

カテゴリーアプローチ

# NITEがⅢ、Ⅴ定義

## 生物濃縮性予測可能に

製品評価技術基盤機構 (NITE) 化学物質管理センターは、カテゴリーアプローチによる化学物質による生物濃縮性予測手法に関する報告書をホームページで公表し、Ⅱ-A、Ⅱ-Bを含め、

た。カルボン酸、エステルなど、カテゴリーⅢおよびⅤに該当する化学物質の定義と予測手法を取りまとめた。これまでに公表したカテゴリーⅠ、Ⅱ-A、Ⅱ-Bを含め、無機金属化合物と高分子化合物を除く約95%の既存化学物質の生物濃縮性を評価することが可能になった。カテゴリーアプローチは、有害性が知られていない化学物質の分子構造の持つ特徴からグループ分け(カテゴリー化)を行い、未試験物質の有害性を予測する手法。NITEは、化学物質の食物連鎖による人体への蓄積を考慮するうえで重要な生物濃縮性予測について検討を行っている。7つのカテゴリーのうち、ⅢとⅤについて報告書を取りまとめ公表した。カルボン酸、スルホン酸、4級アミンなどのイオン性の官能基を持つ物質を、カテゴリーⅢ「イオン性官能基によるイオン性相互作用が受動拡散に影響を与える化学物質群」として定義。また、パーフルオロ酸以外の未試験化学物質は、経験則を用いた定性的な生物濃縮性予測、Readiacross(類推)を用いた生物濃縮性予測の2つの手法で予測できると結論付けた。カテゴリーⅤ「生体内での代謝によって排出され易く生体内に濃縮されにくいことが知られている化学物質群」と定義したのは、エステル、リン酸エステル、アミド化合物など生体内で代謝されやすい官能基を持つ化学物質。未試験物質は、logpow(化学物質の疎水性を示す値)を記述子とした予測式を用いた

予測、Readiacrossを用いた予測の2手法で予測できる。