

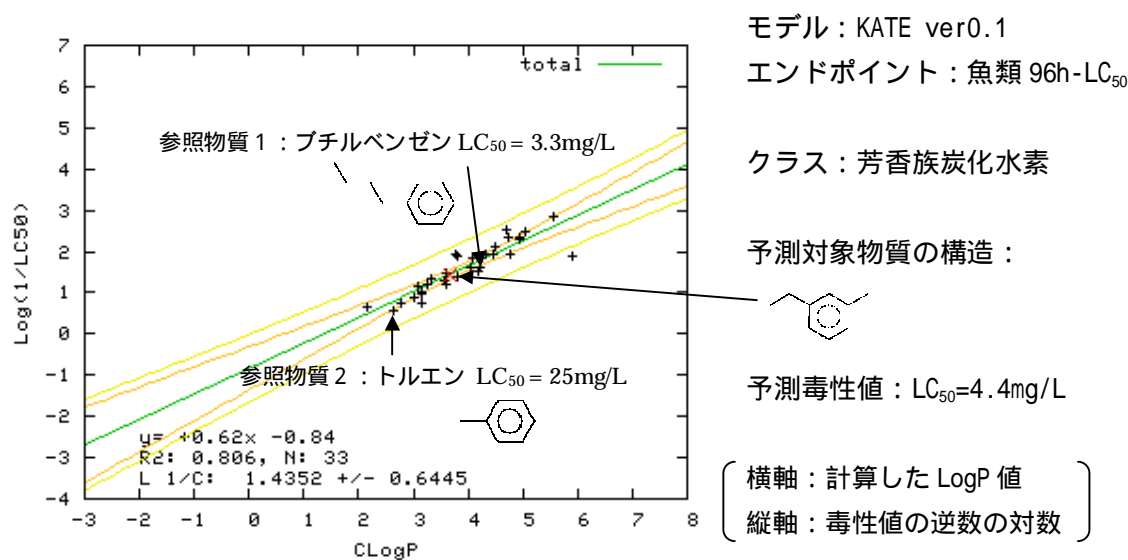
Q S A R 及び カテゴリーアプローチについて

1. Q S A R とは

化学物質の構造上の特徴又は物理化学定数と生物学的活性（毒性等）の相関関係を構造活性相関（S A R : Structure-Activity Relationship）といい、定量的なものを定量的構造活性相関（Q S A R : Quantitative Structure-Activity Relationship）という。両者を併せて（Q）S A R と記載することもある。

構造活性相関は、例えば、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ことを指し、構造を手掛かりに毒性等を定量的に算出する仕組みをいわゆる「Q S A R モデル」と呼ぶ。

Q S A R の具体的な応用例として、国立環境研究所と大分大学が開発した生態毒性を予測する Q S A R モデル「K A T E」(<http://kate.nies.go.jp>) による予測結果を示す。



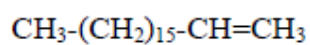
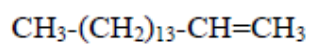
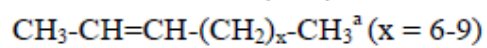
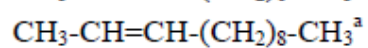
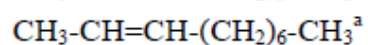
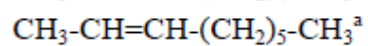
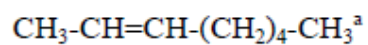
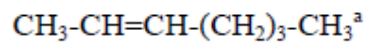
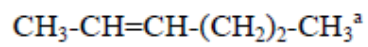
2. カテゴリーアプローチとは

化学物質のカテゴリーとは、構造的類似性のため、物理化学的及び毒性学的性質が類似しているか規則的なパターンに従うと考えられる化学物質のグループである。カテゴリーを用いたアプローチにおいては、一つ一つの化学物質をすべてのエンドポイントについて試験実施するのではなく、カテゴリー内の化学物質の一部について既に得られている試験結果を用いて、他の化学物質において未実施の試験結果を推測する¹。

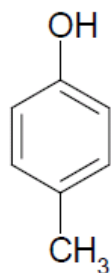
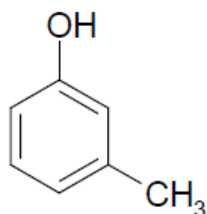
カテゴリーアプローチは、O E C D 高生産量プログラムや E U 既存物質プログラム等において活用されている。O E C D 高生産量プログラムにおける具体的なカテゴリー事例を以下に示す。

¹ O E C D 高生産量プログラムマニュアル及び化学物質グルーピングガイダンスを参考に記載した。

高級オレフィンカテゴリー



M / P-クレゾールカテゴリー



メンソールカテゴリー

