

(Q)SAR等による 毒性予測ならCERI

(定量的)構造活性相関(以下(Q)SAR)やRead across等による予測を用いた評価により、試験によらず、毒性評価が可能なケースがあります。



目的に応じて適した予測法をご提案

経験豊かな化学・毒性学の専門家(日本毒性学会認定トキシコロジスト等)による予測データの解釈と評価

(Q)SAR: Quantitative Structure-Activity Relationships, (定量的)構造活性相関



一般財団法人 化学物質評価研究機構
Chemicals Evaluation and Research Institute, Japan

CERI

Q検索

化学物質の毒性を予測する方法

(Q)SAR

構造的に類似した物質の既知の毒性に基づいて、評価対象物質の毒性を予測します。

知識ベース	統計ベース
Derek Nexus*	CASE Ultra (GT1 BMUT)*
CASE Ultra (GT EXPERT)	Sarah Nexus

*ICH M7対応において最も汎用されているツールの組み合わせ

Read across

類似性のある物質のデータを用いて、評価対象物質の毒性等のエンドポイントのデータギャップの穴埋めを行う方法です。Read-acrossは(Q)SARが適用できないエンドポイントや物質群に対して有効な方法です。

CERIの毒性予測の特徴

● スクリーニング評価による優先順位付け

企業における自主管理として、社内では取扱う化学物質について予測によるスクリーニング評価を行い、試験実施や代替物質検討の優先順位付け等ができます。

● 毒性試験の実施が困難な物質（化粧品開発等）の評価

規制により動物試験が実施できない化粧品や単離精製が難しいために試験が実施できない成分などの毒性予測を実施します。分析技術の向上とともにこれまで知見のなかった不純物が製品中から検出される事例も多くなっており、リスク管理を行う上でも評価の実施が重要です。

● 農薬等の代謝物の毒性予測

欧州食品安全機関 (EFSA) の農薬中不純物の評価ガイダンス*において推奨されている農薬代謝物の遺伝毒性評価 (2種類の(Q)SAR) を用いた評価を行います。

* Guidance on the establishment of the residue definition for dietary risk assessment

● 医薬品中不純物の変異原性評価

医薬品中の不純物の遺伝毒性に関する国際的なガイドラインICH-M7ガイドライン**に対応して、(Q)SARを用いた予測等を行います。

** 「潜在的発がんリスクを低減するための医薬品中DNA反応性(変異原性)不純物の評価及び管理ガイドライン

● (Q)SARやRead acrossによる許容量等の設定

対象物質の毒性データがない場合でも、(Q)SARやRead-acrossにより許容量設定を行える場合があります。

CERI 一般財団法人 化学物質評価研究機構
Chemicals Evaluation and Research Institute, Japan

お問合せ先

安全性評価技術研究所

〒112-0004 東京都文京区後楽1-4-25 日教販ビル7F

TEL 03(5804)6136 FAX 03(5804)6149

e-mail cac-reach@ceri.jp

URL <https://www.cerij.or.jp>

ホームページも
ご参照ください



ICH M7