一部の分類項目が見直された (表 1)。

- ▶ 「爆発物」: 国連危険物輸送勧告に基づく分類であったが、国連 GHS 文書改訂 9 版に基づく分類に変更
- ▶ 「可燃性ガス」: 可燃性ガスの区分 1 を、ガスの種類に応じて細分化
- ▶ 「エアゾール」: 新たなクラス (「加圧下化学品」) の追加

表 1 物理化学的危険性に関する分類の見直し

分類項目	変更箇所	
	旧 JIS (2019)	新 JIS (2025)
爆発物	等級 1.1~1.6 (国連危険物輸送勧告に基づく分類)	区分 1、2A、2B、2C (国連 GHS 文書に基づく分類) ※国連危険物輸送勧告に基づく等級は別途表示
可燃性ガス	区分 1	区分 1 を細分化 (ガスの種類で細分化) ・区分 1A (可燃性ガス) ・区分 1A (自然発火性ガス) ・区分 1A (化学的に不安定なガス A/B) ・区分 1B (高圧ガス保安法の可燃性不活性ガスに相当)
エアゾール	エアゾール	エアゾール及び加圧下化学品* *ガスにより加圧された液体又は固体。高圧ガスとエアゾールの中間に相当するクラス。可燃性の性状を踏まえて区分 1~3 に分類。

「爆発物」、「可燃性ガス」又は「エアゾール」に該当する製品を取り扱っている事業者は、新しい JIS Z 7252 に従って分類を見直し、SDS 及びラベルの更新を行う必要がある。

2.2 *in vitro* 等代替法試験の利用に関する追記 (健康有害性)

「皮膚腐食性/刺激性」、「眼に対する重篤な損傷性/刺激性」及び「呼吸器感作性又は皮膚感作性」の項目において、『専門家の判断によって、国連 GHS 文書の最新版に記載されている判定方法 [インビトロ/エクスビボ (*in vitro/ex vivo*) 試験結果を使った判定方法等] を使ってもよい。』という文言が追記された。この文言の追記は、国連 GHS 文書改訂 11 版の内容に基づくものである。

本機構では、*in vitro* 等代替法試験の実施が可能である。本機構で試験を実施する

場合の特徴として、

- ▶ 動物福祉に配慮した評価が可能
- ▶ 法規制対応、GHS 分類等、目的に応じた最適な試験法の提案が可能
- ▶ 日本毒性学会認定トキシコロジスト等の毒性専門家が GHS 分類を判断が挙げられる。

3. JIS Z 7253 (SDS・ラベルに関する JIS) の主な改正点

JIS Z 7253 の主な改正点として、国内法令との連携強化、「緊急時応急措置指針番号」の追加 (任意)、作業場でのデジタル表示への対応等が挙げられるが、本技術報告では、『「危険有害性情報」及び「注意書き」の大幅な見直し』について報告する。

「危険有害性情報 (Hazard statement)」とは、GHS で定められている化学品の危険性・有害性を示す世界共通の文言である。「注意書き (Precautionary statement)」とは、危険有害性をもつ化学品へのばく露、又は、その不適切な貯蔵や取扱いから発生する被害を防ぐため、又は最小化するために取るべき推奨措置を記載した文言のことである。JIS Z 7252 において見直された分類項目 (爆発物、可燃性ガス、エアゾール、加圧下化学品) については、「危険有害性情報」の変更、削除、追加が行われた。「注意書き」についても、国連 GHS 文書改訂 9 版準拠に伴い、大幅な見直しが行われた。そのため、該当する分類項目がある場合、SDS 及びラベルの確認・更新が必要である。

表 2 「注意書き」の変更例

	旧 JIS (2019)	新 JIS (2025)
「安全対策」の注意書き	P201: 使用前に取扱説明書を入手すること。	P203: 使用前に全ての安全説明書を入手し、読み、従うこと。
	P202: 全ての安全注意を読み理解するまで取り扱わないこと。	
「応急処置」の注意書き	P308 + P313: ばく露又はばく露の懸念がある場合: 医師の診察/手当てを受けること。	P318: ばく露又はその懸念がある場合は、医学的助言を求めること。

4. 経過措置期間

今回の改正では 5 年間 (2030 年 12 月 24 日まで) の経過措置期間が設けられている。前回改正時の 3 年間から 5 年間に延長された主な理由は、前回と比較して安衛法の表示・通知義務対象物質が大幅に増えているためであり、3. に記載した JIS Z 7253 の大幅な改正に適切に対処できるよう事業者配慮されたものである。ただし、JIS 改正の趣旨を踏まえれば、5 年間よりも短い期間で対応することが望ましいとされている。

5. 本機構の SDS 作成業務

本機構では、依頼者から提供される成分情報を確認、同定し、SDS 作成対象の化学品

に関する情報（CAS 登録番号、含有率、物性情報等）に基づき、必要に応じて本機構が追加の情報調査を行い、提供情報と合わせた総合的な判断により化学品の GHS 分類を実施する。その後、成分情報の開示/非開示の検討、化学品を安全に取り扱うための注意事項等の整理、さらに法令情報、許容濃度等の確認を実施し、SDS の作成を行っている。成分情報の開示については、化学品としての危険有害性、危険有害性に寄与する成分、各種法規制で規定されている成分等を総合的に考慮して提案している（図 2）。

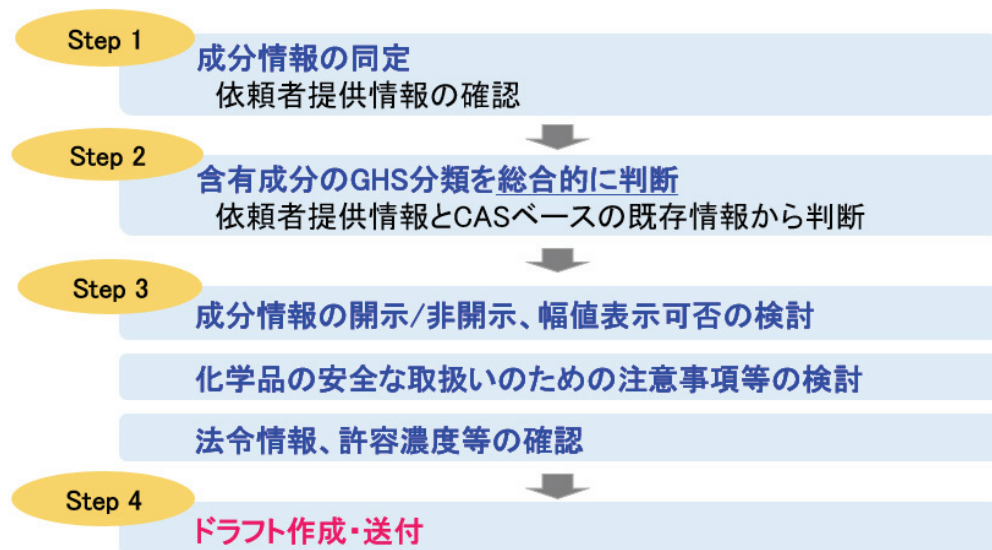


図 2 本機構の SDS・ラベル作成のフロー

6. おわりに

本技術報告では、JIS Z 7252/7253 の改正に対応した SDS、ラベル作成について紹介した。本機構では、事業者からの依頼により、これまでに国内外向けに 4,000 件以上の SDS を作成した実績がある。今回の JIS 改正に伴う SDS 及びラベル作成についてご要望があれば、是非お問い合わせ頂きたい。

7. 資料

- 1) JIS Z 7252:2025 GHS に基づく化学品の分類方法
- 2) JIS Z 7253:2025 GHS に基づく化学品の危険有害性の情報伝達方法ーラベル，作業場内の表示及び安全データシート（SDS）

底質環境における生態影響評価

発表者：安達 竜太 (化学物質安全部門)

1. 背景及び目的

環境リスク評価では、環境リスクは評価対象の化学物質の予測環境中濃度を求める暴露評価と、環境生物を用いた生態毒性試験データから、その化学物質の予測無影響濃度を求める有害性評価の掛け合わせとして求められる。一般的に、予測環境中濃度は河川等の水系での評価を主な対象とすることから、その場合の有害性評価では、藻類、ミジンコ類、魚類といった、水圏の食物連鎖の各栄養段階を代表する水生生物種に対する生態毒性試験データを用いることが基本である。一方で、評価対象の化学物質が底質へ移行する懸念がある場合は底質環境におけるリスク評価を行うことが求められる。この場合、暴露評価は底質における予測環境中濃度を算出し、有害性評価は底生生物を用いた生態毒性試験結果により底生生物に対する予測無影響濃度を求める必要がある。

一般的に、底質環境における生態影響評価は環境リスク評価において高次の評価という位置付けとなり、底生生物を用いた生態毒性試験は水生生物と比較して実施される頻度は高くない。例えば、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律 (以下、化審法) の生態影響リスク評価では、まずスクリーニング評価において水生生物の生態毒性試験データに基づき優先評価化学物質への指定がされたのち、リスク評価 (一次) の評価Ⅱ以降において、化学物質の性状に応じて底生生物も評価対象に追加されることになっている。

しかしながら、化審法では、これまで優先評価化学物質となった 221 物質中、令和 8 年 4 月 1 日現在でリスク評価 (一次) 評価Ⅰ段階に 88 物質、評価Ⅱ段階に 46 物質が移行しており、詳細なリスク評価へ進むにつれ、底生生物への生態影響評価が必要と判断される化学物質が明らかになりつつある。また、農薬取締法においては、近年、水生生物に対する農薬の長期暴露の影響評価が求められることになったが、ユスリカをはじめとする底生生物に対しても、長期的な影響を評価できる底質毒性試験の必要性が指摘されている。さらに近年、環境汚染物質として改めて認知されているマイクロプラスチックについても、プラスチック自体は水溶性が低く生物利用性が低い一方で、マイクロプラスチックは水面に浮遊したのち沈降し底質に堆積するため、底質環境における底生生物への影響が懸念されている。このような背景により、底質環境における生態影響を評価するための、底生生物を用いた底質毒性試験の重要性が改めて高まっている。

なお、化審法においては底生生物を用いた底質毒性試験として、既に、経済協力開発機構テストガイドライン (以後 OECD TG) 218「底質添加によるユスリカ毒性試験」が採択されている。

ユスリカは、水面付近に産卵された卵塊から孵化した幼虫が水底の底質に営巣して成長し、終齢幼虫になると水面で蛹化、そこから羽化して成虫となり、空中に飛翔する。成虫は交尾後、また、水面付近に卵塊を産み付けるといふ、底質から気相までを縦断的に循環するライフサイクルを有する (図 1)。

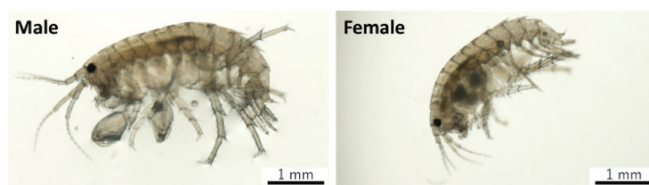


引用：第20回生態影響試験実習セミナー配布資料

図 1 セスジユスリカのライフサイクル

OECD TG 218 は、国内種のセスジユスリカ (*Chironomus yoshimatsui*) を用いて、1 齢幼虫から羽化するまでのステージにおける化学物質の影響を調査する、最大 28 日間の試験である。本機構はこれまで、化審法に基づく優良試験所基準 (Good Laboratory Practice ; GLP) における、当該試験の国内で数少ない GLP 適合試験施設である。環境省事業などでも数多くの試験実績があり、過去には複数の農薬を用いた当該試験の結果を論文化し報告^{1),2)}するなど、豊富な経験を有している。

一方で近年、リスク評価の精緻化のために、底質毒性試験種の拡充の取り組みがなされており、新たな底生生物試験として淡水ヨコエビ (*Hyalella azteca*) (図 2) 底質毒性試験の OECD TG 化が議論されている。



出典：OECD guideline draft

図 2 淡水ヨコエビ (*Hyalella azteca*)

ヨコエビは端脚目に含まれる小型甲殻類であり、あらゆる環境に生息する、食物連鎖における重要な餌資源生物である。ヨコエビの多くは体節が側偏しており横這いで移動する。水域の底質、砂礫の隙間等に生息し、底質の有機物の分解者としての役割をもつ。中でも、*Hyalella azteca* は古くから実験生物として多くの実績があることから、新たな底質毒性試験の対象生物となった。*Hyalella azteca* の底質毒性試験では化学物質に暴露させた後、産仔数を計数することで繁殖に対する影響も評価することになっており、OECD TG 218 よりも広いライフサイクルをカバーする設計になっている (図 3)。本機構はピレンを被験物質とする当該試験の国際リングテストに参加したため、その試験概要について以下に紹介する。

2. ピレンを用いた淡水ヨコエビ (*Hyalella azteca*) 底質毒性試験

2.1 試験方法

被験物質としてピレン (CAS No. :129-00-0) を用いて、リングテストの標準操作手順書に基づき、淡水ヨコエビ (*Hyalella azteca*) 底質毒性試験を実施した (図 3)。

被験物質を石英砂に吸着させた後、ピートモス及びはくとう土と混合して人工底質を調製し、試験容器へ分注した。これに試験用水 (SAM5-S 人工調製水) を添加し、暴露開始前に水-底質間でのピレンの平衡化を図った。なお、試験用水はかけ流しの流水式としたが、換水率が低いことから、1 日のうち一定時間のみ流水をする間欠的な流水暴露とした (半流水式)。

平衡化後、試験容器に 7~8 日齢の個体を 1 試験容器あたり 10 個体投入し、28 日間の底質暴露を行った。その後、繁殖評価のために被験物質を含まない石英砂のみの試験条件下でさらに 14 日間

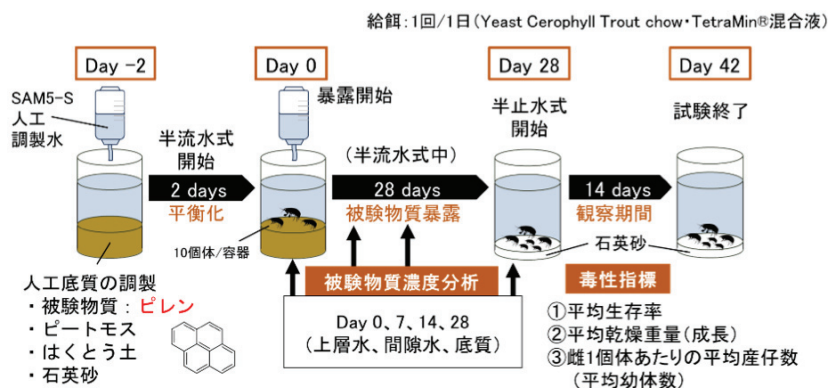
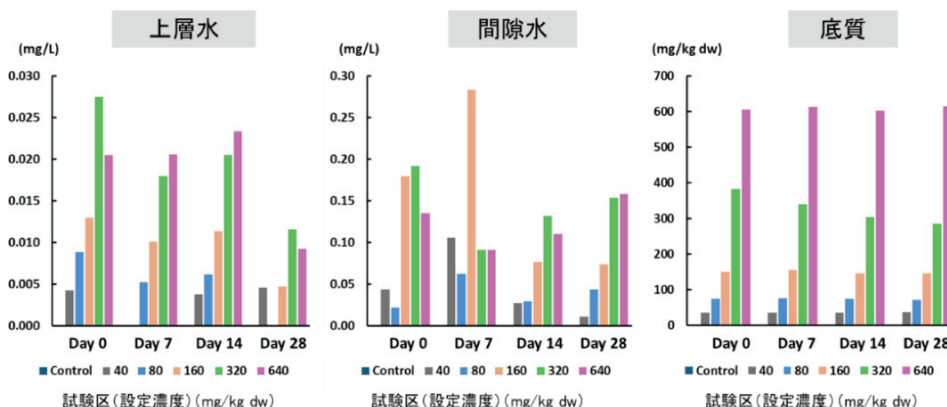


図 3 淡水ヨコエビ (*Hyalella azteca*) 底質毒性試験の概要

観察を継続した。暴露期間中、0、7、14 及び 28 日後に上層水、間隙水及び底質中の被験物質濃度を測定した。また、毒性指標として暴露終了時の各試験区における平均生存率、平均乾燥重量、雌 1 個体あたりの平均産仔数 (平均幼体数) を算出した。

2.2 試験結果

暴露 0、7、14 及び 28 日後における上層水、間隙水及び底質中の被験物質濃度測定結果を図 4 に示す。底質において設定濃度に対して 88.9~120%の被験物質が検出され、被験物質はほとんどが底質中に残存していた。



データの無い部分は定量下限未満 (上層水・間隙水: <0.00200 mg/L、底質: <1.49 mg/kg dw)

図 4 暴露 0、7、14 及び 28 日後の上層水、間隙水及び底質中の被験物質濃度測定結果

一方、上層水及び間隙水においては底質中と比較して相対的に低濃度であり、設定濃度に対して一部濃度相関は認められなかった。

試験生物の反応については、いずれの毒性指標においても概ね濃度依存的な低下傾向が認められた (図 5)。平均生存率については設定濃度 160 mg/kg dw (dw:乾燥重量)以上、平均乾燥重量及び平均幼体数は設定濃度 320 mg/kg dw 以上の試験濃度で有意な低下が認められた ($p < 0.05$)。

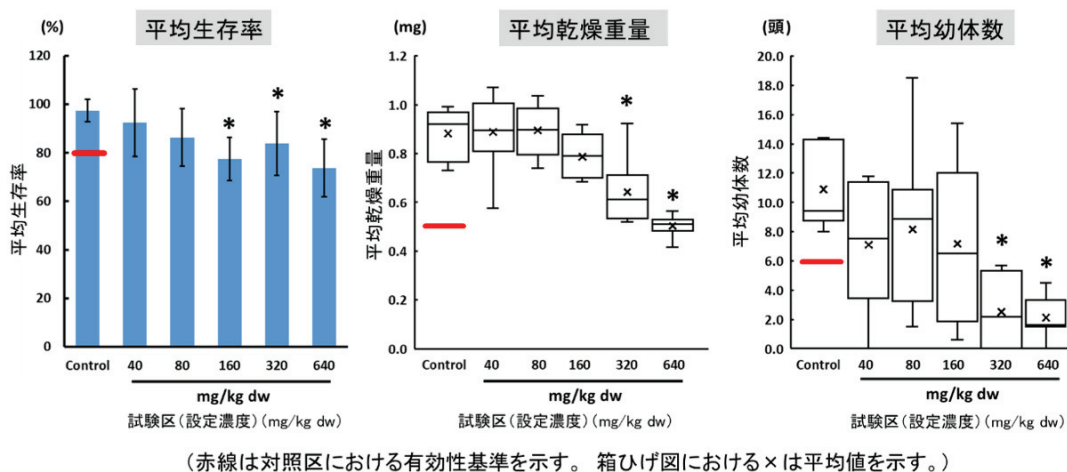


図 5 各毒性指標における試験生物の反応

図 5 に示すとおり、対照区における各指標は、有効基準値をいずれも満たしており、試験は適切な条件下で実施されたと判断された。なお、本結果をリングテストに参加した他のラボ間で比較したところ、本機構の結果は、リングテストの幹事機関である国立環境研究所の結果と概ね一致していた。

3. まとめ

底質環境の生態影響評価は高次のリスク評価の位置付けだが、淡水ヨコエビ (*Hyalella azteca*) を用いた新たな底質毒性試験の拡充とともに、今後、重要性が高まるものと見込まれる。

本機構は OECD TG 218 の化学物質 GLP 適合試験施設であり、今回紹介した淡水ヨコエビを用いた底質毒性試験についても取り組んでいる。水生生物を用いた毒性試験だけでなく、底生生物を用いた底質毒性試験についても、是非お問い合わせ頂きたい。

4. 参考文献

- 1) 久樂喬ほか. 日本農薬学会誌. 2019, 44(2), 115-123.
- 2) 久樂喬ほか. 水環境学会誌. 2020, 43(4), 127-132.

希土類元素（レアアース）評価の信頼性を 高める JCSS 希土類元素標準液の開発

発表者：沢田 貴史（化学標準部門）

1. 背景及び目的

希土類元素（レアアース）は、周期表第 3 族の元素のうち、スカンジウム、イットリウム及びランタノイド元素の総称であり、電子部品、触媒、医療機器といった、現代の産業基盤を支える多様な分野で利用されている。近年では、重要資源としての認識が高まっており、日本国内においても海底からの資源試掘が進められるなど、注目を集めている¹⁾。このような背景の下、多種類の希土類元素の含有量評価、品質管理などにおいて、その測定値の信頼性を確保するために計量法トレーサビリティ制度（JCSS）による濃度の精確な標準液の供給が望まれていた。

化学標準部は、JCSS における指定校正機関として経済産業大臣から指定され、「濃度」の国家計量標準に相当する「特定標準物質（ガス・液）」の製造・維持管理を行っている。また、標準物質（標準ガス・標準液）メーカーである登録事業者が実用標準物質（市販品）の濃度を決定するための基準として用いる「特定二次標準物質」の濃度の校正（値付け）を行っている。JCSS において標準物質を開発する際には、「特定標準物質」の特性値（濃度）の決定方法を定め、「特定二次標準物質」を値付けする方法を確立し、その値付けの不確かさを評価する必要がある。

これまで、特定標準液の特性値の決定方法として、基本的には個々の標準液に対応する同種の基準物質（国際単位系（SI）へのトレーサビリティが確保された物質）からの「一対一型」の濃度決定方法を採用してきた。しかし、複数種類の標準液を開発する上で、「一対一型」の方法を採用する場合には、各標準液の基準物質を個別に開発する必要があるため、開発完了までに非常に長い期間を要する。

そこで、国立研究開発法人産業技術総合研究所計量標準総合センター（NMIJ/AIST）の協力の下、標準液開発の迅速化及び効率化を目的として、基準となる亜鉛標準液一種を用いて複数の希土類元素特定標準液の値付けが可能な「一対多型」の濃度決定方法を確立した。さらに、この特定標準液を用いた特定二次標準液の値付けの不確かさを評価し、7 種類の希土類元素標準液（スカンジウム（Sc）、イットリウム（Y）、ランタン（La）、セリウム（Ce）、プラセオジウム（Pr）、ネオジウム（Nd）、サマリウム（Sm））を一斉に開発したので報告する²⁾。

2. 希土類元素標準液の計量トレーサビリティの確保

2.1 希土類元素特定標準液の濃度決定方法の確立

化学標準部では、金属元素標準液の値付け方法の一つとして繰返し性の良い測定法であるキレート滴定法を採用している。一般的なキレート滴定法では、実用的な終点として滴定曲線の変曲点を用いるが、滴定曲線の形状は滴定系の状態（溶液の種類、pH 値など）に依存し、その変曲点の位置も変化してしまう（図 1）ことから、亜鉛と希土類元素のように測定する元素の種類が異なる場合には変曲点を基にした正確な値付けは困難である。一方で、滴定時にキレート試薬と金属イオンが化学量論的に当量（1：1）になる当量点は、滴定における理論的な終点であり、滴定系の状態には依存しないことから、当量点を解析して用いることとした。当量点は、実測により得られた滴定曲線に対して、滴定系の平衡反応及びランベルト・ベールの法則を基に作成した滴定曲線の理論式（当量点をパラメータとして含む）を最小二乗法でフィッティングすることで算出することができる³⁾。このようにして求めた当量点における滴定量を基にして値付けを実施することで、測定する元素の種類が異なる場合においても、滴定系の状態に依存しない正確な値付けが可能となる（当量点解析を基にした希土類元素特定標準液の値付けは NMIJ/AIST からの技術移管により確立）。

また、基準となる亜鉛標準液は、NMIJ/AIST が頒布する認証標準物質（NMIJ CRM）亜鉛を用いて質量比混合法（溶質及び溶媒の質量を精密天びんにより正確にひょう量し、その質量値に基づいて濃度を計算する方法）によって調製しているため、SI へのトレーサビリティが確保されている。すなわち、この亜鉛標準液を基準に値付けを行い決定した希土類元素特定標準液の濃度は SI にトレーサブルであり、図 2 に示すような流れで市販品である JCSS 実

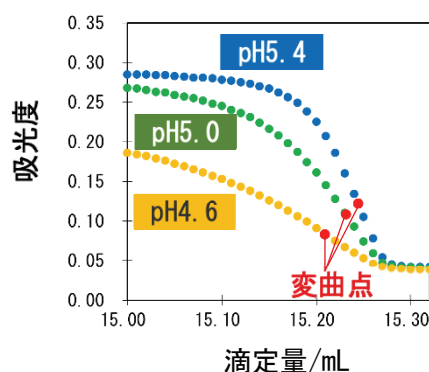


図 1 滴定開始時の pH 値が異なる滴定曲線の形状と変曲点の位置の変化

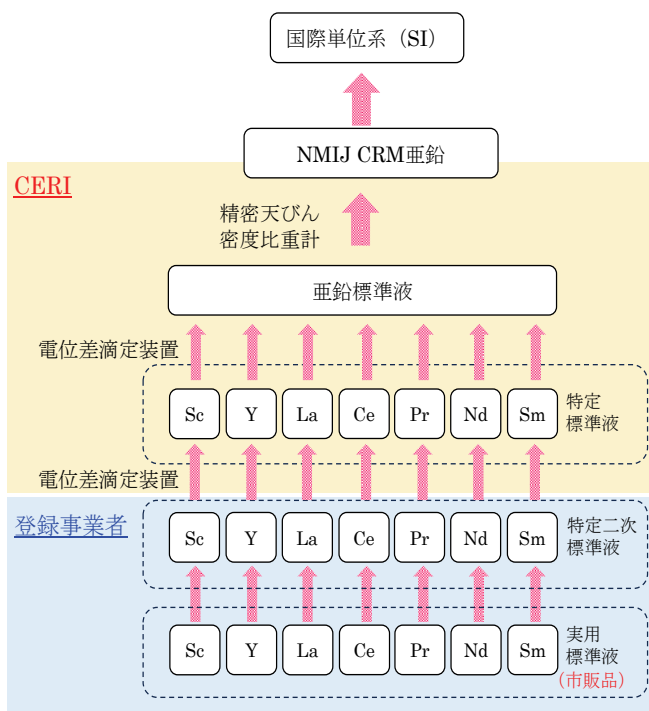


図 2 JCSS における希土類元素標準液の計量トレーサビリティの流れ

用標準液の濃度について計量トレーサビリティが確保できることになる。

2.2 当量点解析を基にした値付けの妥当性評価

同一試料について滴定開始時の pH 値を変化させて滴定を実施し、得られた形状の異なる 3 つの滴定曲線について、それぞれの変曲点及び当量点における滴定量を比較した (図 3)。その結果、変曲点における滴定量は最大で 0.23 % の差がみられたが、当量点における滴定量の差は 0.01 % 程度であり、当量点における滴定量は滴定曲線の形状に依存しないことを確認した。

さらに、当量点を基にした「測定値」の妥当性確認のため、精確な濃度「認証値」が付与されている NMIJ CRM イットリウム標準液について亜鉛標準

液を用いて値付けを実施し、その比較を行った。その結果、「認証値」と「測定値」は不確かさの範囲で一致し、当量点を基にした「測定値」の妥当性が示された。

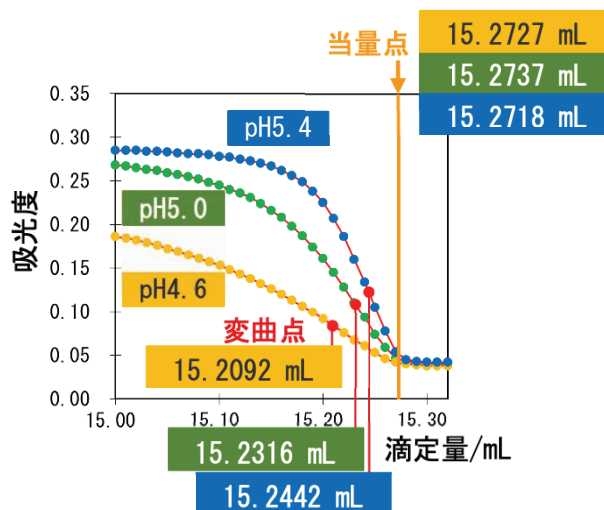


図 3 滴定開始時の pH 値が異なる滴定曲線の変曲点及び当量点における滴定量

2.3 希土類元素特定二次標準液の値付け時の不確かさの評価

7 種類の各希土類元素標準液 (スカンジウム、イットリウム、ランタン、セリウム、プラセオジウム、ネオジウム及びサマリウム) 約 1000 mg/L について、特定標準液を用いた特定二次標準液の値付けに関わる不確かさ要因として、「特定標準液の濃度決定の不確かさ」、「特定標準液の保存安定性の不確かさ」、「特定二次標準液の測定の繰返し性の不確かさ」などを評価し、これらを合成することで特定二次標準液の値付けの不確かさを求めた。その結果、拡張不確かさ ($k = 2$) は 7 種類の希土類元素標準液全てにおいて 0.4 % ~ 0.7 % となり、既存の「一対一型」の方法で特定標準液の濃度決定をした金属元素標準液の不確かさ (0.2 % ~ 0.7 %) と比べて遜色ない程度であった。

3. おわりに

当量点解析により、理論的に各物質の物質量を反映した終点における滴定量を値付けに用いることが可能となり、亜鉛標準液を用いた希土類元素標準液の値付けを行う際、滴定系の状態に依存しない精確な値付けを実現した。さらに、本方法を採用することで、亜鉛標準液による 7 種の希土類元素特定標準液の精確な値付けが可能となり、短期間で複数の希土類元素標準液の一斉開発につながった。このような「一対多型」の濃度決定

方法の仕組みは今後の標準液開発の迅速化及び工数削減にもつながり、多様化していくユーザーニーズに迅速に対応していくための基盤になると考えられる。今回開発した JCSS 希土類元素標準液は濃度の精確な標準液として、順次、登録事業者である試薬メーカーから実用標準液が供給される予定であり、希土類元素の精確な評価に貢献することが期待される。

4. 参考文献

- 1) 国立研究開発法人海洋研究開発機構 (JAMSTEC) (2025) プレスリリース「南鳥島 EEZ 海域でのレアアース泥採鉱システム接続試験の実施について」
https://www.jamstec.go.jp/j/about/press_release/20251223/ (accessed 2026-4-28)
- 2) 経済産業省 (2025) 令和 7 年度第 1 回計量行政審議会計量標準部会 参考資料 1 標準物質の値付けの実施について
- 3) Suzuki, T. et al. Anal. Sci. 2007, 23(10), 1215-1220.

PFAS 追加規制に対応した 製品中 PFAS 含有分析

発表者：岩崎 圭 (環境技術部門)

1. 序論

1.1 PFAS とは

PFAS (ペルフルオロアルキル化合物及びポリフルオロアルキル化合物) は、有機フッ素化合物の一種であり、はつ水・はつ油性、耐熱性、化学的安定性等の優れた特性を示すため、これまではつ水・はつ油剤、泡消火薬剤等様々な分野で広く用いられてきた。しかし、ペルフルオロオクタンスルホン酸 (PFOS)、ペルフルオロオクタン酸 (PFOA) 等の一部の PFAS については、環境中で難分解性、高蓄積性、長距離移動性等があることから「残留性有機汚染物質に関するストックホルム条約 (POPs 条約)」の対象物質に追加された。これらの PFAS は国内外の法規制においても製造・使用が制限されており、近年は PFAS 全体についても包括的な規制強化及び使用削減の動きが進んでいる。

1.2 PFAS に係る法規制及び分析の必要性

近年新たに規制された PFAS として、ペルフルオロヘキサンスルホン酸 (PFHxS) とその塩及び PFHxS 関連物質がある。これらの物質群は、POPs 条約第 10 回締約国会議 (2022 年 6 月) において同条約の附属書 A (廃絶) に追加することが決定された。これを踏まえ、国内では 2024 年 2 月 1 日に PFHxS (その塩及び分岐鎖含む) が「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律 (化審法)」の第一種特定化学物質に指定された。なお、PFHxS 関連物質は 2026 年 6 月 17 日に指定される予定である。

化審法の第一種特定化学物質に指定された物質は、その製造・輸入・使用が原則禁止される。また、同法施行令第 7 条においては、第一種特定化学物質が使用されている場合に輸入できない製品が物質ごとに指定されている。PFHxS 関連物質の政令指定製品 (予定) を表 1 に示す。これらの製品を輸入する際には、第一種特定化学物質が使用されていないことを確認する必要があり、その確認方法の一つとして、含有量を定量的に把握できる製品分析が有効である。なお、第一種特定化学物質が使用されている指定製品を輸入した場合には、化審法に基づき罰則の対象となる場合があるため、十分な注意が求められる¹⁾。

また、炭素数 9~21 の長鎖ペルフルオロカルボン酸 (LC-PFCA (C9-21)) とその塩及び LC-PFCA 関連物質についても POPs 条約の附属書 A (廃絶) への追加が決定しており、化審法の第一種特定化学物質への指定は 2026 年 11 月 22 日の予定である。

表 1 化審法施行令第 7 条における PFHxS 関連物質の政令指定製品(予定)

第一種特定化学物質	製品
ペルフルオロ(ヘキサ-1-スルホン)酸 関連物質 (PFHxS 関連物質)	はつ水性能又ははつ油性能を与えるための処理をした生地
	金属の加工に使用するエッチング剤
	半導体の製造に使用するエッチング剤
	メッキ用の表面処理剤及びその調製添加剤
	半導体の製造に使用する反射防止剤
	半導体用のレジスト
	はつ水剤、はつ油剤及び繊維保護剤
	消火器、消火器用消火薬剤及び泡消火薬剤
	はつ水性能又ははつ油性能を与えるための処理をした衣服
はつ水性能又ははつ油性能を与えるための処理をした床敷物	

欧州における POPs 規則²⁾は、POPs 条約締約国として同条約の遵守を担保するための規則であり、この附属書 I に指定された物質は、規制値以上での製造・販売・使用が原則として禁止されている。2025 年 12 月には PFOS に関して改定が行われ、名称が「PFOS とその塩及び PFOS 関連物質」に変更、規制値も従来の 10 mg/kg から 0.025 mg/kg へと大幅な引き下げが行われた³⁾。また、「欧州の化学品の登録、評価、認可及び制限に関する規則(REACH 規則)」においては、ペルフルオロヘキサ酸(PFHxA)とその塩及び PFHxA 関連物質が附属書 XVII の制限対象物質に指定され、同物質を含有する一部の製品が 2026 年 10 月 10 日から制限される⁴⁾。そのため、PFOS 又は PFHxA 等を含有する可能性がある製品は、含有の程度が規制値未満であることを製品分析等により確認する必要がある。なお、現在欧州では制限案の策定が議論されており、PFAS を個々の物質として規制するのではなく、PFAS の定義に該当する推定 10,000 種類以上の物質を包括的に規制する内容へと変更される予定である⁵⁾。

本機構では国及び民間企業から関連試験を数多く受託し、早くから製品中 PFAS 分析に取り組んできた。PFAS を含有する可能性のある製品は多岐にわたり、また分析対象となる PFAS も数多く存在するが、本機構は蓄積したノウハウにより正確な分析を実施している。今回は分析例として、追加規制となる LC-PFCA を含む製品分析及び PFHxS 関連物質等の分析例を報告する。

2. 分析例

2.1 PFOS, PFOA, PFHxS, PFHxA, LC-PFCA 等

繊維製品を対象とした PFAS 分析の規格として欧州の EN 17681-1:2025⁶⁾がある。しかし、化審法における政令指定製品は繊維製品以外にも指定されているため、本機構では本規格を参考に、様々な製品に対応可能な独自の分析法を確立した。例えば、ゴム製品、

樹脂製品等の固体試料については凍結粉砕、細切等を行い、消火薬剤、作動油等の液体試料については製品が溶解する有機溶剤を適切に選択する等により、多種多様な製品に適した試料調整を行っている。調整後の試料からメタノール等の有機溶剤を用いて PFAS を抽出し、高感度で測定可能な液体クロマトグラフタンデム質量分析計(LC-MS/MS)を用いて PFAS 分析を実施している。また、陰イオン交換カラム等を用いて測定妨害となる成分を除去することで、欧州 POPs 規則等における規制値未満での微量分析を可能としている。図 1 に分析例として、製品中のペルフルオロカルボン酸(PFCA、炭素数 6~19)を分析して得られたクロマトグラムを示す。本機構では図中がない炭素数 20 及び 21 の PFCA も分析可能であり、今後追加規制される予定の LC-PFCA (C9-21) を含む PFCA の一斉分析が可能である。

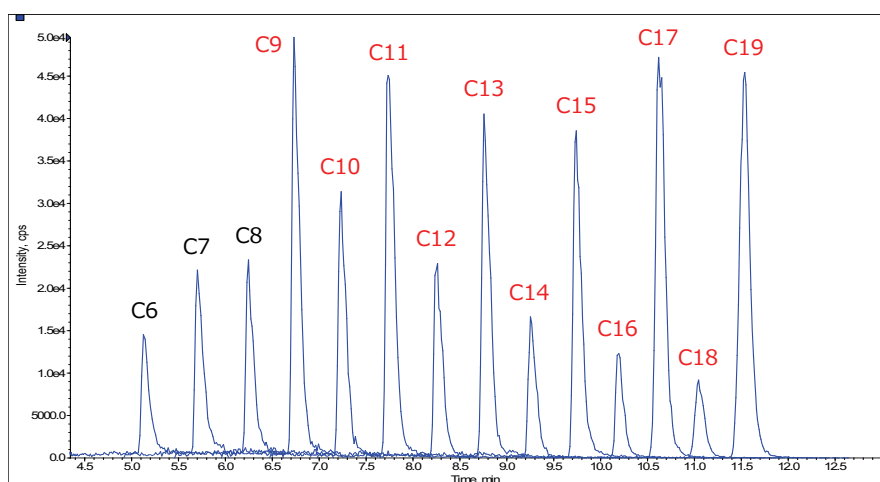


図 1 製品中の PFCA クロマトグラム
(数字は炭素数を、赤字は LC-PFCA を示す)

2.2 PFOA 関連物質、PFHxS 関連物質等

PFOA 関連物質及び PFHxS 関連物質は自然的作用による化学的変化によりそれぞれ PFOA 及び PFHxS を生成する物質群であり、化審法の第一種特定化学物質において、それぞれ 138 物質群及び 117 物質群が指定されている(2026 年 6 月時点)。これらの関連物質の物理化学的性質は多種多様であるため、それぞれに適した前処理方法・分析方法を選択する必要がある。本機構では、ノウハウに基づき各関連物質に適した前処理法及び分析装置を選択し高感度での分析が可能であり、すでに多数の関連物質の分析実績を有している。現状、分析可能な対象物質は標準品が市販されているものに限られるが、今後も更なる情報収集及び測定法の検討により、測定可能な物質を拡充していく方針である。表 2 に本機構で分析可能な関連物質の一例を示す。

表 2 本機構で分析可能な関連物質(一例)

物質群	物質名	略称
PFOA 関連物質	Perfluorooctyl iodide	PFOI
	1 <i>H</i> , 1 <i>H</i> , 2 <i>H</i> -Perfluoro-1-decene	8:2FTO
	1 <i>H</i> , 1 <i>H</i> , 2 <i>H</i> , 2 <i>H</i> -Perfluorodecanol	8:2FTOH
	1 <i>H</i> , 1 <i>H</i> , 2 <i>H</i> , 2 <i>H</i> -Perfluorodecyl acrylate	8:2FTAC
	1 <i>H</i> , 1 <i>H</i> , 2 <i>H</i> , 2 <i>H</i> -Perfluorodecyl methacrylate	8:2FTMAC
	Methyl perfluorooctanoate	PFOA-CH3
PFHxS 関連物質	Perfluorohexane sulfonamide	FHxSA
	<i>N</i> -Methyl-perfluorohexane-1-sulfonamide	MeFHxSA
	<i>N</i> -Ethyl- <i>N</i> -(2-hydroxyethyl)perfluorohexanesulfonamide	EtFHxSE
	<i>N</i> -Ethyl perfluorohexane sulfonamide	N-EtFHxSA

3. 結論

国内外の各種法規制により PFAS の製造・使用の制限が進んでおり、規制された物質については製品中の含有確認分析を適宜実施する必要がある。この分析を正確に実施するためには、対象製品及び対象物質に適した前処理方法及び測定装置を採用する必要があり、その検討にはノウハウが重要である。本機構は、民間企業からの依頼試験、国の委託事業等を通じて得たノウハウを有しており、製品中 PFAS 分析に適切に対応可能である。

4. 参考文献

- 1) 経済産業省等 (令和 7 年 4 月 21 日) 第一種特定化学物質が使用されている場合に輸入が禁止されている製品について (注意喚起)
- 2) Regulation (EU) 2019/1021 of the European Parliament and of the Council of 20 June 2019 on persistent organic pollutants (recast)
- 3) Commission Delegated Regulation (EU) 2025/718 of 14 April 2025 amending Regulation (EU) 2019/1021 of the European Parliament and of the Council as regards perfluorooctane sulfonic acid and its derivatives
- 4) Commission Regulation (EU) 2024/2462, amending Annex XVII to Regulation (EC) No 1907/2006 of the European Parliament and of the Council as regards undecafluorohexanoic acid (PFHxA), its salts and PFHxA-related substances
- 5) ECHA/NR/25/24 (2025) ECHA publishes updated PFAS restriction proposal
- 6) BS EN 17681-1:2025 Textiles and textile products. Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) Analysis of an alkaline extract using liquid chromatography and tandem mass spectrometry

特 別 講 演

最小二乗法による直線検量線の作成と
それを用いた定量分析値の不確かさ評価

専務理事

四 角 目 和 広

最小二乗法による直線検量線の作成と それを用いた定量分析値の不確かさ評価

発表者：四角目 和広（専務理事）

1. はじめに

本稿は、筆者と筆者の大学院時代の指導教授である横浜国立大学 佐藤寿邦教授（当時）の共著による（一社）日本環境測定分析協会の会誌“環境と測定技術”の原稿¹⁾²⁾をもとにして、さらに詳細に内容を説明したものである。“環境と測定技術”の中でも一定程度の具体的説明は加えたものの、式の背景及び具体的計算の中で途中を省略した部分があったため、分かり難い部分があった。そのため、“環境と測定技術”の原稿の中で使用又は導出した各種の計算式について、計算式の背景を説明し、より具体的にその導出手順を示した。この計算及び導出過程の説明では、一定程度の仮定を設けているため、厳密な意味では、統計論的には異論のある部分もあるかもしれないが、化学分析を行う実務者が実際に不確かさ評価を行うことに対しては大きな障害とはならないであろうと考え、本稿を説明する。

2. 計量・計測結果の重要性とその信頼性評価

私たちが生活している社会の中では何かを“測る”という行為なくして、社会活動は成り立たないのが現状である。例えば、長さ、時間、重さなどは勿論のこと、化学分析手法による化学物質の濃度など、社会活動で必要となる工業製品や食品などの各種製品の製造においては、計量、計測が非常に重要な意味を持ち、計量・計測なくして、各種製品は製造されない。また、製造された製品が安全であるのか、有害な物質を含有していないのかなども社会的関心が高い。このため、特に化学物質の定量などを目的とする測定では、機器分析と呼ばれる手法による測定が一般的である。この機器分析では、標準物質を必要とするとともに、その標準物質を基準とする検量線を作成することで目的物質の定量等の測定が可能となる。

化学的、あるいは化学以外の原理による測定のいずれでも、測定した結果をもとに何らかの判断を行う場合、正しい判断のためには、その結果が正しいことが大前提となる。加えて、適切な判断を行うためには、測定結果と何らかの判断基準を比較することとなるため、測定結果は“結果の値”と“その値の信頼性の程度”の組み合わせである必要がある。このため測定結果の信頼性の評価が必要であり、それを不確かさの概念で表そうとしている。不確かさの議論の本質はその点にある。

3. 回帰直線と最小二乗法

2 つの変数 x と y の間の関係を示す数学的モデルを想定する。縦軸 y を測定値とする

場合、 y の値の大きさは横軸 x の値の大きさにより変化する関係のとき、 x を入力変数、 y を出力変数と呼ぶ。

また、通常、出力変数 y は、同じ入力変数 x を繰り返し測定した場合にもその測定値にはばらつきが発生する。このため、 x が変化したことによって y の値の変化が説明できる部分と偶然的な影響によって y の値がばらつく部分の両方によって、出力変数 y の値がばらつくこととなる。

このような状況の中で、入力変数と出力変数の最適な関係線（回帰直線）を求める場合に、最小二乗法によって関係線の式を決定することが一般的に行われている。つまり、 L の値（図 1）が最も小さな値（ゼロ）となるような関係線を求めることとなる。

なお、回帰は、ある変数の変化がどの程度他の変数の変化によって説明できるかを示したものである。また、相関は、変数間の関係の強さを示すものであり、回帰と相関は、異なる概念である。つまり、回帰直線の式は、 x が y に影響を及ぼすものである。一方、相関関係は、単に 2 つの変数の関係を見たものであり、どちらかが原因となりもう片方がその影響を受けることを示すものではない。

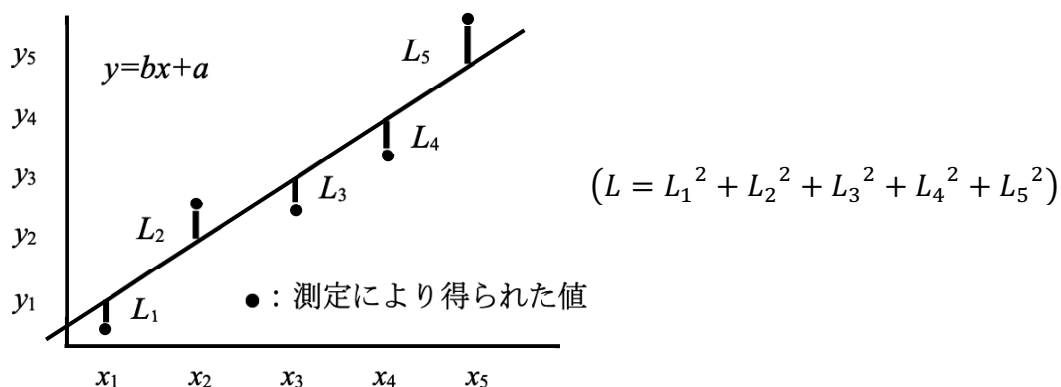


図 1 最小二乗法による回帰直線

4. 回帰直線の利用

入力変数 x と出力変数 y の関係線としての回帰直線を求めた後に、入力変数 x の値から出力変数 y の値を予測することができる。さらに、出力変数 y の値から入力変数 x の値を推定することも可能であり、化学分析では、しばしば標準物質の濃度を入力変数とし、出力変数を分析機器からの出力値とした関係線とする検量線を作成し、その後に分析機器から得られた検量線縦軸の値から横軸の値を推定する、という作業を行う。このように出力値としての縦軸の値から横軸の値を推定することを（回帰の）逆推定と呼ぶことがある。

5. 最小二乗法の前提と縦軸のばらつき

機器分析における校正では“最も単純な”最小二乗法によって検量線の回帰式($y =$

$bx + a$)を計算することが多い。つまり、横軸量(多くの場合、標準物質の濃度)に“ばらつきはなく”、縦軸量(機器の出力)は“等精度のばらつき”があるという前提で計算している。

ここで、“等精度”とは、測定量の大小にかかわらず、標準偏差が等しい(現実的にはほぼ等しい)という意味である。つまり、横軸の位置によらず、縦軸のばらつきがほぼ等しい、という意味である(相対標準偏差又は変動係数が等しいという意味ではない)。

一方、異精度とは、横軸の位置によって、縦軸のばらつきが異なる(ばらつきの絶対値が異なる)という意味である。

なお、異精度の場合でも、標準偏差が測定量の大きさに比例して大きくなるなら、相対標準偏差(又は変動係数)は、一定(ほぼ同じ程度)になることがある。

等精度か異精度かの判断は、必ずしも定まった方法はないが、“横軸量の大きさ”と“縦軸のばらつき”の関係を示す回帰式($y = bx + a$)の“傾き(b)の大きさ”と“傾きのばらつきの大きさ(s_b)”から判断することが可能である。

横軸のどの位置であっても縦軸のばらつき(標準偏差)の大きさが同程度(等精度)の場合、横軸と縦軸量のばらつき(標準偏差)の回帰式($y = bx + a$)は、 $y = a$ 、つまり傾き $b \doteq 0$ が期待される。一方、横軸の位置に比例して縦軸量のばらつき(標準偏差)が増減するようであれば、異精度といえる。この場合、横軸の位置と縦軸量のばらつき(標準偏差)の関係は、 $y = bx + a$ 、つまり傾き $b \neq 0$ となる。このような考えにより、縦軸量のばらつき(標準偏差)と濃度等の横軸の関係を調べ、傾き b と傾きの標準偏差 s_b が、 $b \pm 3s_b$ の範囲内に傾き 0 が入るかどうかで等精度・異精度の判断を行うこととする。

$b - 3s_b < 0 < b + 3s_b$ を満足する場合は等精度と判断し、 $b - 3s_b < 0 < b + 3s_b$ を満足しない場合は、異精度と判断することとする。ここで、 $3s_b$ の係数 3 は、正規分布の包含確率がおおよそ 99.7% となる係数を意味する。

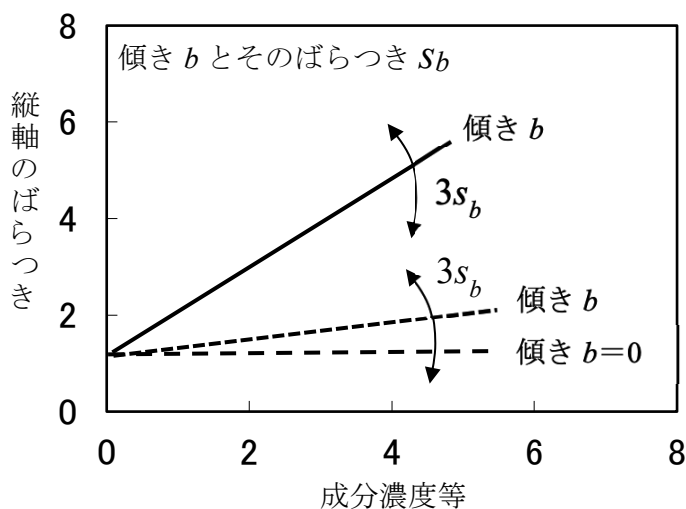


図 2 等精度と異精度の判断のイメージ

図 2 に等精度と異精度の判断のイメージを示した。また、図 3 には、具体的な検量線のデータを、図 4 にはその検量線の縦軸のばらつきの結果例を示した。例えば、表 1 の結果は、図 4 についての $b \pm 3s_b$ の結果を示したものであるが、 $b - 3s_b < 0 < b + 3s_b$ を満足しないので、異精度と判断する。

表 1 $b \pm 3s_b$ の結果

$b - 3s_b$	$b + 3s_b$
0.012	0.115

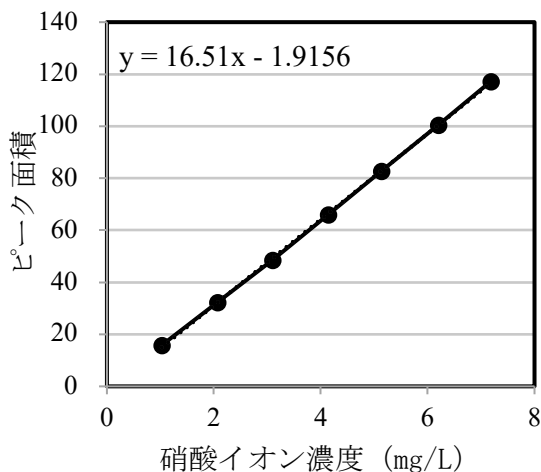


図 3 イオンクロマトグラフィーによる硝酸イオンの検量線 (例)

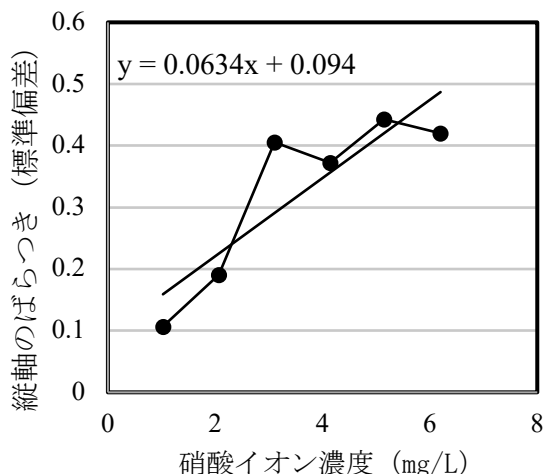


図 4 硝酸イオンにおける濃度ごとの縦軸のばらつき (例)

実際の機器分析データは、機器分析計の種類、成分、濃度範囲等にもよるが、本来は異精度による取り扱いとすべきデータを示しているにもかかわらず、等精度の取り扱いとなっている場合が多いと推測される。等精度として計算された不確かさと異精度として計算された不確かさには、大きな差が生じることも想定されるので、等精度なのか、異精度なのかの判断は非常に重要となる。

以下で等精度と異精度の場合に分け、それぞれにおける定量値の不確かさの計算式の具体的な導出の手順を示す。

6. 等精度の場合の定量値の不確かさの計算式

次式は、検量線の縦軸のばらつきが等精度の場合の定量値の不確かさ評価の近似式として利用できる計算式¹⁾⁴⁾⁵⁾である。式の導出について以下の手順で説明する。

$$s_{x_u}^2 = \frac{s_y^2}{b^2} \left\{ \frac{1}{m} + \frac{1}{n} + \frac{(y_u - \bar{y})^2}{b^2 \sum (x_i - \bar{x})^2} \right\}$$

6.1 検量線式($y = bx + a$)の傾き b と切片 a の計算

通常、 n 個の観測値の組 (x_i, y_i) ($i=1, 2, 3, \dots, n$) から最小二乗法によって回帰式

$(y = bx + a)$ を求める。ここで、観測方程式を
$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$$
と表す。

正規方程式は、以下の手順で計算することができる。

まず、回帰式を $(y = bx + a)$ としたときの傾き b と切片 a は、残差平方和 S が最小となる値として求められる。

残差平方和 S は、 $S = \sum(y_i - a - bx_i)^2$ であり、 $S = \sum(y_i^2 - 2ay_i - 2bx_iy_i + a^2 + 2abx_i + b^2x_i^2)$ となる。ここで、各 x_i と各 y_i は既知であり、 a と b はこの段階では未知なので、 S は a と b の関数と考えることができる。次に S は a と b の関数であるので、 S を最小にするのは、 a と b がある特定の値の時であり、その特定の値を求めるために、 S を a と b でそれぞれ微分 (偏微分) して、 S が最小の値 ($=0$) となる a と b を計算する。

a と b の傾きがゼロになる a と b の位置を見つける、つまり a と b について偏微分を行い、接線の傾き (検量線の傾きではない) がゼロとなる a と b の値を見つけ出す (計算する) という作業を行う。

縦軸量等精度の場合には、残差平方和 S は、 $S = \sum(y_i - a - bx_i)^2$ であるので、

$$\frac{\partial S}{\partial b} = \sum(-2x_iy_i + 2ax_i + 2bx_i^2) = -2 \sum x_i(y_i - a - bx_i) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \sum(-2y_i + 2a + 2bx_i) = -2 \sum (y_i - a - bx_i) = 0$$

であり、

$-2 \sum x_i(y_i - a - bx_i) = 0$ から $\sum x_i(y_i - a - bx_i) = \sum(x_iy_i - ax_i - bx_i^2) = 0$ となり、 $\sum x_iy_i = a \sum x_i + b \sum x_i^2$ と表す。

また、 $-2 \sum (y_i - a - bx_i) = 0$ から $\sum y_i = a \sum n + b \sum x_i$ となる。この結果から、

$$\sum x_iy_i = a \sum x_i + b \sum x_i^2 = b \sum x_i^2 + a \sum x_i$$

$$\sum y_i = a \sum n + b \sum x_i = b \sum x_i + a \sum n$$

となる。この連立方程式を正規方程式という。ここで、 a と b を求めるために、行列計算を利用して以下のように求める。この正規方程式を行列式で表すと次のようになる。

$$\begin{pmatrix} \sum x_iy_i \\ \sum y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum x_i^2 & \sum x_i \\ \sum x_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \sum x_i^2 & \sum x_i \\ \sum x_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum x_iy_i \\ \sum y_i \end{pmatrix}$$

次に等式の左右に左から係数行列 A の逆行列 A^{-1} をかけることで傾き b と切片 a を求める。

$$A = \begin{pmatrix} \sum x_i^2 & \sum x_i \\ \sum x_i & n \end{pmatrix} \text{ とすると、 } A^{-1} = \frac{1}{n \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i} \begin{pmatrix} n & -\sum x_i \\ -\sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \text{ である。}$$

$$\begin{pmatrix} \sum x_i^2 & \sum x_i \\ \sum x_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum x_i y_i \\ \sum y_i \end{pmatrix}$$

$$A^{-1} \begin{pmatrix} \sum x_i^2 & \sum x_i \\ \sum x_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} \sum x_i y_i \\ \sum y_i \end{pmatrix}$$

具体的には、

$$\frac{1}{n \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i} \begin{pmatrix} n & -\sum x_i \\ -\sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum x_i^2 & \sum x_i \\ \sum x_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \frac{1}{n \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i} \begin{pmatrix} n & -\sum x_i \\ -\sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum x_i y_i \\ \sum y_i \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \frac{1}{n \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i} \begin{pmatrix} n & -\sum x_i \\ -\sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum x_i y_i \\ \sum y_i \end{pmatrix}$$

したがって、

$$b = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i} = f_b(x, y)$$

$$a = \frac{\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i}{n \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i} = f_a(x, y)$$

となる。

6.2 等精度の場合の s_b^2 、 s_a^2 、 s_{ba}^2 の計算

先の解説¹⁾²⁾では、縦軸測定値のばらつき又は分散について、いくつかの記号を用いて表しており、それと同様に 6.2.1 以降では、ばらつき又は分散について、以下のような記号及び記号の意味を用いる。

縦軸測定値のばらつきを評価する場合、 s_y^2 のように縦軸測定の測定値とその平均との差から分散として求める場合、又は、 $s_{y/x}$ のように検量線としての回帰直線の y 残差のばらつきの指標を用いる場合などが考えられる。

s_y^2 : y_i の分散 (縦軸測定値の分散)

$$s_y^2 = \frac{\sum (y_i - \bar{y})^2}{n-1} = \frac{\sum y_i^2 - n\bar{y}^2}{n-1}$$

$s_{y/x}$: 回帰直線の y 残差のばらつきの指標

$$s_{y/x}^2 = \left\{ \frac{\sum (y_i - \bar{y})^2}{n-2} \right\}$$

$s_{y_u}^2$: 検量線作成後の未知試料測定時の縦軸測定値の分散 $s_{y_u}^2 = \frac{s_y^2}{m}$

\bar{y} は、 y_i の平均値である。 \bar{y} は、 x を計算によって求められた回帰線に当てはめたとき、求められる y の値である (平均値ではない)。 y_i は、検量線作成時の測定値である。

本来なら個々の縦軸 (y 軸) 測定値の測定点ごとにその信頼の程度としての測定精度を求める必要があるが、ここでは平均的なばらつきで代表させることとして、まずは、 x_i ($i=1, 2, 3, \dots, n$) ごとの縦軸の平均的な測定精度を s_{y_i} とし、さらに x_i 全体の平均的な測定精度を s_y と考えることとする。

「6.3 定量値の不確かさの計算式」で用いる s_b^2 、 s_a^2 、 s_{ba}^2 は、以下のように計算する。ここで、 s_b^2 、 s_a^2 、 s_{ba}^2 は、それぞれ検量線式の傾き b の分散、切片 a の分散、 b と a の共分散を意味する。(検量線の傾き及び切片のばらつきは、縦軸測定のばらつきに依存する。)

6.2.1 s_b^2 の計算

検量線の傾き b のばらつき (s_b) は、傾き b を決定するための縦軸測定値のばらつき (s_y) に一定の係数 (微分係数又は感度係数) を乗じたものとして計算する。分散として、 s_b^2 は次のように計算する。先の解説¹⁾²⁾では検量線の傾き b のばらつきの計算に、回帰直線の y 残差から計算される値 ($s_{y/x}$) を用いており、この値を縦軸測定値のばらつき (s_y) としている。

最小二乗法における分散 (残差) の推定値 (等精度の場合) は、 $s^2 = \frac{\sum \{y_i - (bx_i + a)\}^2}{n-2}$ として表される。これは、上記の $s_{y/x}^2$ と同じ意味であり、 $s^2 = s_{y/x}^2$ とする。この $s_{y/x}^2$ を縦軸測定値のばらつきとする場合、 $s^2 = s_{y/x}^2 \equiv s_y^2$ として計算している。

$s_b^2 = \frac{s_y^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}$ は、以下のように導出される。等精度の場合、 $s_{y_i}^2 \equiv s_y^2$ としている。

$b = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i} = f_b(x, y)$ であり、不確かさの伝ば測³⁾ (分散の加法性の性質) から s_b^2

を、 $s_b^2 = \sum \left(\frac{\partial f_b(x, y)}{\partial y} \right)^2 s_{y_i}^2 = \sum \left(\frac{\partial f_b(x, y)}{\partial y} \right)^2 s_y^2$ として計算する。

まず、 $\left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y}\right) = \frac{1}{\Delta}(nx_i - \sum x_i)$ である。

ここで、 $\Delta = n \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i = \{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2\}$ である。

$$\left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y}\right)^2 = \left\{\frac{1}{\Delta}(nx_i - \sum x_i)\right\}^2 = \frac{1}{\Delta^2}(nx_i - \sum x_i)^2 = \frac{1}{\Delta^2}\{n^2 x_i^2 - 2nx_i \sum x_i + (\sum x_i)^2\}$$

となるので、

$$\begin{aligned} s_b^2 &= \sum \left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y}\right)^2 s_y^2 \\ &= \sum \frac{1}{\Delta^2} \{n^2 x_i^2 - 2nx_i \sum x_i + (\sum x_i)^2\} s_y^2 \\ &= \frac{s_y^2}{\Delta^2} \{n^2 \sum x_i^2 - 2n \sum x_i \sum x_i + n(\sum x_i)^2\} \\ &= \frac{s_y^2}{\Delta^2} n \{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2\} = \frac{n}{\Delta} s_y^2 \end{aligned}$$

$$\text{したがって、} s_b^2 = \frac{n}{\Delta} s_y^2 = \frac{n}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} s_y^2 = \frac{s_y^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}$$

6.2.2 s_a^2 の計算

s_a^2 についても s_b^2 と同様に縦軸測定値のばらつき (s_y) に一定の係数 (微分係数又は感度係数) を乗じたものとして計算する。 s_a^2 を次のように計算する。

$$s_a^2 = \frac{\sum x_i^2}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} s_y^2 \text{は、以下のように導出される。}$$

$$a = \frac{\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i}{n \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i} = f_a(x,y) \text{であり、不確かさの伝ば則}^3) \text{から} s_a^2 \text{を、}$$

$$s_a^2 = \frac{\sum x_i^2}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} s_{y_i}^2 = \frac{\sum x_i^2}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} s_y^2 \text{として計算する。等精度の場合、} s_{y_i}^2 \cong s_y^2 \text{としている。}$$

まず、 $\left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y}\right) = \frac{1}{\Delta}(\sum x_i^2 - x_i \sum x_i)$ である。また、 $\Delta = \{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2\}$ である。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y}\right)^2 &= \frac{1}{\Delta^2} (\sum x_i^2 - x_i \sum x_i)^2 \\ &= \frac{1}{\Delta^2} \{(\sum x_i^2)^2 - 2x_i \sum x_i^2 \sum x_i + x_i^2 (\sum x_i)^2\} \end{aligned}$$

ここで、縦軸等精度としているので、 $s_{y_i}^2 \cong s_y^2$ として、

$$\left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y}\right)^2 s_{y_i}^2 = \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y}\right)^2 s_y^2 = \frac{s_y^2}{\Delta^2} \{(\sum x_i^2)^2 - 2x_i \sum x_i^2 \sum x_i + x_i^2 (\sum x_i)^2\}$$

$$\begin{aligned}
s_a^2 &= \sum \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y} \right)^2 s_y^2 \\
&= \frac{s_y^2}{\Delta^2} \{n(\sum x_i^2)^2 - 2 \sum x_i \sum x_i^2 \sum x_i + \sum x_i^2 (\sum x_i)^2\} \\
&= \frac{s_y^2}{\Delta^2} \sum x_i^2 \{n \sum x_i^2 - 2 \sum x_i \sum x_i + (\sum x_i)^2\} \\
&= \frac{s_y^2}{\Delta^2} \sum x_i^2 \{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2\} \\
&= \frac{s_y^2}{\Delta^2} \sum x_i^2 \cdot \Delta \\
&= \frac{s_y^2}{\Delta} \sum x_i^2 \\
&= \frac{\sum x_i^2}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} s_y^2 \\
&= \frac{\sum x_i^2}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} s_y^2
\end{aligned}$$

6.2.3 s_{ba}^2 の計算

s_{ba}^2 についても s_b^2 、 s_a^2 と同様に縦軸測定値のばらつき (s_y) に一定の係数 (微分係数又は感度係数) を乗じたものとして計算する。等精度の場合、 $s_{y_i}^2 \doteq s_y^2$ としている。

s_{ba}^2 の計算は以下のとおりである。

$$s_{ba}^2 = \sum \left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y} \right) s_y^2$$

$$\text{まず、} \left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y} \right) = \frac{1}{\Delta} (nx_i - \sum x_i)、 \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y} \right) = \frac{1}{\Delta} (\sum x_i^2 - x_i \sum x_i)、 \Delta = \{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2\}$$

である。

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y} \right) &= \left\{ \frac{1}{\Delta} (nx_i - \sum x_i) \right\} \left\{ \frac{1}{\Delta} (\sum x_i^2 - x_i \sum x_i) \right\} \\
&= \frac{1}{\Delta^2} \{nx_i \sum x_i^2 - nx_i^2 \sum x_i - \sum x_i \sum x_i^2 + x_i (\sum x_i)^2\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
s_{ba}^2 &= \sum \left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y} \right) s_y^2 \\
&= \sum \frac{1}{\Delta^2} \{nx_i \sum x_i^2 - nx_i^2 \sum x_i - \sum x_i \sum x_i^2 + x_i (\sum x_i)^2\} s_y^2 \\
&= \frac{s_y^2}{\Delta^2} \{n \sum x_i \sum x_i^2 - n \sum x_i^2 \sum x_i - n \sum x_i \sum x_i^2 + \sum x_i (\sum x_i)^2\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{s_y^2}{\Delta^2} \{-n \sum x_i \sum x_i^2 + \sum x_i (\sum x_i)^2\} \\
&= -s_y^2 \frac{\sum x_i}{\Delta^2} \{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2\} \\
&= -s_y^2 \frac{\sum x_i}{\Delta^2} \Delta \\
&= -s_y^2 \frac{\sum x_i}{\{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2\}} \\
&= \frac{-\sum x_i}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} s_y^2
\end{aligned}$$

6.3 定量値の不確かさの計算式

次に、検量線作成後に未知試料の測定によって得られた縦軸の測定値を検量線式に当てはめて求めた横軸としての測定値 (通常は濃度が多い) の不確かさの計算式を求める。図 5 に示すとおり、検量線式は、 $y = bx + a$ とし、 y_u, x_u は、検量線作成後に測定した、未知試料の縦軸測定値と横軸の定量値を示す。

(\bar{x}, \bar{y}) は、それぞれ検量線の横軸と縦軸の平均値を表す (検量線は、 (\bar{x}, \bar{y}) の点を必ず通る)。

“未知試料についての縦軸測定値： y_u ” から求めた (計算した) “横軸定量値： x_u ” の “不確かさ： s_{x_u} ” を求める式 (6. に示した式) を、 b と a の相関による共分散の有無によって分けて導出する。

y_u から求めた x_u は、 $x_u = \frac{y_u - a}{b} = f(y_u, b, a)$ となるが、 b と a の間には相関があり、このままの場合、 b と a の共分散を考える必要があるため、まずは、共分散を考える必要がないように $x_u = \frac{y_u - a}{b} = f(y_u, b, a)$ を変形して計算を進めることとする。

(検量線式 $y = bx + a$ では、傾き b が変化するとその影響を受けて a も変化するので、 b と a の間には相関があることになる。 a が変化しても同様である。)

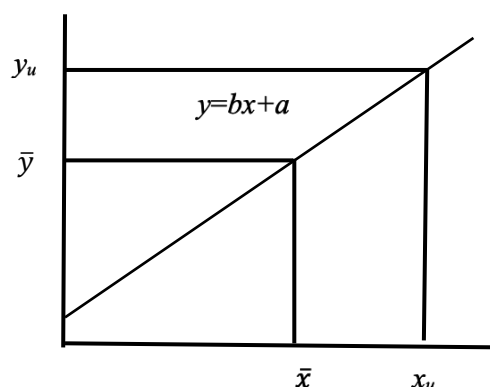


図 5 検量線及び未知試料の測定値

6.3.1 b と a の共分散を考える必要がない場合の計算

まず、図 5 から $b = \frac{y_u - \bar{y}}{x_u - \bar{x}}$ であるので $x_u = \bar{x} + \frac{y_u - \bar{y}}{b} = f(y_u, \bar{y}, b)$ と変形すると y_u, \bar{y}, b

は互いに独立なので共分散は考えなくてよい。

ここで、計測におけるモデル式を $y = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ とする場合、不確かさの伝ば

式³⁾は、 $u_c^2(y) = \sum \left[\frac{\partial y}{\partial x_i} \right]^2 u^2(x_i)$ と表せる。(ただし、この段階では、一般的な不確かさの記号としての u の記号は以下では用いない。)

検量線作成後の y_u から求めた (計算した) x_u の標準不確かさを s_{x_u} とすると、検量線式から変換した $x_u = \bar{x} + \frac{y_u - \bar{y}}{b} = f(y_u, \bar{y}, b)$ から、不確かさの伝ば則³⁾より

$$s_{x_u}^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial y_u} \right)^2 s_{y_u}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial \bar{y}} \right)^2 s_{\bar{y}}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial b} \right)^2 s_b^2 \text{ である。}$$

ここで、最小二乗法的前提として、横軸には誤差がないとしているので、ここでの横軸定量値の不確かさ評価においては、 \bar{x} の部分は、不確かさの大きさとしては無視する。

ここで、 $\frac{\partial f}{\partial y_u} = \frac{1}{b}$ 、 $\frac{\partial f}{\partial \bar{y}} = -\frac{1}{b}$ 、 $\frac{\partial f}{\partial b} = \frac{-(y_u - \bar{y})}{b^2}$ である。

また、 $s_{y_u}^2 = \frac{s_y^2}{m}$ 、 $s_{\bar{y}}^2 = \frac{s_y^2}{n}$ 、 $s_b^2 = \frac{s_{y/x^2}}{\sum (x_i - \bar{x})^2} = \frac{s_y^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}$ とし

$$\begin{aligned} s_{x_u}^2 &= \left(\frac{\partial f}{\partial y_u} \right)^2 s_{y_u}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial \bar{y}} \right)^2 s_{\bar{y}}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial b} \right)^2 s_b^2 \\ &= \frac{1}{b^2} s_{y_u}^2 + \frac{1}{b^2} s_{\bar{y}}^2 + \left(\frac{y_u - \bar{y}}{b^2} \right)^2 s_b^2 \\ &= \frac{1}{b^2} \frac{s_y^2}{m} + \frac{1}{b^2} \frac{s_y^2}{n} + \left(\frac{y_u - \bar{y}}{b^2} \right)^2 \frac{s_y^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \\ &= \frac{s_y^2}{b^2} \left\{ \frac{1}{m} + \frac{1}{n} + \frac{(y_u - \bar{y})^2}{b^2 \sum (x_i - \bar{x})^2} \right\} \end{aligned}$$

の式が得られる。ここで、 m と n は以下のとおりである。

m : 検量線作成後の未知試料測定時の縦軸測定の繰り返し数

n : 検量線の濃度数 × 同じ濃度の繰り返し数

6.3.2 b と a の共分散を考える必要がある場合の計算

検量線式の $y = bx + a$ から $x_u = \frac{y_u - a}{b} = f(y_u, b, a)$ とすると、不確かさの伝ば則から

$$s_{x_u}^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial y_u} \right)^2 s_{y_u}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial a} \right)^2 s_a^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial b} \right)^2 s_b^2 + 2 \left(\frac{\partial f}{\partial a} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial b} \right) s_{ba}^2 \text{ である。}$$

ここで、 $\frac{\partial f}{\partial y_u} = \frac{1}{b}$ 、 $\frac{\partial f}{\partial a} = -\frac{1}{b}$ 、 $\frac{\partial f}{\partial b} = \frac{(y_u - a)}{b^2}$ である。

また、 $s_{y_u}^2 = \frac{s_y^2}{m}$ 、 $s_a^2 = \frac{\sum x_i^2}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} s_y^2$ 、 $s_b^2 = \frac{1}{\sum (x_i - \bar{x})^2} s_y^2$ 、 $s_{ba}^2 = \frac{\sum x_i}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} s_y^2$ とする。

$$\begin{aligned}
s_{x_u}^2 &= \frac{1}{b^2} s_{y_u}^2 + \frac{1}{b^2} s_a^2 + \left(\frac{y_u - a}{b^2}\right)^2 s_b^2 + 2\left(-\frac{1}{b}\right)\left(\frac{y_u - a}{b^2}\right) s_{ba}^2 \\
&= \frac{1}{b^2} s_{y_u}^2 + \frac{1}{b^2} s_a^2 + \frac{x_u^2}{b^2} s_b^2 - \frac{2x_u}{b^2} s_{ba}^2 \\
&= \frac{s_y^2}{mb^2} + \frac{1}{b^2} \frac{\sum x_i^2}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} s_y^2 + \frac{x_u^2}{b^2} \frac{1}{\sum (x_i - \bar{x})^2} s_y^2 - \frac{2x_u}{b^2} \frac{\sum x_i}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} s_y^2 \\
&= \frac{s_y^2}{b^2} \left\{ \frac{1}{m} + \frac{\sum x_i^2}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} + \frac{x_u^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2} - \frac{2x_u \sum x_i}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} \right\} \\
&= \frac{s_y^2}{b^2} \left\{ \frac{1}{m} + \frac{\sum x_i^2 + nx_u^2 - 2x_u \sum x_i}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} \right\} \\
&= \frac{s_y^2}{b^2} \left\{ \frac{1}{m} + \frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n \sum (x_i - \bar{x})^2} + \frac{(x_u - \bar{x})^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \right\} \\
&= \frac{s_y^2}{b^2} \left\{ \frac{1}{m} + \frac{1}{n} + \frac{(x_u - \bar{x})^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \right\} \\
&= \frac{s_y^2}{b^2} \left\{ \frac{1}{m} + \frac{1}{n} + \frac{(y_u - \bar{y})^2}{b^2 \sum (x_i - \bar{x})^2} \right\}
\end{aligned}$$

7. 異精度の場合の定量値の不確かさの計算式

次式は、検量線の縦軸のばらつきが異精度の場合の定量値の不確かさの計算式として、筆者らが提案した式²⁾である。式の導出について以下の手順で説明する。

$$s_{x_u}^2 = \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2 \sum w_i} + \frac{(y_u - \bar{y}_w)^2}{b^4 (\sum w_i x_i^2 - \bar{x}_w^2 \sum w_i)}$$

7.1 検量線式($y = bx + a$)の傾き b と切片 a の計算

縦軸量のばらつきが等精度ではない場合は、重みつき残差平方和を最小にするという条件で計算する。重みつき最小二乗法の重みは、縦軸量測定値 y_i の精度 (標準偏差) を s_{y_i} とするとき、 $w_i = 1/s_{y_i}^2$ とするのが合理的と考える。

N 個の観測値の組 $(x_i, y_i) (i=1, 2, 3, \dots, n)$ から最小二乗法によって回帰式 ($y = bx + a$) を求める。

ここで、観測方程式として
$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$$
 と表す。

正規方程式は、以下の手順で計算することができる。まず、回帰式を ($y = bx + a$) としたときの傾き b と切片 a は、残差平方和 S を最小にする値として求められる。

残差平方和は、 $S = \sum w_i (y_i - a - bx_i)^2$ となるので、

$$S = \sum (w_i y_i^2 - 2w_i a y_i - 2w_i b x_i y_i + w_i a^2 + 2w_i a b x_i + w_i b^2 x_i^2)$$
となる。

ここで w_i は重みであり、 $w_i = \frac{1}{s_{y_i}^2}$ 、 $s_{y_i}^2 = \frac{1}{w_i}$ とする。

等精度の場合と同様に正規方程式を計算する。等精度の場合と同様に、 S は、 a と b の関数であるので、

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \sum (-2w_i y_i + 2w_i a + 2w_i b x_i) = -2 \sum w_i (y_i - a - b x_i) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = \sum (-2w_i x_i y_i + 2w_i a x_i + 2w_i b x_i^2) = -2 \sum w_i x_i (y_i - a - b x_i) = 0$$

$$-2 \sum w_i (y_i - a - b x_i) = 0 \quad \text{から} \quad \sum w_i y_i = b \sum w_i x_i + a \sum w_i$$

$$-2 \sum w_i x_i (y_i - a - b x_i) = 0 \quad \text{から} \quad \sum w_i x_i y_i = b \sum w_i x_i^2 + a \sum w_i x_i$$

正規方程式を行列式で表すと、 $\begin{pmatrix} \sum w_i x_i & \sum w_i \\ \sum w_i x_i^2 & \sum w_i x_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum w_i y_i \\ \sum w_i x_i y_i \end{pmatrix}$ となる。

$A = \begin{pmatrix} \sum w_i x_i & \sum w_i \\ \sum w_i x_i^2 & \sum w_i x_i \end{pmatrix}$ として b と a を求めるため、係数行列 A の逆行列 A^{-1} を行列式の

等式の左右に左からかける。逆行列 A^{-1} は

$$\begin{pmatrix} \sum w_i x_i & \sum w_i \\ \sum w_i x_i^2 & \sum w_i x_i \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} \sum w_i x_i & -\sum w_i \\ -\sum w_i x_i^2 & \sum w_i x_i \end{pmatrix} \text{となる。}$$

記号 Δ は、正規方程式の係数行列から得られる行列式の値であり、次のとおりである。

$$\Delta = \sum w_i x_i \sum w_i x_i - \sum w_i \sum w_i x_i^2$$

$$\begin{pmatrix} \sum w_i x_i & \sum w_i \\ \sum w_i x_i^2 & \sum w_i x_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum w_i y_i \\ \sum w_i x_i y_i \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \sum w_i x_i & \sum w_i \\ \sum w_i x_i^2 & \sum w_i x_i \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum w_i x_i & \sum w_i \\ \sum w_i x_i^2 & \sum w_i x_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum w_i x_i & \sum w_i \\ \sum w_i x_i^2 & \sum w_i x_i \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum w_i y_i \\ \sum w_i x_i y_i \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{\sum w_i x_i \sum w_i x_i - \sum w_i \sum w_i x_i^2} \begin{pmatrix} \sum w_i x_i & -\sum w_i \\ -\sum w_i x_i^2 & \sum w_i x_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum w_i x_i & \sum w_i \\ \sum w_i x_i^2 & \sum w_i x_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sum w_i x_i \sum w_i x_i - \sum w_i \sum w_i x_i^2} \begin{pmatrix} \sum w_i x_i & -\sum w_i \\ -\sum w_i x_i^2 & \sum w_i x_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum w_i y_i \\ \sum w_i x_i y_i \end{pmatrix}$$

したがって、 b と a は、次のようになる。

$$b = \frac{\sum w_i x_i \sum w_i y_i - \sum w_i \sum w_i x_i y_i}{\sum w_i x_i \sum w_i x_i - \sum w_i \sum w_i x_i^2} = \frac{\sum w_i \sum w_i x_i y_i - \sum w_i x_i \sum w_i y_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} = f_b(x, y)$$

$$a = \frac{\sum w_i x_i^2 \sum w_i y_i - \sum w_i x_i \sum w_i x_i y_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} = f_a(x, y)$$

7.2 異精度の場合の s_b^2 、 s_a^2 、 s_{ba}^2 の計算

「7.3 定量値の不確かさの計算式」で用いる s_b^2 、 s_a^2 、 s_{ba}^2 は、以下のように計算する。ここで、 s_b^2 、 s_a^2 、 s_{ba}^2 は、それぞれ検量線式の傾き b の分散、切片 a の分散、 b と a の共分散を意味する。

7.2.1 s_b^2 の計算

検量線の傾き b のばらつき (s_b) は、6.2.1 と同様に傾き b を決定するための縦軸測定値のばらつき (s_y) に一定の係数 (微分係数又は感度係数) を乗じたものとして計算する。ばらつきとして、分散 s_b^2 を求める。係数 (微分係数又は感度係数) は、 b が上記のとおり、 $b = f_b(x, y)$ となっているが、今回の最小二乗法の前提として、横軸に不確かさ (ばらつき) は、ないとしているので、 y で微分した値を係数として用いる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_b(x, y)}{\partial y} \right) &= \left(\frac{\sum w_i \sum w_i x_i y_i - \sum w_i x_i \sum w_i y_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} \right)' \\ &= \left(\frac{w_i x_i \sum w_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} - \frac{w_i \sum w_i x_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} \right) \\ &= \left(\frac{w_i x_i \sum w_i - w_i \sum w_i x_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} \right) \\ &= \left(\frac{w_i x_i \sum w_i - w_i \sum w_i x_i}{\Delta} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_b(x, y)}{\partial y} \right)^2 &= \left(\frac{w_i x_i \sum w_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} - \frac{w_i \sum w_i x_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} \right)^2 \\ &= \left(\frac{w_i x_i \sum w_i - w_i \sum w_i x_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} \right)^2 \\ &= \left(\frac{w_i^2 x_i^2 (\sum w_i)^2 - 2(w_i^2 x_i \sum w_i \sum w_i x_i) + w_i^2 (\sum w_i x_i)^2}{\Delta^2} \right) \end{aligned}$$

ここで、 $w_i = \frac{1}{s_{y_i}^2}$ 、 $s_{y_i}^2 = \frac{1}{w_i}$

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y}\right)^2 s_{yi}^2 &= \left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y}\right)^2 \frac{1}{w_i} \\
 &= \left\{ \frac{w_i^2 x_i^2 (\sum w_i)^2 - 2(w_i^2 x_i \sum w_i \sum w_i x_i) + w_i^2 (\sum w_i x_i)^2}{\Delta^2} \right\} \frac{1}{w_i} \\
 &= \left\{ \frac{w_i x_i^2 (\sum w_i)^2 - 2(w_i x_i \sum w_i \sum w_i x_i) + w_i (\sum w_i x_i)^2}{\Delta^2} \right\} \\
 s_b^2 &= \sum \left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y}\right)^2 s_{yi}^2 \\
 &= \frac{1}{\Delta^2} \{ \sum w_i x_i^2 (\sum w_i)^2 - 2(\sum w_i x_i \sum w_i \sum w_i x_i) + \sum w_i (\sum w_i x_i)^2 \} \\
 &= \frac{1}{\Delta^2} \sum w_i \{ \sum w_i \sum w_i x_i^2 - (\sum w_i x_i)^2 \} \\
 &= \frac{1}{\Delta^2} \sum w_i \cdot (-\Delta) \\
 &= \frac{1}{(-\Delta)} \sum w_i \\
 &= \frac{\sum w_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - (\sum w_i x_i)^2}
 \end{aligned}$$

7.2.2 s_a^2 の計算

7.2.1 と同様に計算する。

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y}\right) &= \left(\frac{\sum w_i x_i^2 \sum w_i y_i - \sum w_i x_i \sum w_i x_i y_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} \right)' \\
 &= \left(\frac{w_i \sum w_i x_i^2}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} - \frac{w_i x_i \sum w_i x_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} \right) \\
 &= \frac{(w_i \sum w_i x_i^2 - w_i x_i \sum w_i x_i)}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} \\
 &= \frac{(w_i \sum w_i x_i^2 - w_i x_i \sum w_i x_i)}{\Delta} \\
 \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y}\right)^2 &= \frac{(w_i \sum w_i x_i^2 - w_i x_i \sum w_i x_i)^2}{\Delta^2} \\
 &= \frac{w_i^2 (\sum w_i x_i^2)^2 - 2w_i^2 x_i (\sum w_i x_i) (\sum w_i x_i^2) + w_i^2 x_i^2 (\sum w_i x_i)^2}{\Delta^2} \\
 s_a^2 &= \sum \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y}\right)^2 s_{yi}^2 = \sum \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y}\right)^2 \left(\frac{1}{w_i}\right)
 \end{aligned}$$

$$\text{ここで、 } w_i = \frac{1}{s_{y_i}^2} \text{、 } s_{y_i}^2 = \frac{1}{w_i}$$

$$\begin{aligned} s_a^2 &= \sum \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y} \right)^2 s_{y_i}^2 \\ &= \sum \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y} \right)^2 \left(\frac{1}{w_i} \right) \\ &= \frac{\sum w_i (\sum w_i x_i^2)^2 - 2 \sum w_i x_i (\sum w_i x_i) (\sum w_i x_i^2) + \sum w_i x_i^2 (\sum w_i x_i)^2}{\Delta^2} \\ &= \frac{(\sum w_i x_i^2)}{\Delta^2} \{ \sum w_i (\sum w_i x_i^2) - 2 \sum w_i x_i \sum w_i x_i + (\sum w_i x_i)^2 \} \\ &= \frac{(\sum w_i x_i^2)}{\Delta^2} \{ \sum w_i (\sum w_i x_i^2) - (\sum w_i x_i)^2 \} \\ &= \frac{(\sum w_i x_i^2)}{\Delta^2} \cdot \Delta \\ &= \frac{\sum w_i x_i^2}{\Delta} \\ &= \frac{\sum w_i x_i^2}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - (\sum w_i x_i)^2} \end{aligned}$$

7.2.3 s_{ba}^2 の計算

7.2.1 及び 7.2.2 と同様に求める。

$$s_{ba}^2 = \sum \left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y} \right) s_{y_i}^2$$

$$\text{ここで、 } w_i = \frac{1}{s_{y_i}^2} \text{、 } s_{y_i}^2 = \frac{1}{w_i} \text{、 } \Delta = \sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i$$

$$\left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y} \right) = \frac{(w_i x_i \sum w_i - w_i \sum w_i x_i)}{\Delta}$$

$$\left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y} \right) = \frac{(w_i \sum w_i x_i^2 - w_i x_i \sum w_i x_i)}{\Delta}$$

$$\left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y} \right) = \frac{(w_i x_i \sum w_i - w_i \sum w_i x_i)}{\Delta} \cdot \frac{(w_i \sum w_i x_i^2 - w_i x_i \sum w_i x_i)}{\Delta}$$

$$= \frac{1}{\Delta^2} (w_i x_i \sum w_i - w_i \sum w_i x_i) (w_i \sum w_i x_i^2 - w_i x_i \sum w_i x_i)$$

$$= \frac{1}{\Delta^2} (w_i x_i \sum w_i \cdot w_i \sum w_i x_i^2 - w_i x_i \sum w_i \cdot w_i x_i \sum w_i x_i - w_i \sum w_i x_i \cdot w_i \sum w_i x_i^2 +$$

$$w_i \sum w_i x_i \cdot w_i x_i \sum w_i x_i)$$

であるから、

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y} \right) s_{y_i}^2 = \frac{1}{\Delta^2} (w_i x_i \sum w_i - w_i \sum w_i x_i) (w_i \sum w_i x_i^2 - w_i x_i \sum w_i x_i) s_{y_i}^2 \\
 & = \frac{1}{\Delta^2} (w_i x_i \sum w_i \cdot w_i \sum w_i x_i^2 - w_i x_i \sum w_i \cdot w_i x_i \sum w_i x_i - w_i \sum w_i x_i \cdot w_i \sum w_i x_i^2 + \\
 & w_i \sum w_i x_i \cdot w_i x_i \sum w_i x_i) s_{y_i}^2 \\
 & = \frac{1}{\Delta^2} (w_i x_i \sum w_i \cdot w_i \sum w_i x_i^2 - w_i x_i \sum w_i \cdot w_i x_i \sum w_i x_i - w_i \sum w_i x_i \cdot w_i \sum w_i x_i^2 + \\
 & w_i \sum w_i x_i \cdot w_i x_i \sum w_i x_i) \frac{1}{w_i} \\
 & = \frac{1}{\Delta^2} (x_i \sum w_i \cdot w_i \sum w_i x_i^2 - x_i \sum w_i \cdot w_i x_i \sum w_i x_i - \sum w_i x_i \cdot w_i \sum w_i x_i^2 + \sum w_i x_i \cdot \\
 & w_i x_i \sum w_i x_i) \\
 & s_{ba}^2 = \sum \left(\frac{\partial f_b(x,y)}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial f_a(x,y)}{\partial y} \right) s_{y_i}^2 \\
 & = \frac{1}{\Delta^2} \sum (x_i \sum w_i \cdot w_i \sum w_i x_i^2 - x_i \sum w_i \cdot w_i x_i \sum w_i x_i - \sum w_i x_i \cdot w_i \sum w_i x_i^2 + \sum w_i x_i \cdot \\
 & w_i x_i \sum w_i x_i) \\
 & = \frac{1}{\Delta^2} \sum (w_i x_i \sum w_i \cdot \sum w_i x_i^2 - w_i x_i x_i \sum w_i \cdot \sum w_i x_i - w_i \sum w_i x_i \cdot \sum w_i x_i^2 + w_i x_i \sum w_i x_i \cdot \\
 & \sum w_i x_i) \\
 & = \frac{1}{\Delta^2} (\sum w_i x_i \sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i^2 \sum w_i \sum w_i x_i - \sum w_i \sum w_i x_i \sum w_i x_i^2 + \\
 & \sum w_i x_i \sum w_i x_i \sum w_i x_i) \\
 & = \frac{1}{\Delta^2} (\sum w_i x_i \sum w_i x_i \sum w_i x_i - \sum w_i \sum w_i x_i \sum w_i x_i^2) \\
 & = \frac{\sum w_i x_i}{\Delta^2} (\sum w_i x_i \sum w_i x_i - \sum w_i \sum w_i x_i^2) \\
 & = \frac{\sum w_i x_i}{\Delta^2} (-\Delta) \\
 & = \frac{-\sum w_i x_i}{\Delta}
 \end{aligned}$$

ここで、 $\Delta = \sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i$ であり、 $-\Delta = \sum w_i x_i \sum w_i x_i - \sum w_i \sum w_i x_i^2$ である。

$$s_{ba}^2 = \frac{-\sum w_i x_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i}$$

7.3 定量値の不確かさの計算式

7.3.1 < s_{xu} の導出>

“未知試料についての縦軸測定値： y_u ” から求めた “未知試料の定量値： x_u (多くの場合、未知試料の濃度等)” の “不確かさ： s_{xu} ” を求める以下の式²⁾を導出する。

$$s_{x_u}^2 = \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2 \sum w_i} + \frac{(y_u - \bar{y}_w)^2}{b^4 (\sum w_i x_i^2 - \bar{x}_w^2 \sum w_i)}$$

まず、直線式 $y = bx + a$ から $x_u = \frac{y_u - a}{b} = f(y_u, b, a)$ とおいて、6.3.2 と同様に、

$$\text{不確かさの伝ば則}^3) \text{ から、} s_{x_u}^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial y_u}\right)^2 s_{y_u}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial a}\right)^2 s_a^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial b}\right)^2 s_b^2 + 2 \left(\frac{\partial f}{\partial a}\right) \left(\frac{\partial f}{\partial b}\right) s_{ba}^2$$

となる。

$$\text{また、} s_a^2 = \frac{\sum w_i x_i^2}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - (\sum w_i x_i)^2}、s_b^2 = \frac{\sum w_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - (\sum w_i x_i)^2}、s_{ba}^2 = \frac{-\sum w_i x_i}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - (\sum w_i x_i)^2}$$

であり、さらに、 $\left(\frac{\partial f}{\partial y_u}\right) = \frac{1}{b}$ 、 $\left(\frac{\partial f}{\partial a}\right) = -\frac{1}{b}$ 、 $\left(\frac{\partial f}{\partial b}\right) = \frac{y_u - a}{b^2}$ から、以下のように計算する。

7.3.2 < s_{xu} の具体的導出>

$$\begin{aligned} s_{x_u}^2 &= \left(\frac{\partial f}{\partial y_u}\right)^2 s_{y_u}^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial a}\right)^2 s_a^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial b}\right)^2 s_b^2 + 2 \left(\frac{\partial f}{\partial a}\right) \left(\frac{\partial f}{\partial b}\right) s_{ba}^2 \\ &= \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2} \frac{\sum w_i x_i^2}{\Delta} + \frac{(y_u - a)^2 \sum w_i}{b^4 \Delta} - \frac{2(y_u - a) \sum w_i x_i}{b^3 \Delta} \\ &= \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2} \left\{ \frac{\sum w_i x_i^2 + \frac{(y_u - a)^2 \sum w_i}{b^2} - \frac{2(y_u - a) \sum w_i x_i}{b}}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} \right\} \\ &= \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2} \left\{ \frac{\sum w_i x_i^2 - \bar{x}_w^2 \sum w_i + \bar{x}_w^2 \sum w_i + \frac{(y_u - a)^2 \sum w_i}{b^2} - \frac{2(y_u - a) \sum w_i x_i}{b}}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - \sum w_i x_i \sum w_i x_i} \right\} \\ &= \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2} \left\{ \frac{(\sum w_i x_i^2 - \bar{x}_w^2 \sum w_i) + \bar{x}_w^2 \sum w_i + \frac{(y_u - a)^2 \sum w_i}{b^2} - \frac{2(y_u - a) \bar{y}_w \sum w_i}{b}}{\sum w_i \sum w_i x_i^2 - (\sum w_i)^2 \bar{x}_w^2} \right\} \\ &= \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2} \left[\frac{(\sum w_i x_i^2 - \bar{x}_w^2 \sum w_i) + \bar{x}_w^2 \sum w_i + \frac{(y_u - a)^2 \sum w_i}{b^2} - \frac{2(y_u - a) \bar{y}_w \sum w_i}{b}}{\sum w_i \{\sum w_i x_i^2 - (\sum w_i) \bar{x}_w^2\}} \right] \\ &= \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2} \left[\frac{(\sum w_i x_i^2 - \bar{x}_w^2 \sum w_i)}{\sum w_i \{\sum w_i x_i^2 - \bar{x}_w^2 \sum w_i\}} \right] + \frac{1}{b^2} \left[\frac{\bar{x}_w^2 \sum w_i + \frac{(y_u - a)^2 \sum w_i}{b^2} - \frac{2(y_u - a) \bar{y}_w \sum w_i}{b}}{\sum w_i \{\sum w_i x_i^2 - \bar{x}_w^2 \sum w_i\}} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2 \sum w_i} + \frac{1}{b^2} \left\{ \frac{\overline{x_w}^2 + \frac{(y_u - a)^2}{b^2} - \frac{2(y_u - a)(\overline{y_w} - a)}{b^2}}{(\sum w_i x_i^2 - \overline{x_w}^2 \sum w_i)} \right\} \\
&= \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2 \sum w_i} + \frac{1}{b^2} \left\{ \frac{\frac{(\overline{y_w} - a)^2}{b^2} + \frac{(y_u - a)^2}{b^2} - \frac{2(y_u - a)(\overline{y_w} - a)}{b^2}}{(\sum w_i x_i^2 - \overline{x_w}^2 \sum w_i)} \right\} \\
&= \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2 \sum w_i} + \frac{1}{b^4} \left\{ \frac{(\overline{y_w} - a)^2 + (y_u - a)^2 - 2(y_u - a)(\overline{y_w} - a)}{(\sum w_i x_i^2 - \overline{x_w}^2 \sum w_i)} \right\} \\
&= \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2 \sum w_i} + \frac{\{(y_u - a) - (\overline{y_w} - a)\}^2}{b^4 (\sum w_i x_i^2 - \overline{x_w}^2 \sum w_i)} \\
&= \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2 \sum w_i} + \frac{(y_u - \overline{y_w})^2}{b^4 (\sum w_i x_i^2 - \overline{x_w}^2 \sum w_i)}
\end{aligned}$$

ここで、 $\overline{x_w}$, $\overline{y_w}$ は校正用データ ($x_i, y_i; i=1, 2, \dots, n$) の重みつき平均 (重心) を表す。ただし、 $s_{y_u}^2$ は、6.2 とは異なり、縦軸の大きさによって異なることに注意が必要である。縦軸の大きさによって試料測定の際のばらつきも異なるので、等精度とは区別して $s_{y_u}^2$ のままの表記とした。

$s_{y_{u_i}}^2 = \frac{s_{y_i}^2}{m}$ として評価することも可能である。

なお、 $\overline{x_w} = \frac{\sum w_i x_i}{\sum w_i}$ 、 $\overline{y_w} = \frac{\sum w_i y_i}{\sum w_i} = b\overline{x_w} + a$ である。

8. 横軸定量値の標準不確かさ

検量線によって縦軸測定値から横軸の値を求める (推定する) 場合に、縦軸のばらつきの状況によって以下の近似式を用いて、横軸の測定値 (定量値) の不確かさとするのが可能である。縦軸のばらつきをどのように評価 (等精度か異精度か) するかによって横軸定量値 (濃度等) の標準不確かさの評価式 s_{x_u} が異なってくることに注意が必要である。

等精度、異精度に分けて説明した、以下の不確かさの評価式のうち、等精度の場合については、筆者らも説明¹⁾したが、いくつかの論文等でも紹介されている⁴⁾⁵⁾。

一方、異精度については、先の解説²⁾で筆者らが提案した式である。本稿では具体的な検量線データを用いた不確かさの計算は行わなかったが、同じ検量線データを用いる場合でも、以下の 8.1 と 8.2 で計算される不確かさは大きな違いとなることが考えられるので、求められる不確かさに応じた適切な式の利用が必要である。

8.1 縦軸等精度の場合 (一般的に知られている式) ¹⁾⁴⁾⁵⁾

$$s_{x_u}^2 = \frac{s_y^2}{b^2} \left\{ \frac{1}{m} + \frac{1}{n} + \frac{(y_u - \bar{y})^2}{b^2 \sum (x_i - \bar{x})^2} \right\}$$

8.2 縦軸異精度の場合 (筆者らが提案した式) ²⁾

$$s_{x_u}^2 = \frac{s_{y_u}^2}{b^2} + \frac{1}{b^2 \sum w_i} + \frac{(y_u - \bar{y}_w)^2}{b^4 (\sum w_i x_i^2 - \bar{x}_w^2 \sum w_i)}$$

謝辞

重みの考え方については、本稿の元となった既報²⁾の中で記したとおり、新重光博士 (元独立行政法人産業技術総合研究所) から大変貴重なご助言をいただきました。また、佐藤寿邦教授 (当時) (元横浜国立大学) から親切丁寧なご指導をいただきました。あらためて感謝いたします。

文献

- 1) 四角目和広、佐藤寿邦：“直線検量線を利用する定量分析値の不確かさ—考え方と計算法”，環境と測定技術，Vol.30(4)，34-42(2003).
- 2) 四角目和広、佐藤寿邦：“重みつき最小二乗法による直線検量線 - 考え方と不確かさ”，環境と測定技術，Vol.31(2)，17-27(2004).
- 3) 今井秀孝ほか 編著：測定における不確かさの表現のガイド[GUM]ハンドブック、日本規格協会(2018).
- 4) Lutz Brüggemann, Rainer Wennrich, *Accred Qual Assur* (2002) 7:269-273.
- 5) 田中秀幸 (著)、高津章子 (協力)：分析・測定データの統計処理—分析化学データの扱い方—、朝倉書店(2014).

学会発表等の実績
(令和7年度)

1. 論文投稿

(1) 東京事業所

1) Tomohiro Kubo¹, Ravi Teja Ananthu¹, Takumi Noda², Yoshifumi Amamoto³, Hironori Taguchi, Yingjun An⁴, Ryoya Kamiki¹, Chihiro Homma⁵, Hiroyasu Masunaga⁶, Sono Sasaki^{7,8,9}, Mineto Uchiyama⁵, Masami Kamigaito⁵, Takako Kikuchi, Yasuhiro Kohsaka^{2,10}, Atsushi Takahara⁴, Kotaro Satoh¹

Iterative Synthesis and Marine-Biodegradation Assessment of Discrete Oligomers Based on Poly(Butylene Succinate), Poly(Ethylene Terephthalate), Polyamide 6, and Polyisoprene

Macromolecules, 58(16)8649–8657 (2025)

<https://doi.org/10.1021/acs.macromol.5c01531>

¹ Department of Chemical Science and Engineering, Institute of Science Tokyo, ² Faculty of Textile Science and Technology, Shinshu University, ³ Graduate School of Social Data Science, Hitotsubashi University, ⁴ Research Center for Negative Emission Technologies, Kyushu University, ⁵ Department of Molecular and Macromolecular Chemistry, Graduate School of Engineering, Nagoya University, ⁶ Japan Synchrotron Radiation Research Institute, ⁷ Department of Biobased Materials Science, Graduate School of Science and Technology, Kyoto Institute of Technology, ⁸ Faculty of Fiber Science and Engineering, Kyoto Institute of Technology, ⁹ RIKEN SPring-8 Center, ¹⁰ Research Initiative for Supra-Materials, Interdisciplinary Cluster for Cutting Edge Research, Shinshu University

2) Hironori Taguchi, Nao Osaka, Takako Kikuchi, Keiji Tanaka^{1,2}

Development and multi-site validation of a rapid biodegradation test method for seafloor conditions using extracted seawater with microbes from sediments
Science of The Total Environment, 1002, 180597 (2025)

<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2025.180597>

¹ Department of Automotive Science, Kyushu University, ² Department of Applied Chemistry and Center for Polymer Interface and Molecular Adhesion Science, Kyushu University

3) Yuki Kitada¹, Akira Ishigami^{1,2}, Yutaka Kobayashi², Yoshiyuki Suetsugu², Hironori Taguchi, Takako Kikuchi, Hiroshi Ito^{1,2}

Synthesis of High-Performance and Biodegradable Polymer Blends Based on Poly(butylene succinate) and Grafted Polyrotaxane via Controlled Reactive Processing

Polymers, 18(1)38 (2025)

<https://doi.org/10.3390/polym18010038>

¹ Graduate School of Organic Materials Science, Yamagata University, ² Research Center for GREEN Materials and Advanced Processing (GMAP), Yamagata University

4) Ko Yamaguchi¹, Atsuomi Shundo², Hironori Taguchi, Takako Kikuchi, Riichi Kuwahara³, Satoru Yamamoto⁴, Daisuke Kawaguchi^{1,3}, Keiji Tanaka^{1,2,4}

Hygrothermal Degradation Mechanism of Amine-cured Epoxy Resin

Polym J(2026)

<https://doi.org/10.1038/s41428-026-01150-z>

¹ Department of Applied Chemistry, Kyushu University, ² Department of Automotive Science, Kyushu University, ³ Dassault Systèmes K. K., ⁴ Center for Polymer Interface and Molecular Adhesion Science, Kyushu University

5) Hironori Taguchi, Takako Kikuchi, Yoshifumi Amamoto², Hiroshi Morita³, Keiji Tanaka^{1,4}

Relative contributions of crystallinity and environmental factors to the degradation rate of poly(ϵ -caprolactone) (PCL) under coastal field conditions

Polym J(2026)

<https://doi.org/10.1038/s41428-026-01153-w>

¹ Department of Automotive Science, Kyushu University, ² Department of Advanced Materials Science, Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, ³ Research Center for Computational Design of Advanced Functional Materials (CD-FMat), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), ⁴ Department of Applied Chemistry and Center for Polymer Interface and Molecular Adhesion Science, Kyushu University

6) Takamasa Miura¹, Erika Usui¹, Yoshifumi Ohyama¹, Tetsuhiro Watano², Naoko Yamano³, Atsuyoshi Nakayama³, Hironori Taguchi, Takako Kikuchi, Masao Kunioka⁴, Kei Kamino¹

Robustness of Microbial Quantification Methods to Seawater in Marine Plastic Biodegradation Test

Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, zbag045(2026)

<https://doi.org/10.1093/bbb/zbag045>

¹ Biological Resource Center, National Institute of Technology and Evaluation (NBRC), ² Shizuoka Environment and Hygiene Institute, ³ Biomedical Research Institute, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), ⁴ Standardization Promotion Office, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

7) 岩瀬由佳, 隠塚裕之

高湿度下及び低湿度下で生じるクロロプレンゴムのオゾン劣化メカニズム

日本ゴム協会誌, 99(5)103-109(2026)

(2) 大阪事業所

1) Masumi Hinoshita, Yosuke Maeda, Akio Kawai¹, Masahiro Takeyoshi

False negatives in the modified ESR-based photosafety test (ESR-PT) caused by ultraviolet-C light

The Journal of Toxicological Sciences, 51(6)1-6(2026)

<https://doi.org/10.2131/jts.51.1>

¹ Department of Chemistry, Faculty of Science, Kanagawa University

(3) 日田事業所

1) Hiroyuki Togawa, Takao Yamaguchi¹, Junji Kawakami², Satoshi Obika¹

Current trends in liquid chromatography-mass spectrometry analysis of small interfering RNAs: A short review

Journal of Chromatography A, 1766, 466550(2026)

<https://doi.org/10.1016/j.chroma.2025.466550>

¹ Graduate School of Pharmaceutical Sciences, The University of Osaka, ² Frontiers of Innovative Research in Science and Technology (FIRST), Konan University

2) 高嶺竜太郎¹, 山口卓男¹, 廣瀬賢治², 関口光明³, 唐澤薫⁴, 岩崎了教⁴, 高原健太郎⁵, 瀬崎浩史⁶, 早川禎宏⁷, 騰川博之, 大久保貴史, 長野裕夫⁸, 竹澤正明⁹, 櫻井周⁹, 寄本捺愛¹⁰, 富田恵麗沙¹⁰, 吉田徳幸¹¹, 井上貴雄¹¹, 小比賀聡¹, 川上純司^{10,12}

複数種の液体クロマトグラフ質量分析計を用いたオリゴヌクレオチド不純物の相対定量の比較解析

医薬品医療機器レギュラトリーサイエンス, 57(3) (2026)

¹ 大阪大学大学院薬学研究科, ² 日本ウォーターズ株式会社, ³ 塩野義製薬株式会社, ⁴ 株式会社エービー・サイエックス, ⁵ サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社, ⁶ アジレント・テクノロジー株式会社, ⁷ 株式会社島津製作所, ⁸ 株式会社住化分析センター, ⁹ 株式会社東レリサーチセンター, ¹⁰ 甲南大学核酸医薬研究所 (KOLOT), ¹¹ 国立医薬品食品衛生研究所, ¹² 甲南大学 ロンティアサイエンス学部 (FIRST) 生命化学科

(4) 安全性評価技術研究所

1) Tae Hayashi, Akira Kotaki, Asako Fukushima, Tomoko Kawamura¹, Naruo Katsutani¹, Takashi Yamada¹, Akihiko Hirose

Estimation of intravenous TTC (TTCiv) for Extractables and Leachables (E&Ls) by applying a modifying factor based on the blood concentration predicted by open-source PBPK model

The Journal of Toxicological Sciences, 50(9)471-481(2025)

<https://doi.org/10.2131/jts.50.471>

¹ National Institute of Health Sciences

2. 本, 雑誌等投稿

(1) 東京事業所

1) 菊地貴子

高分子材料の海洋生分解性評価

繊維学会誌, 81(4)166-169(2025)

<https://doi.org/10.2115/fiber.81.P-166>

2) Shota Ando^{1,2}, Daisuke Kasai³, Takashi Masaki⁴, Eri Ueno^{1,2}, Megumi Akiyama^{1,2}, Namiko Gibu⁵, Yingjun An⁶, Takako Kikuchi, Maina Yonemura⁷, Dai-ichiro Kato⁷, Hirofumi Hinata⁸, Atsushi Takahara⁶, Kohzo Ito^{1,2}

Discovery of the Marine Biodegradability of Nylon 6 and Nylon 6,6 Copolymer Fishing Lines

ChemRxiv, Version1(2025)

<https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2025-cbmb0>

¹ Graduate School of Frontier Sciences, the University of Tokyo, ² Research Center for Macromolecules and Biomaterials, National Institute for Materials Science, ³ Nagaoka University of Technology, ⁴ Kureha Corp., ⁵ National Institute of Technology, Okinawa College, ⁶ Reserch Center for Negative Emissions Technologies, Kyushu University, ⁷ Kagoshima University, ⁸ Department of Engineering, Faculty of Engineering, Ehime University

3) 菊地貴子

プラスチック海洋生分解性評価法の開発

高分子, 74(7)371-372(2025)

https://doi.org/10.1295/kobunshi.74.7_371

4) 近藤寛朗

2026 年度 初級ゴム技術研修会のご案内

ポリマーTECH, 28, 48-51 (2026)

5) 前田純平

小角 X 線散乱測定による過酸化物架橋フッ素ゴムの架橋不均一性評価

ポリマーTECH, 28, 44-47 (2026)

6) 久慈茂樹¹, 近藤寛朗, 松本高志², 今井隆¹

橋梁用積層ゴム支承材料のオゾン亀裂状態に関する評価基準定量化の基礎的検討

構造工学論文集, 72A, 216-229 (2026)

<https://doi.org/10.11532/structcivil.72A.216>

¹ 一般社団法人ゴム支承協会, ² 北海道大学大学院工学研究院

7) 田原佳子, 山崎太一¹, 中村哲枝¹, 沢田貴史, 伊藤信靖¹, 上野博子

計量法トレーサビリティ制度による陰イオン界面活性剤混合標準液の供給を目指した
精確な濃度校正技術の確立

分析化学, 74(10.11)603-610 (2025)

<https://doi.org/10.2116/bunsekikagaku.74.603>

¹ 国立研究開発法人産業技術総合研究所 (AIST) 計量標準総合センター (NMIJ)

8) 山崎太一¹, 中村哲枝¹, 伊藤信靖¹, 田原佳子, 上野博子

モル吸光係数に基づく相対感度を用いた高濃度アルキルベンゼンスルホン酸ナトリウム
標準液の定量

分析化学, 74(10.11)621-626 (2025)

<https://doi.org/10.2116/bunsekikagaku.74.621>

¹ 国立研究開発法人産業技術総合研究所 (AIST) 計量標準総合センター (NMIJ)

(2) 名古屋事業所

1) 隠塚裕之

一般社団法人日本ゴム協会ゴム練り研究分科会

日本ゴム協会誌, 98(5)110-111 (2025)

<https://doi.org/10.2324/gomu.98.110>

2) 隠塚裕之

X 線 CT 法によるクラック深さの定量評価方法の開発—高精度のオゾンクラック定量評価を目指して—

日本ゴム協会誌, 98(11)248-253(2025)

<https://doi.org/10.2324/gomu.98.248>

(3) 大阪事業所

1) 大嶋紀一

プラスチック添加剤の規制と分析方法

成形加工, 37(8)316-319(2025)

<https://doi.org/10.4325/seikeikakou.37.316>

(4) 久留米事業所

1) 石橋猛, 松隈明彦¹, 宮崎晋介², 川岸寛³, 酒井奈美⁴, 小宮春平⁵

福岡県の希少野生生物—福岡県レッドデータブック 2024—

福岡県環境部自然化環境課(2025)

¹九州大学, ²一般社団法人北九州東労働基準協会, ³いであ株式会社国土環境研究所, ⁴西日本技術開発株式会社, ⁵環協保全団体わかぜん

2) 安達竜太

新規化学物質の安全性試験 第 5 回 生態毒性試験—急性毒性試験—

月刊化学物質管理, 9(9)70-74(2025)

3) 安達竜太

新規化学物質の安全性試験 第 6 回 生態毒性試験—慢性毒性試験—

月刊化学物質管理, 9(10)67-71(2025)

4) 太田裕也

新規化学物質の安全性試験 第 10 回 高分子フロースキーム試験 (酸・アルカリに対する安定性試験、水・有機溶媒に対する溶解性試験、分子量分布測定 (GPC 等))

月刊化学物質管理, 10(2)79-84(2025)

5) 吉川真弓, 村上秀和, 鍋岡良介, 安達竜太

環境リスク評価のための環境動態試験および環境毒性試験

安全性試験の教育・研修テキスト 第 7 版, 一般社団法人日本安全性試験受託研究機関協議会(2026)

学会発表等の実績 (令和 7 年度)

6) 安達竜太

第Ⅱ部 11 章 11.2.1 OECD の化学物質対策

環境毒性学, 日本環境毒性学会 監修(2026)

7) 鍋岡良介

第Ⅲ部 15 章 Column 分解性と蓄積性の評価

環境毒性学, 日本環境毒性学会 監修(2026)

(5) 日田事業所

1) 藤島沙織

新規化学物質の安全性試験 第 7 回 変異原性試験—細菌を用いる復帰突然変異試験
(Ames 試験) —

月刊化学物質管理, 9(11)84-88(2025)

2) 鈴木克

新規化学物質の安全性試験 第 8 回 変異原性試験—染色体異常試験—

月刊化学物質管理, 9(12)76-80(2025)

3) 小林俊夫

新規化学物質の安全性試験 第 9 回 反復投与毒性試験

月刊化学物質管理, 10(1)59-65(2025)

(6) 安全性評価技術研究所

1) 広瀬明彦

日本の食品安全のリスク評価における NAM の利用状況と課題
動物実験ニュース, 74(3)83-88(2025)

2) 田辺愛子

第Ⅲ部 14 章 Column ストックホルム条約と水俣条約

環境毒性学, 日本環境毒性学会 監修(2026)

3) 広瀬明彦

PFAS ばく露による健康リスク評価の最近の動向

地下水学会誌, 68(1)79-87(2026)

<https://doi.org/10.5917/jagh.68.79>

3. 口頭発表

(1) 東京事業所

1) 中西洋平¹, 竹中幹人¹, 澤田諭, 近藤寛朗, 柴田基樹², 宮崎司², 元川竜平³, 熊田高之³, 三田一樹⁴, 山本勝宏⁵, コントラスト変調小角中性子散乱法によるシリカ含有 SBR の高次構造解析: 種々のシランカップリング剤の効果, 日本ゴム協会 2025 年年次大会 (2025 年 5 月, 東京)

¹ 京都大学化学研究所, ² 京都大学, ³ 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構, ⁴ 一般財団法人総合科学研究機構, ⁵ 名古屋工業大学

2) 安藤翔太^{1,2}, 笠井大輔³, 上野瑛理^{1,2}, 秋山めぐみ^{1,2}, 儀武菜美子⁴, 菊地貴子, 高原淳⁵, 伊藤耕三^{1,2}, 難生分解性ポリアミドの凍結粉碎による生分解性発現, 第 74 回高分子学会年次大会 (2025 年 5 月, オンライン)

¹ 東京大学大学院新領域創成科学研究科, ² 国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS), ³ 長岡技術科学大, ⁴ 沖縄工業高等専門学校, ⁵ 九州大学ネガティブエミッションテクノロジー研究センター (K-NETs)

3) 菊地貴子, 田口浩然, 尾坂奈生, 田中敬二¹, 海洋中での生分解性マイクロプラスチックの分解挙動の解析, 第 74 回高分子学会年次大会 (2025 年 5 月, オンライン)

¹ 九州大学大学院統合新領域学府

4) 安藤翔太^{1,2}, 正木崇士³, 笠井大輔⁴, 上野瑛理^{1,2}, 儀武菜美子⁵, インジューンアン⁶, 菊地貴子, 加藤太郎⁷, 高原淳⁶, 伊藤耕三^{1,2}, 難生分解性ポリアミドの共重合比率による生分解性発現, 第 74 回高分子学会年次大会 (2025 年 5 月, オンライン)

¹ 東京大学大学院新領域創成科学研究科, ² 国立研究開発法人物質・材料研究機構, ³ 株式会社クレハ, ⁴ 長岡技術科学大学, ⁵ 沖縄工業高等専門学校, ⁶ 九州大学ネガティブエミッションテクノロジー研究センター (K-NETs), ⁷ 鹿児島大学

5) 河本遼¹, 田口浩然, 菊地貴子, 日向博文², 西辻祥太郎¹, 藤浩志^{1,3}, 松野寿生¹, 多分岐高分子の混合に基づくポリ(ϵ -カプロラクトン)フィルムの海洋分解性制御, 第 74 回高分子学会年次大会 (2025 年 5 月, オンライン)

¹ 山形大学大学院有機材料システム研究科, ² 愛媛大学大学院理工学研究科, ³ 山形大学グリーンマテリアル成形加工研究センター (GMAP)

6) 北田佑樹¹, 小林豊², 末次義幸², 石神明^{1,2}, 田口浩然, 菊地貴子, 伊藤浩志^{1,2}, ポリブチレンサクシネートの反応混練による高次構造制御と高タフネス化, 2025 年繊維学会年次大会 (2025 年 6 月, 東京)

¹ 山形大学大学院有機材料システム研究科, ² 山形大学グリーンマテリアル成形加工研究センター (GMAP)

7) 河本遼¹, 田口浩然, 菊地貴子, 日向博文², 西辻祥太郎¹, 伊藤浩志^{1,3}, 松野寿生¹, 海洋環境におけるポリ(ε-カプロラク톤)/ハイパーブランチポリマーブレンドの分解挙動, 2025 年繊維学会年次大会 (2025 年 6 月, 東京)

¹ 山形大学大学院有機材料システム研究科, ² 愛媛大学大学院理工学研究科, ³ 山形大学グリーンマテリアル成形加工研究センター (GMAP)

8) Y. Kitada¹, Y. Kobayashi², Y. Suetugu², A. Ishigami^{1,2}, H. Taguchi, T. Kikuchi, H. Ito^{1,2}, CONTROL OF HIGHER-ORDER STRUCTURE AND TOUGHENING OF POLYBUTYLENE SUCCINATE BY REACTION KNEADING, Polymer Engineering & Science International (PESI) Conference 2025 (2025 年 6 月, 福岡)

¹ Graduate School of Organic Materials Science, Yamagata University, ² Research Center for GREEN Materials and Advanced Processing (GMAP), Yamagata University

9) 齊藤貴之, ゴム状態 ¹H NMR 法による光劣化した加硫天然ゴムの構造解析, マテリアルライフ学会第 36 回研究発表会 (2025 年, 東京)

10) 菊地貴子, 田口浩然, 尾坂奈生, 土壌中のタイヤと道路の摩擦により発生する摩耗粉塵 (TRWP) 定量における前処理工程の影響評価, 第 4 回環境化学物質合同大会 (2025 年 7 月, 山形)

11) 澤田諭, 硫黄架橋を制御したゴムの膨潤 SANS 測定による架橋構造の評価, 量子ビーム分析アライアンス第 2 回成果報告会 (2025 年 9 月, 東京)

12) Yuka Iwase, Relationship between ozone crack depth and tensile strength, ISO/TC45 国際会議 (SC2/WG3 meeting) (2025 年 10 月, インド)

13) Takako Kikuchi, ISO/DIS 21396 Determination of the mass concentration of tyre and road wear particles (TRWP) in soil and sediment Pyrolysis gas chromatography/mass spectrometry (GC/MS) method, 第 73 回 ISO/TC45 国際会議 (Technical Seminar) (2025 年 10 月, インド)

14) 藤原広匡, 近藤寛朗, 嶋田智宏, 仲山和海, 宮本隆広, 水素等高压ガス適合性高分子材料の評価基盤の構築と初期評価事例, 一般社団法人日本高圧力技術協会 令和 7 年度秋季講演会 (2025 年 11 月, 秋田)

15) Takako Kikuchi, Hironori Taguchi, Nao Osaka, Hiroshi Morita², Yoshifumi Amamoto³, Keiji Tanaka¹, Identification of Key Environmental Factors Affecting the Degradation of Marine Biodegradable Plastics through Machine Learning Analysis, The 8th International Conference on Bio-based Polymers (ICBP2025) (2025 年 11 月, 静岡)

¹ Department of Automotive Science, Kyushu University, ² Materials DX Research Center, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, ³ Graduate School of Frontier Sciences, the University of Tokyo

16) 前田純平, 澤田諭, 近藤寛朗, 中西洋平¹, 竹中幹人¹, 柴田基樹², 藤波想², 宮崎司², 山本勝宏³, 小角 X 線散乱による過酸化物架橋フッ素ゴムの架橋ネットワーク構造評価, プラスチック成形加工学会第 33 回秋季大会 (2025 年 11 月, 愛知)

¹ 京都大学化学研究所, ² 京都大学成長戦略本部, ³ 信州大学

17) 澤田諭, 近藤寛朗, 中西洋平¹, 柴田基樹², 藤波想², 宮崎司², 竹中幹人¹, 未架橋ゴム中の水分がスルフェンアミド系加硫促進剤による架橋反応へ与える影響, プラスチック成形加工学会第 33 回秋季大会 (2025 年 11 月, 愛知)

¹ 京都大学化学研究所, ² 京都大学成長戦略本部

18) 藤原広匡, 近藤寛朗, 嶋田智宏, 仲山和海, 宮本隆広, 直交実験法による高压水素下での水素適合性高分子評価- C-FaTH₂次世代試験装置を活用したプロトコール条件感度解析, 安全工学会 (JSSE) 第 58 回安全工学研究発表会 (2025 年 11 月, 福岡)

19) R. Kawamoto¹, H. Taguchi, T. Kikuchi, H. Hinata², S. Nishitsuji¹, H. Ito^{1,3}, H. Matsuno¹, Enhanced Marine Degradation Properties of Poly(epsilon-caprolactone) Films Based on Blending with Hydrophilic Hyperbranched Polymers, The 21th Asian Workshop on Polymer Processing (2025 年 12 月, 石川)

¹ Department of Organic Materials Science, Yamagata University, ² Department of Science and Engineering, Ehime University, ³ Research Center for GREEN Materials and Advanced Processing, Yamagata University

20) 澤田諭, 近藤寛朗, 中西洋平¹, 竹中幹人¹, 柴田基樹², 藤波想², 宮崎司², 加硫過程におけるゴム中の小粒径酸化亜鉛の化学的・空間的時間変化, 第 36 回エラストマー討論会 (2025 年 12 月, 愛知)

¹ 京都大学化学研究所, ² 京都大学

21) 前田純平, 前田涼二, 近藤寛朗, 素練り時のメカノケミカル反応を活用した変性天然ゴムの作製, 第 36 回エラストマー討論会 (2025 年 12 月, 愛知)

22) 岩瀬由佳, ゴムの耐オゾン性評価方法の変更点—2022 年以降の ISO 1431-1 及び JIS K 6259-1 改正を踏まえて—, 第 36 回エラストマー討論会 (2025 年 12 月, 愛知)

23) 宮川優剛¹, 安藤翔太^{2,3}, 田口 浩然, 菊地貴子, 横山理沙⁵, 土屋花帆⁶, 儀武菜美子⁴, 加藤太郎⁵, 山田美和⁶, 伊藤耕三^{2,3}, 笠井大輔¹, 海洋環境におけるポリアミド共重合体分解に関する微生物群の探索と解析, 日本農芸化学会 2026 年度京都大会 (2026 年 3 月, 京都)

¹ 長岡技術科学大学物質生物工学分野, ² 東京大学大学院新領域創成科学研究科, ³ 国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS), ⁴ 沖縄工業高等専門学校生物資源工学科, ⁵ 鹿児島大学大学院理工学研究科, ⁶ 岩手大学農学部

24) Takako Kikuchi, Comments from TC45/WG16 on ISO/DIS16094-3, ISO/TC147 国際会議 (SC2/JWG1) (2026 年 1 月, オンライン)

25) 坂牧寛, C18 カラムの基礎とオリゴ核酸の不純物分析への応用, 第 413 回液体クロマトグラフィー研究懇談会 (2025 年 11 月, 東京)

26) 坂牧寛, 自動分析ソフトウェアを活用した HPLC の分析メソッド開発支援, 第 414 回液体クロマトグラフィー研究懇談会 (2025 年 12 月, 東京)

(2) 名古屋事業所

1) Kento Watanabe, Satoshi Sawada, Junpei Maeda, Hiroaki Kondo, Yohei Nakanishi¹, Mikihiro Takenaka¹, Motoki Shibata², So Fujinami², Tsukasa Miyazaki², The effect of zinc stearate on the structure and mechanical properties of carbon black filled rubber, IRCO Rubber Con 2025 (2025 年 9 月, スウェーデン)

¹ Institute for Chemical Research, Kyoto University, ² Office of Institutional Advancement and Communications, Kyoto University

学会発表等の実績 (令和 7 年度)

2) 小島大和, 隠塚裕之, 山口由紀, 名倉あずさ¹, X線 CTによるオゾンクラックの新規評価方法, プラスチック成形加工学会第 33 回秋季大会 (2025 年 11 月, 愛知)

¹ 名古屋市工業研究所

3) 渡部健人, 澤田諭, 前田純平, 近藤寛朗, 中西洋平¹, 柴田基樹², 藤波想², 宮崎司², 竹中幹人¹, ステアリン酸亜鉛がカーボンブラック充填イソプレングムの構造と物性へ与える影響, プラスチック成形加工学会第 33 回秋季大会 (2025 年 11 月, 愛知)

¹ 京都大学, ² 京都大学成長戦略本部

4) 小島大和, 森山健太, 高橋慶光, 隠塚裕之, 山口由紀, 名倉あずさ¹, 引張試験によるオゾンクラック深さ推定方法の検討, 第 36 回エラストマー討論会 (2025 年 12 月, 愛知)

¹ 名古屋市工業研究所

(3) 久留米事業所

1) 井上傑士, 松浦武, 久樂喬, 縄司奨, 安達竜太, 生態毒性試験の推奨魚種を対象とした 2-フェノキシエタノールによる安楽死処置条件の検討, 第 4 回環境化学物質合同大会 (2025 年 7 月, 山形)

(4) 安全性評価技術研究所

1) 赤堀有美, NAMs に関する国際動向, JEMS・哺乳動物試験研究会 (JEMS・MMS 研究会) 第 86 回春の定例会 (2025 年 6 月, 大分)

2) 広瀬明彦, PFAS (有機フッ素化合物) による健康影響とは, 令和 7 年度日本環境変異原ゲノム学会公開シンポジウム「科学が解明する日常生活の安全性」(2025 年 6 月, 東京 (ハイブリット))

3) 山田隆志¹, 赤堀有美, Read-across: Current status, issues, and future prospects, 第 52 回日本毒性学会学術年会 (2025 年 7 月, 沖縄)

¹ 国立医薬品食品衛生研究所安全性生物試験研究センター

4. ポスター発表

(1) 東京事業所

1) 藤原広匡, 遠藤友紀, 近藤寛朗, 澤田諭, 嶋田智宏, 仲山和海, 前田順平, 宮本隆広, 高圧水素適合性高分子材料のウェルド部評価と専用試験片の適用, プラスチック成形加工学会第 36 回年次大会 (2025 年 6 月, 東京)

2) 藤原広匡, 近藤寛朗, 嶋田智宏, 仲山和海, 宮本隆広, 高压水素適合性高分子材料の劣化の評価に向けた次世代試験装置の導入, マテリアルライフ学会第 36 回研究発表会 (2025 年 7 月, 神奈川)

3) 田口浩然, 尾坂奈生, 菊地貴子, 田中敬二¹, 海洋環境における生分解性プラスチックの分解速度に影響を与える環境因子の解析, 第 74 回高分子討論会, (2025 年 9 月, 大阪)

¹ 九州大学大学院総合新領域学府

4) S. Ogata, T. Omura, H. Sakamaki, Advanced Separation of Nitrosamine Drug Substance-Related Impurities Using Alkaline Eluent in LC/MS/MS, HPLC2025 (2025 年 6 月, ベルギー)

5) 小幡友貴, 坂牧寛, 逆相イオン対高速液体クロマトグラフィーにおける移動相条件による選択性の最適化による PS オリゴ核酸の不純物からのクロマトグラフィック分離の改善, 日本核酸医薬学会第 10 回年会 (2025 年 7 月, 兵庫)

6) 坂牧寛, 小幡友貴, IP-RPLC における PS オリゴ核酸の不純物分析, 第 37 回バイオメディカル分析科学シンポジウム (BMAS2025) (2025 年 8 月, 東京)

7) 中野裕太, 小島大輝, 緒方伸也, 坂牧寛, メタルフリーカラムを用いる有機ヒ素化合物の LC-ESI-MS/MS 分析, 第 121 回日本食品衛生学会学術講演会 (2025 年 10 月, 東京)

8) 坂牧寛, 小幡友貴, IP-RPLC における PS オリゴ核酸の不純物分析の分離改善, 第 31 回 LC&LC/MS テクノプラザ (2026 年 2 月, 東京)

9) 小幡友貴, 大村友哉, 緒方伸也, 坂牧寛, 逆相イオン対高速液体クロマトグラフィーにおける移動相条件の最適化によるホスホロチオアートオリゴ核酸と不純物のクロマトグラフィック分離の改善, 日本薬学会第 146 年会 (2026 年 3 月, 大阪)

10) 田原佳子, 石原光夫, 松本篤正, 沢田貴史, 三浦勉¹, ICP-OES 及び IC を用いた共存元素の異なるけい素標準液の精確な濃度測定と方法間差の確認, 分析化学会第 74 年会 (2025 年 9 月, 北海道)

¹ 国立研究開発法人産業技術総合研究所 (AIST)

(2) 名古屋事業所

1) 渡部健人, 澤田諭, 前田純平, 近藤寛朗, 中西洋平¹, 竹中幹人¹, 柴田基樹², 藤波想², 宮崎司², 酸化亜鉛がカーボンブラック充填ゴムの熱劣化挙動に及ぼす影響, 第 36 回エラストマー討論会 (2025 年 12 月, 愛知)

¹ 京都大学化学研究所, ² 京都大学成長戦略本部

(3) 大阪米事業所

1) 米沢柚香, 樋下万純, 飯塚智則, 揮発性物質透過性試験における初期透過挙動評価方法の検討, 日本ゴム協会 2025 年年次大会 (2025 年 5 月, 東京)

2) 樋下万純, 仲山和海, 阿部高之, 瀬戸遼也, 前田洋祐, 武吉正博, 河合明雄¹, 柑橘精油 Bergamot oil の光安全性試験 ESR-PT における挙動の解析, 第 50 回日本微小循環学会総会・第 78 回日本酸化ストレス学会学術集会 (2025 年 5 月, 神奈川)

¹ 神奈川大学大学院理学研究科

3) 樋下万純, 仲山和海, 河合明雄¹, スピントラップ法による一重項酸素検出における競合反応の影響, Free Radical School 2025 (2025 年 8 月, 和歌山)

¹ 神奈川大学大学院理学研究科

(4) 久留米事業所

1) 久保田彰¹, 縄司奨, ゼブラフィッシュ胚を用いた内分泌かく乱作用マルチスクリーニング法の確立, 第 27 回日本内分泌攪乱物質学会研究発表会 (2025 年 12 月, 茨城)

¹ 帯広畜産大学獣医学研究部門

(5) 日田事業所

1) 騰川博之, 大久保貴史, 堀内一希, 山口卓男¹, 川上純司², 小比賀聡¹, PS 修飾を有する siRNA のアニーリングにおいて生じる不純物の解析, 日本核酸医薬学会第 10 回年会 (2025 年 7 月, 兵庫)

¹ 大阪大学大学院薬学研究科, ² 甲南大学フロンティアサイエンス学部 (FIRST)

(6) 安全性評価技術研究所

1) Akihiko Hirose, Asako Fukushima, Tae Hayashi, Takaaki Umamo¹, Takehiko Hayashi², Mariko Matsumoto¹, Comparison of the impact of Bayesian priors on BMDL calculations for continuous data dependent on toxicity endpoints, EUROTOX 2025 (2025 年 9 月, ギリシャ)

¹ National Institute of Health Sciences, ² National Institute for Environmental Studies

2) Tae Hayashi, Asako Fukushima, Akihiko Hirose, Threshold of toxicological concern (TTC) for E&L with less-than-lifetime exposure, EUROTOX 2025 (2025 年 9 月, ギリシャ)

3) 片桐律子, 福島麻子, 林多恵, 岩崎圭, 霜島雅明, 今井英志¹, 南田憲宏¹, 2 液混合スプレー製品使用時の吸入ばく露におけるリスク評価, 日本リスク学会第 38 回年次大会 (2025 年 11 月, 大阪)

¹ シヤチハタ株式会社

4) Asako Fukushima, Tae Hayashi, Setsu Nakae, Mariko Matsumoto¹, Takaaki Umano¹, Takehiko I. Hayashi², Akihiko Hirose, Considerations regarding the use of BMD software programs in model-averaged BMD calculations for continuous data., American College of Toxicology (ACT) 2025 Annual Meeting (2025 年 11 月, 米国)

¹ National Institute of Health Sciences, ² National Institute for Environmental Studies

5) Akihiko Hirose, Setsu Nakae, Aiko Tanabe, Asako Fukushima, Comparative Analysis of Endpoint-Specific Parameters of Posterior Distributions in Bayesian Benchmark Dose Analyses, SOT 65th Annual Meeting and ToxExpo (2026 年 3 月, 米国)

6) 中江撰, 赤堀有美, *in silico* ヒト代謝物予測のための代謝物反応ルールの改良, 日本薬学会第 146 年会 (2026 年 3 月, 大阪)

7) 堀口華代, 山田沙紀, 石田和也, 鈴木康之, 赤堀有美, 核酸医薬品のハイブリダイゼーション依存的オフターゲット効果の *in vitro* 解析におけるトランスフェクション方法の違いが与える影響, 日本薬学会第 146 年会 (2026 年 3 月, 大阪)

8) 広崎春佳, 武吉正博, 赤堀有美, 網羅的遺伝子発現解析に基づく抗体医薬品による Cytokine Release Syndrome の機序探索, 日本薬学会第 146 年会 (2026 年 3 月, 大阪)

お 問 合 せ 先

お問合せ先

◎研究発表

- 1) LLNA: BrdU-ELISA 法による GHS 皮膚感作性細区分基準の確立と国連 GHS 文書改訂に向けた取り組み

[日田事業所] 小林 俊夫
TEL. 0973-24-7211 FAX. 0973-23-9800
〒877-0061 大分県日田市石井町 3-822

- 2) LLNA をベースにした新規光アレルギー性試験法の開発と応用

[安全性評価技術研究所] 前田 洋祐
TEL. 0480-37-2601 FAX. 0480-37-2521
〒345-0043 埼玉県北葛飾郡杉戸町下高野 1600 番地

- 3) 海洋生分解性プラスチックの評価法の開発 (ムーンショット型研究開発プロジェクト)

[東京事業所 高分子技術部] 菊地 貴子
TEL. 0480-37-2601 FAX. 0480-37-2521
〒345-0043 埼玉県北葛飾郡杉戸町下高野 1600 番地

◎技術報告

- 1) 医薬品・医療機器の抽出物・溶出物 (E&L) 試験における化学的キャラクタリゼーションの最近の動向

[東京事業所 高分子技術部] 三輪 怜史
TEL. 0480-37-2601 FAX. 0480-37-2521
〒345-0043 埼玉県北葛飾郡杉戸町下高野 1600 番地

- 2) 分取 HPLC による有用成分の受託精製

[東京事業所 クロマト技術部] 坂牧 寛
TEL. 0480-37-2601 FAX. 0480-37-2521
〒345-0043 埼玉県北葛飾郡杉戸町下高野 1600 番地

- 3) GHS に基づく化学品の分類方法及び SDS・ラベル作成

—2025 年の JIS 改正を踏まえて—

[安全性評価技術研究所] 石井かおり
TEL. 03-5804-6136 FAX. 03-5804-6139
〒112-0004 東京都文京区後楽 1-4-25 日教販ビル 7F

お問合せ先

4) 底質環境における生態影響評価

[久留米事業所] 安達 竜太

TEL. 0942-34-1500 FAX. 0942-39-6804

〒839-0801 福岡県久留米市宮ノ陣三丁目 2 番 7 号

5) 希土類元素 (レアアース) 評価の信頼性を高める JCSS 希土類元素標準液の開発

[東京事業所 化学標準部] 沢田 貴史

TEL. 0480-37-2601 FAX. 0480-37-2521

〒345-0043 埼玉県北葛飾郡杉戸町下高野 1600 番地

6) PFAS 追加規制に対応した製品中 PFAS 含有分析

[東京事業所 環境技術部] 岩崎 圭

TEL. 0480-37-2601 FAX. 0480-37-2521

〒345-0043 埼玉県北葛飾郡杉戸町下高野 1600 番地

◎特別講演

最小二乗法による直線検量線の作成とそれを用いた定量分析値の不確かさ評価

[専務理事] 四角目和広

TEL. 03-5804-6132 FAX. 03-5804-6139

〒112-0004 東京都文京区後楽 1-4-25 日教販ビル 7F

メールによるお問合せ先

E-mail : hp_plan@ceri.jp

ホームページ <https://www.cerij.or.jp>

第31回 化学物質評価研究機構研究発表会講演要旨集
令和8年6月

一般財団法人化学物質評価研究機構

〒112-0004 東京都文京区後楽 1-4-25 日教販ビル7階

Tel. 03-5804-6132 Fax. 03-5804-6139

無断転載を禁止します。