

評価Ⅱ以降における解離性物質のリスク評価に関する検討について

1. 解離性物質の評価手法の検討背景

有機物質のイオン化は、物質の環境中動態と有害性に影響を与える (ECHA, 2008)。また、どのような存在形態がヒトや生態への暴露シナリオにおいてワーストケースとなりうるかは定かではない (Franco et al., 2010)。現在、「化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス」に示している手法は、非解離種を念頭に、開発されたものであるため、NITE では、解離性物質のように環境中でイオン種としても存在しうる物質の評価Ⅱ以降における排出量と暴露量の推計手法を検討している。

2. 検討中の解離性物質の評価手法の内容 (詳細は調整中)

Simple Box Ver. 4.0 にも導入されている Franco and Trapp (2010) の考え方を参考に、図 1 のように、解離性物質 (非解離種+イオン種) の環境中動態を考慮することができる数式を導入する。

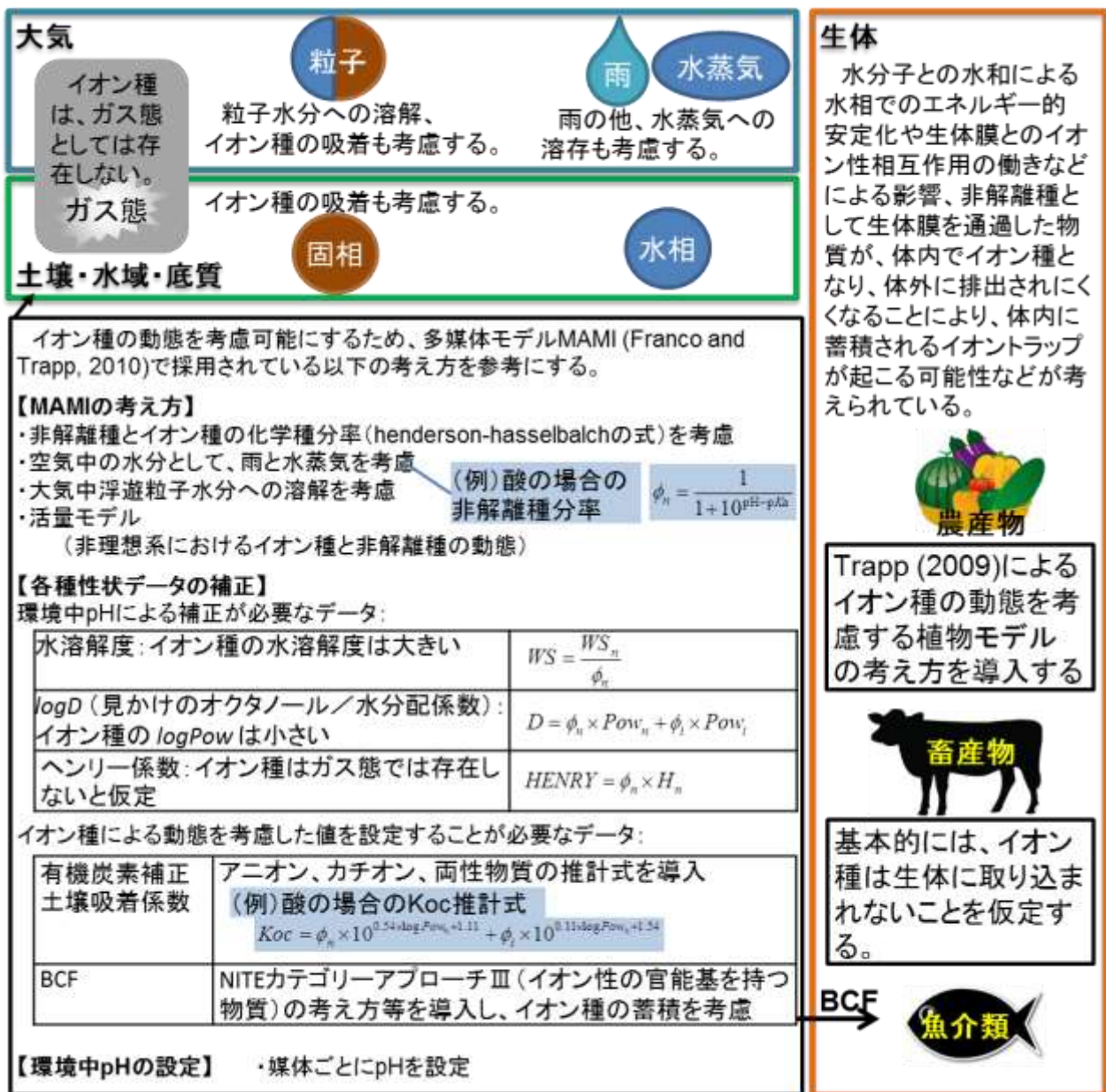


図 1 解離性物質の環境中動態とその濃度推計手法の概要 (調整中)

出典：

- ECHA (2008) Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment, Chapter R.16: Environmental Exposure Estimation: p.36.
- Franco, A., Ferranti, A., Davidsen, C. and Trapp, S. (2010) An Unexpected Challenge: Ionizable Compounds in the REACH Chemical Space, *Int. J. Life Cycle Assess.*, 15:321-325.
- Franco, A. and Trapp, S. (2010) A Multimedia Activity Model for Ionizable Compounds: Validation Study with 2,4-Dichlorophenoxyacetic Acid, Aniline and Trimethoprim.
- NITE (2012) カテゴリーアプローチによる生物濃縮性予測に関する報告書(カテゴリーⅢ), http://www.nite.go.jp/chem/qsar/category_approach.html
- Trapp, S. (2009) Bioaccumulation of Polar and Ionizable Compounds in Plants. In: Devillers J (ed) *Ecotoxicology Modeling*, Springer:299-353.