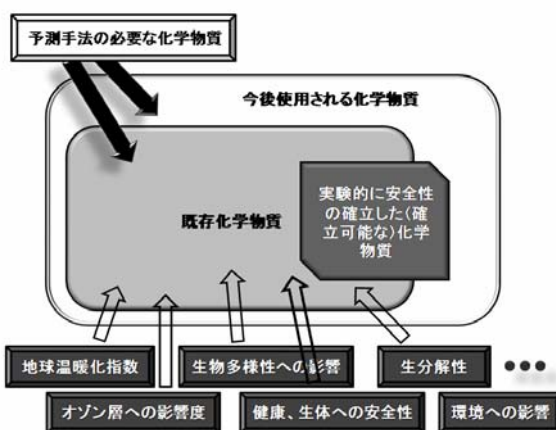


ディビジョン番号	18
ディビジョン名	環境・安全化学・グリーンケミストリー・サステイナブルテクノロジー

大項目	5. 安全・教育・リスク管理
中項目	5-2. リスク管理
小項目	5-2-3. リスク管理に必要なハザードデータ整備のための予測手法

概要（200字以内）

現在、日本では3万種弱の化学物質が用いられているが、生体への安全性、環境への影響の評価が確立しているものは多くなく、リスク管理に当たっては、安全性の in Silico 評価を利用することが不可欠である。現在までに幾つかのプロジェクトによって安全性予測の試みが行われており、一定の成果を得ている。今後、更に多様な側面からの安全性評価予測法の開発だけでなく、精度の向上、予測可能な化学物質の範囲の拡大などが期待される。

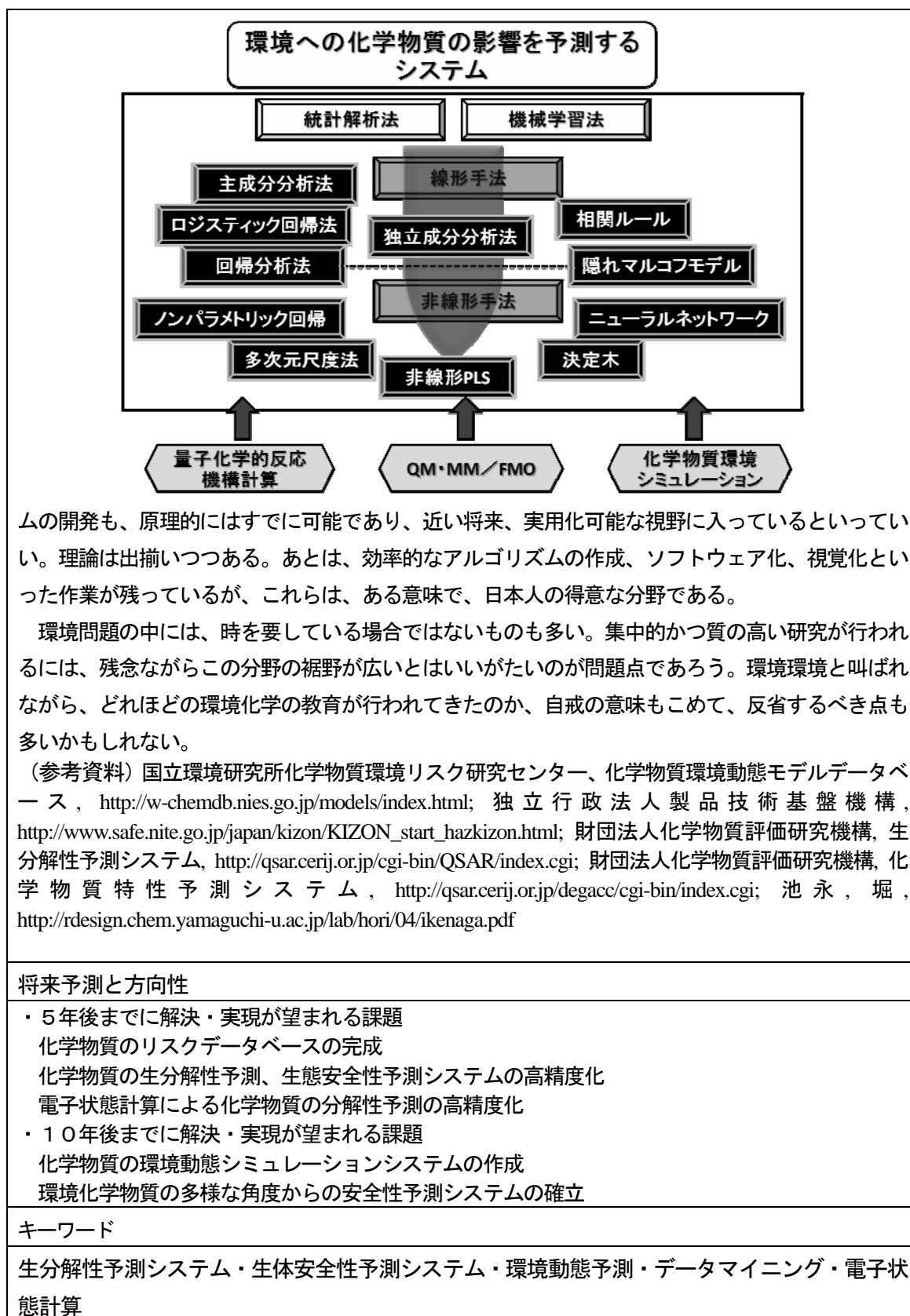


現状と最前線

環境、生体への化学物質の安全性の確立には、多様な方面からの評価が必要となる。例えば、環境への影響を考える場合には、化学物質の生分解性が重要なカギとなるし、揮発性の場合には、温暖化効果指数、オゾン層へ与える影響、生物濃縮指数などの検討が必要であり、生物への影響を考える場合には、生物安全性、生態系への影響度、変異原性などが検討されなければならない。そして不幸なことに、これらの値の間の相関性は高くない。また、実測が容易なものもあれば、そうでないものもあり、それぞれのケースで、独自に、予測システムを構築する必要がある。

既に、化学物質評価管理機構や、国立環境研究所などの努力で、化学物質の生分解性、生体安全性、生物濃縮指数などは多く実測されたり、データベース化されたりしており、予測システムに関して、Web 上で公開されているものもある。しかしながら、予測性システムの必要な環境への影響性は他にも多く、少なくとも次の decade 内には、一定の精度を持った、多様な影響度を扱える予測システムの開発が望まれている。従来は、主として物理化学的物性や2次元化学構造と環境への影響度との相関性の解析が試みられてきたが、(1) これだけの特性で、多岐にわたる環境へのリスクファクターを予測できるとは考えにくいというのに、(2) 新規化学物質にも容易に適用可能なように、その特性が選ばれる理由が明らかであるほうがより好ましい。従って、今後は、化合物の立体構造に基づく特性や、電子状態に関連する特性を用いた予測システムが期待されている。すでに現在、環境中における化学物質の加水分解に関しては、研究が続行中である。

また、さらに将来、環境中での化学物質の動態そのものをシミュレーションできるようなシステ



(執筆者: 高木 達也)