

生態影響に関する化学物質審査規制／試験法セミナー

# 生態毒性QSARモデル「KATE」の 概要とWeb版の公開

－ QSAR開発の経緯と今後の進め方 －

戸田英作

環境省化学物質審査室長

# (Q)SARとは

(Quantitative) Structure-Activity Relationship

「(定量的)構造活性相関」

- 化学物質の構造と性状(有害性)の関係を基に性状を予測するもの。
- 広義には、定性的な対応も含む(例:特定の官能基の有無から物質の有害性の多寡を推測する)。
- より狭義には、構造を手がかりに有害性(毒性値)等を定量的に算出する仕組み(いわゆる「QSARモデル」)。

# QSARモデルの種類

- 物理化学性状

- 分解性 モデルの例: BIOWIN (USEPA)、CERIモデル試用版 (CERI)、CATABOL (Bourgas Univ.)
- 蓄積性 モデルの例: BCFWIN (USEPA)、CERIモデル試用版 (CERI)、Baseline Model (Bourgas Univ.)

- 人健康影響

- 遺伝毒性、変異原性、発がん性、感作性など  
モデルの例: Derek (Lhasa Ltd.)、MULTICASE (Multicase Inc.)、ADMEWORKS(富士通九州システムエンジニアリング)

# 主な生態毒性QSARモデル

## 政府で開発されたもの

1. ECOSAR (USEPA): 急性・慢性毒性

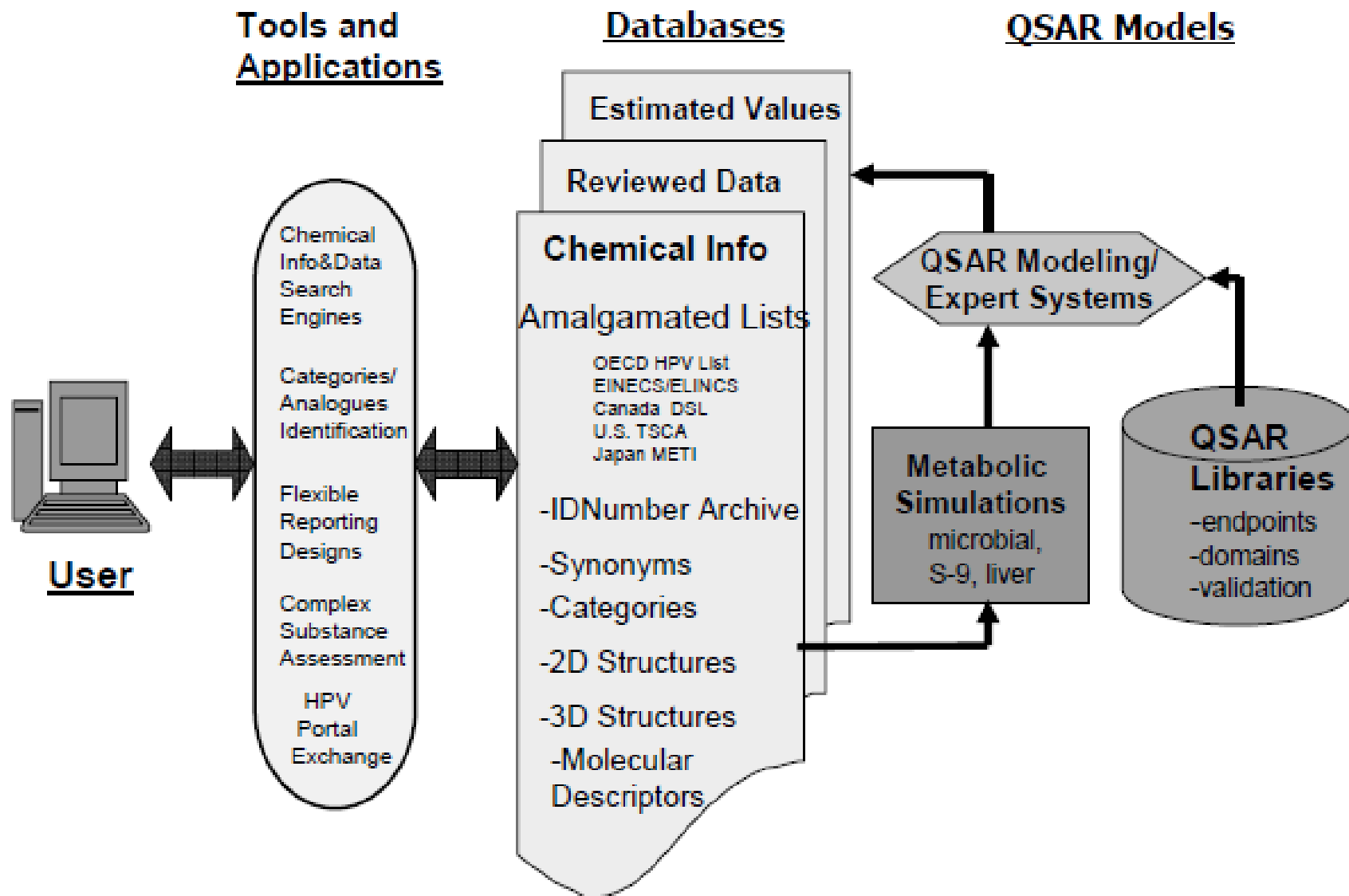
## 民間・研究機関のモデル

2. TOPKAT (Health Design Inc. & Oxford Molecular Group, Inc.):  
魚(ファットヘッドミノー)及びミジンコの急性毒性
3. MULTICASE (Multicase Inc.):  
魚(ファットヘッドミノー、グッピー)の急性毒性
4. TIMES (Bourgas大学): 急性毒性

# OECD(経済協力開発機構)における取組

## QSARツールボックスの開発を実施中

- QSARモデル、化学物質データベース及び規制情報を含むデータベース
- OECDウェブサイト等からフリーにアクセスでき、様々なQSARモデルを用いた各種エンドポイントの推定を可能とする。
- 2008年上半期までにプロトタイプの公開を目指す(現在はベータ版を加盟国の専門家がチェック中)



出典: OECD/QSARプロジェクトウェブサイト ([http://www.oecd.org/LongAbstract/0,3425,en\\_2649\\_201185\\_37850115\\_1\\_1\\_1\\_1,00.html](http://www.oecd.org/LongAbstract/0,3425,en_2649_201185_37850115_1_1_1_1,00.html))

# 諸外国におけるQSARの活用状況

国・地域名	新規化学物質審査への活用	既存化学物質対策への活用
アメリカ	TSCA(有害化学物質規制法)に基づく事前審査における届出試験データの補完に活用	既存化学物質のスクリーニング(優先順位付け)
カナダ	適切な場合は試験データの代用にできる	すべての既存化学物質のカテゴライゼーションに当たり活用
欧州連合(EU)	REACHでは、特に低生産量の化学物質に積極的に活用。また、カテゴリー評価の支援ツールとして、Toxmatchを開発し、スタンドアローン版を無償配布。 <a href="http://ecb.jrc.it/qsar/qsar-tools/index.php?c=TOXMATCH">http://ecb.jrc.it/qsar/qsar-tools/index.php?c=TOXMATCH</a>	

# 我が国におけるQSARの開発状況

## <分解性・蓄積性> 化学物質特性予測システム

- NEDOプロジェクトとして、(財)化学物質評価研究機構 (CERI) が開発。現在は、Web上で試用版を公開中。

→ <http://qsar.cerij.or.jp/cgi-bin/QSAR/index.cgi>

## <人健康影響>

- 海外では、変異原性 (Ames) 試験等についてのQSARが開発・活用されているが、日本国内では政府主導によるQSARは公表されていない。



# 「KATE」のWeb試用版の公開に当たって

- 環境省では、平成16年度から国立環境研究所 (NIES) とともに生態毒性QSARモデルの開発に着手
- 参照データは、環境省が実施したミジンコ(346物質) 及びメダカ(272物質)の急性毒性試験及びUSEPAのファットヘッドミノール・データベース(580物質)
- 近日中に、NIESのWeb上に試用版(ミジンコ・魚類の急性のみ)を公開予定
  - 自由にアクセスして試用が可能
- モデルの質の向上のためには新規化学物質の届出データの活用も検討(届出事業者の任意の協力)