

混合物 GHS 分類の NITE-Gmiccs への準拠について

これまで、2 成分以上の混合物の GHS 分類については、各成分の危険有害性が高い方の区分を採用していましたが、今回、GHS 混合物分類判定ラベル作成システム「NITE-Gmiccs」¹⁾に準拠するための修正を行いました。準拠対象の分類項目は、「可燃性ガス」「酸化性ガス」「引火性液体」「急性毒性」「皮膚腐食性／刺激性」「眼に対する重篤な損傷性／眼刺激性」「呼吸器感作性又は皮膚感作性」「生殖細胞変異原性」「発がん性」「生殖毒性」「特定標的臓器毒性（単回ばく露）」「特定標的臓器毒性（反復ばく露）」「誤えん有害性」「水生環境有害性 短期（急性）」「水生環境有害性 長期（慢性）」「オゾン層への有害性」です。

各分類項目の混合物区分判定は「NITE-Gmiccs 分類ロジック」²⁾を参照して頂くこととし、以下では、分類ロジックの改良点もしくは簡易化した点について述べます。

○引火性液体

混合物の引火点と初留点（沸点）については以下の手法で推算した値を使用しました。

1) 引火点の推算

混合物の引火点は Gaudin ら³⁾により検証された Liaw の混合則（式 1）⁴⁾を使って推算しました。

$$\sum_{i=1}^n \frac{x_i \gamma_i(x_i, T_{FP}) P_{sat,i}(T_{FP})}{P_{satFP,i}} = 1 \quad \dots (1)$$

ここで、 x_i は i 成分のモル分率、 T_{FP} は混合物の引火点、 $\gamma_i(x_i, T_{FP})$ は混合物の引火点における成分 i の活量係数、 $P_{sat,i}(T_{FP})$ は混合物の引火点における i 成分の蒸気圧、 $P_{satFP,i}$ は成分 i の単一成分での引火点における蒸気圧です。

活量係数 $\gamma_i(x_i, T_{FP})$ は UNIFAC グループ寄与法⁵⁾により見積もりました。蒸気圧は Antoine 定数⁶⁾を使って計算しました。

成分が液体以外であっても、引火点を持つ場合は計算に加えました。引火点を持たない成分、並びに最低の引火点を持つ成分の沸点よりも高い引火点を持つ成分については、最低の引火点を持つ成分の沸点を、前述の成分の引火点として代用しました。これは、最も引火性の高い（引火点が最も低い）成分の沸点を超えた温度では、その成分が全量気化して引火爆発の危険が発生することを考慮した、安全サイドの措置です。なお、成分同士の反応やハロゲン等の消炎作用などは考慮していません。

2) 沸点の推算

混合物の沸点は式 2 で算出される混合物蒸気圧が大気圧となる温度を使用しました。

$$P_{sat,mix} = \sum_i x_i \gamma_i P_{sat,i} \quad \dots (2)$$

○水生環境有害性 短期（急性）

LC50 または EC50 の情報がある成分については、栄養段階ごとの評価は行わず、3つの栄養段階の LC50 または EC50 のうち、もっとも小さい値（毒性が高い値）を採用しました。

○水生環境有害性 長期（慢性）

NOEC の情報がある成分については、栄養段階ごとの評価は行わず、3つの栄養段階の NOEC のうち、もっとも小さい値（毒性が高い値）を採用しました。また、加算式適用の際、急速分解性のある成分の NOEC については 0.1 を乗ずることで、毒性を 10 倍に見積もりました。これにより急速分解性有り(RD)に換算した混合物の NOEC が算出されるため、RD 成分の毒性乗率と合わせて、区分判定を行いました（※）。

※ この判定方法が NITE-Gmiccs に準拠していることを経済産業省に確認しました。その際、「事業者向け GHS 分類ガイダンス」の p.322 に掲載されている計算例にある「急速分解性がない成分に対して 0.1 の係数をかけて算出していることから、急速分解性がある場合の基準にてらして・・・」にも合致しているとの情報を頂きました（2022 年 3 月 2 日）。

○注意書きの絞り込みについて

ラベルの注意書き、すなわち「安全対策」「応急措置」「保管」「破棄」に記載する内容については、文献 7 の「【別紙】注意書きフレーズの絞り込みについて（210401 更新版）」に基づき、「レベル 1（最小限の注意書き）」「レベル 2」「レベル 3」「レベル 4（最大限の注意書き）」の順で注意書きの内容が多くなるようにしています。通常はレベル 2 を選択するようにして下さい。

参考文献

- 1) <https://www.ghs.nite.go.jp>
- 2) https://www.ghs.nite.go.jp/link/ja/gmiccs_ClassificationLogic.html
- 3) Gaudin T., Rotureau P., Fayet G., 2014, Combining mixing rules with QSPR models for pure chemicals to predict the flash points of binary organic liquid mixtures, Fire Safety Journal, 74, 61–70.
- 4) H.-J. Liaw, Y.-Y. Chiu, A general model for predicting the flash point of miscible mixtures, J. Hazard. Mater. A. 137 (2006) 38–46.
- 5) Essid abou hligha, Program to calculate Activity Coefficient γ mix by UNIFAC (UNIQUAC Functional-group Activity Coefficients) , Equation, Chemical Engineering, Chemical and Biological Engineering, Aspen Hysys, GAS CHEMICAL

ENGINEERING

- 6) C.L. Yaws, K. Narasimhan Prasad, Gabbula, Chaitanya, Yaws' Handbook of Antoine Coefficients for Vapor Pressure, 2nd Electronic Edition, Knovel, 2009.
- 7) 【別紙】注意書きフレーズの絞り込みについて (210401 更新版)
https://www.ghs.nite.go.jp/link/ja/contents/gmiccs_precautions_20210401.pdf