

難燃剤ヘキサブロモシクロドデカン (HBCD) の物質代替におけるリスク比較

Comparative risk assessment between flame retardants, hexabromocyclododecane and its substitutes

横浜国立大学 大学院環境情報研究院・学府 益永茂樹、○小谷健輔、小林剛、三宅淳巳、本藤祐樹
武蔵野大学 環境学部 真名垣聡

1. はじめに

使用中の化学物質について毒性が指摘された場合、しばしば予防的な代替物質や代替製品への移行が起こる。しかしその際、代替によってリスクが低減するか否かが事前評価されることは稀である。特に有害性情報の少ない物質への代替の場合、リスクの増大やトレードオフの発生が懸念される。本研究では 2013 年 5 月にストックホルム条約の附属書 A (廃絶) に追加が決まったばかりの臭素系難燃剤ヘキサブロモシクロドデカン (HBCD) とその繊維用途におけるモデル代替物質 (有機リン系難燃剤) を事例として、「マテリアルフローと環境排出量の把握に基づく HBCD と代替物質の曝露評価」、および「定量的構造活性相関 (QSAR) に基づく代替物質の有害性予測」の二つの手法に基づき、HBCD とその代替物質のリスクトレードオフについて予測評価を試みた。

2. 方法

2.1 シナリオ作成と曝露評価

評価シナリオとして、HBCD が継続使用されるシナリオと使用禁止になり代替物質が導入されるシナリオを仮定した。モデル代替物質としては HBCD が使用禁止となる繊維用途としてリン系難燃剤のアニリノジフェニルホスフェート (ADPP) と 10-ベンジル-9,10-ジヒドロ-9-オキサ-10-ホスファフェナンスレン-10-オキサイド (BCA) を選択した。モデル代替物質の選定方法とマテリアルフロー解析に基づく動的な環境排出と曝露評価の詳細については真名垣ら (2012) を参照されたい。

2.2 代替物質の有害性評価

HBCD は毒性情報が複数存在するが、代替物質については現在のところ毒性情報は確認できない。そこで、代替物質や類似の分子構造を有する物質からリスク評価にふさわしいエンドポイント (副腎影響) を選定し、それと同種の毒性を持つ化合物群の毒性情報を収集して QSAR 解析のデータセットを作成した。QSAR 解析のための構造パラメータの計算は量子化学計算ソフト Gaussian 03 (Gaussian, Inc.) および分子記述子計算ソフト Codessa (SemiChem, Inc.) を用いた。QSAR モデルは Partial Least Squares (PLS) 回帰に基づいて作成した。開発したモデルに代替物質の構造パラメータを入力し、毒性値を予測した。

3. 結果

2.1 と 2.2 の結果を合わせて各シナリオの健康リスクの経年変化を評価した。ADPP と BCA の NOAEL はそれぞれ 51.4 と 32.4 mg/kg/day (95%予測下限値は 1.22

と 0.77 mg/kg/day) であった。継続使用シナリオの HBCD のリスクよりも、使用禁止シナリオの下での HBCD の残留リスク (ストックからの寄与) と代替物質のリスクの総リスクの方が小さいと予測された (図 1)。

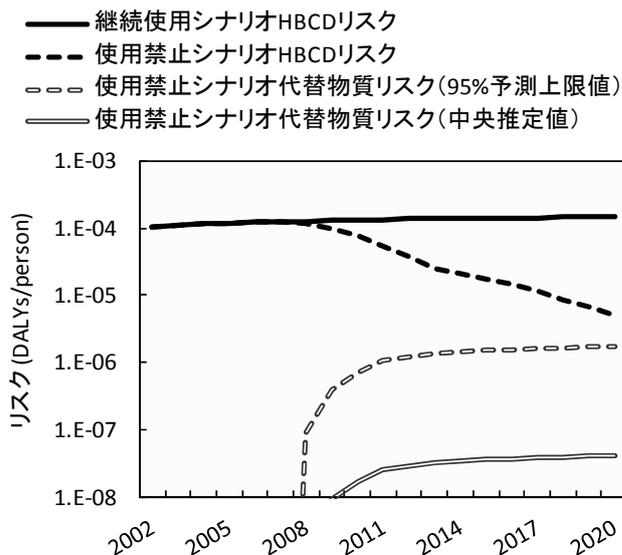


図 1 HBCD と代替物質の健康リスクの経年変化

4. 議論

POPs の附属書 A に追加され使用禁止となる繊維用途について HBCD とその代替物質のリスクトレードオフ解析を行った。毒性が未知の代替物質を対象としたリスクトレードオフ解析例は他に存在せず、新しい研究例となる。使用禁止シナリオのリスクは QSAR の精度に依存するが、本研究の対象エンドポイントでは予測精度の高い QSAR モデルの作成は困難であった。しかし、予測区間も合わせて推定し、安全側の推定値を用いてもリスク比較結果に影響しないことを確かめることができたので、QSAR モデルの不確実性は許容範囲内であると見なすことができた。このように、リスク比較では毒性予測モデルが高精度で開発できなくても、結論を導ける場合が存在する。本研究では、毒性情報のない代替物質の導入の妥当性を、曝露予測と QSAR に基づく毒性予測手法を利用することによって事前評価できること示した。

謝辞: 本研究の一部は環境研究総合推進費(C-1003)の支援により実施されました。

参考文献

真名垣ら (2012) 日本リスク研究学会第 25 回年次大会講演論文集, 292-296.

キーワード: 代替物質、リスク比較、QSAR、難燃剤