

(事後評価)

化学物質安全特性予測基盤の確立に関する研究

(研究期間：第 期 平成 12 ~ 13 年度)

研究代表者： 河村 光隆 (独立行政法人産業技術総合研究所)

(研究代表者は定年退職により、平成 14 年 4 月 1 日以降、工学院大学に所属)

研究課題の概要

本課題では、人や生物、環境に対する化学物質の安全性確保に関する知的基盤の整備に資するため、化学物質の安全特性である生体有害性、環境有害性、爆発危険性の評価・予測手法において基盤となる実験科学的及び計算科学的技術の開発を行った。具体的には、生体内化学物質の高感度な状態計測技術、生体内化学物質挙動の解析手段、環境計測技術、環境内化学物質の挙動評価法、高速爆発燃焼反応の計測技術開発を行い、同時に、化学構造の物性等の基本的データから、化学物質の安全特性を予測する手法開発を目的とした。第 期においては第 期に開発した手法の適用性の検討と、適用範囲の拡大検討を行った。

(1) 総評

化学物質の安全性に対する評価は重要であり、通常これを行うためには長い期間と莫大な費用を要する。それ故、時間的経済的コストの低減可能な安全予測ツールの開発という目的設定は意義深い。有害物質の分析法の確立や標準物質の確立には一定の成果が得られており、化学物質安全についての貴重なデータを得ている。しかしながら、後に述べるように、構造活性相関による予測ツールの実用性には疑問が残る。また、網羅的な研究グループを作っているが、全体として連携・整合性が見られないことから、研究体制に問題があるように感じる。更に、このような成果を一般に広く普及するためには、国際的な連携により評価法のネットワークを構築して、世界で利用できるシステムにまで遂行する必要があると考えられる。

< 総合評価： b >

(2) 各テーマにおける評価結果

化学物質生体有害性予測手法に関する研究

計測技術開発においては生体内に取り込まれた有害金属元素、特に生体内での毒性が注目されているアルミニウムについて、キレート試薬を用いた簡便かつ高感度な組織内分布計測法を確立した。実験科学的評価手法については、遺伝子改変動物及び培養細胞による試験系の基礎の確立を行った。計算機科学的予測手法開発では化学物質の発ガン性予測に焦点を絞り、第 期においては、I 期で開発した化学構造の違いをニューラルネットワークで解析するシステムのプロトタイプの予測性能向上をはかるとともに、システムに組上げインターネットなどを通し一般の使用に供した。しかしながら、構造活性相関による予測ツールの実用性、つまり有害性未知物質の有害性評価方法としての実用性には疑問があり、これが機能するためには更に多くの有害性に関するデータの蓄積が必要と思われる。また、ここで使われた予測的中率の定義が不明瞭であった。

