

平成 25 年度の構造活性相関推計の概要

平成 26 年度以降の試験物質を選定する際の参考とするため、委託事業により、構造活性相関に関するモデルによる変異原性の推計相関を行った。

厚生労働省から委託先に計 979 物質を提示し、このうち構造式情報の入手が可能な 763 物質について、入力用データを作成して推計相関を行った。

また、その結果とともに化学物質の製造・輸入量、融点、沸点、蒸気圧等の物性データの情報を含めてリストを作成した。それぞれの情報の出典等は以下のとおりである。

○厚生労働省から提示した物質の内訳

平成 23 年度の医薬食品局委託事業において有害性について文献調査を行った物質のうち、発がん性情報、遺伝毒性情報のいずれもなかった物質	962 物質
平成 25 年度遺伝毒性評価 WG において、既存のエームス試験結果がないため、構造活性相関による推計が必要とされた物質	17 物質
計	979 物質

※計 979 物質のうち、構造式情報の入手可能な 763 物質について推計を実施

○結果の判定

構造活性相関の結果の判定は、Derek Nexus、ADMEWORKS、CaseUltra それぞれを用いて推計相関を行い、3 手法による予測結果（「+」又は「-」）のうち多数のものを最終的判定とした。

ただし、「予測不能」がある等により「+」と「-」が同数の場合は、「+」を最終的判定（総合判定）とした。

○総合判定のまとめ

総合判定	物質数
+	39 物質
-	592 物質
予測不能（3 つとも予測不能）、又は、- *（2 つが予測不能で 1 つが-）	132 物質
計	763 物質

※一部の物質については、予測の際に入力ミスがあったことが判明したため、26 年度に再計算を実施する予定。

○関係情報の入手方法等

生産量等

「16313 の化学商品」（化学工業日報社）に記載の 2011 年生産量（輸入量、輸出量の場合もあり）、及び経済産業省の「一般化学物質等の製造・輸入数量（23 年度実績）について」によった。

但し経済産業省発表の数値は化審法の官報公示整理番号により複数の化学物質をまとめて集計されている場合もあるため、この場合は官報公示名称を備考欄に記載したが、広範な物質分がまとめて集計されている場合は記載を行わなかった。

物性データ（融点、沸点、蒸気圧、性状等）

「化学物質総合情報提供システム」（（独）製品評価技術基盤機構）、「16313 の化学商品」（化学工業日報社）によった。これらの情報で物性が判明しない場合は、インターネット上の検索サイトにて CAS 番号により検索を行った。

- ・ 試薬メーカー（東京化成、和光純薬、Sigma-Aldrich）の SDS
- ・ ICSC（国際化学物質安全性カード：International Chemical Safety Cards）
- ・ HSDB（Hazardous Substances Data Bank）
- ・ 製造、取扱業者のサイト情報

等を優先し、それでも情報が得られない場合には、化学品取扱い業者紹介サイト（lookchem, guidechem, chemnet 等、及びここからリンクされているメーカーサイト）より情報を収集した。

これらの情報については採用した情報源を付記した。

また、総合判定が「+」の物質については、厚生労働省にて、「化学物質総合情報提供システム」（（独）製品評価技術基盤機構）により、用途を確認した。