化学物質リスク情報の統合と利用

Integration and utilization of risk information of chemical substances

船津 公人¹

FUNATSU Kimito¹

1 東京大学大学院 工学系研究科化学システム工学専攻 (〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1) Tel: 03-5841-7751 E-mail: funatsu@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp

1 Department of Chemical System Engineering, School of Engineering, The University of Tokyo (7-3-1 Hongo Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656)

原稿受理 (2015-01-23)

情報管理. 2015, vol. 58, no. 1, p. 12-19. doi: <http://dx.doi.org/10.1241/johokanri.58.12>

著者抄録

世の中には多くの化学物質が溢れ, 流通している。その動きを把握し, 環境および健康への影響を監視する法律(化管法)が施行されて十数年が経とうとしている。その法律の柱である PRTR 制度および SDS 制度について解説するとともに, 化学物質リスク情報を総合的に取り扱い, 化管法を情報の統合の観点からとらえ, その実態として科学技術振興機構で運用・提供されている化学物質リンクセンターとその中心辞書である日本化学物質辞書(日化辞)について触れる。

キーワード

PRTR, SDS, 化学物質リンクセンター, データ・シェアリング, 日本化学物質辞書, 日化辞

1. はじめに

プラスチック, 合成繊維, 医薬品, 農薬, 洗剤, 塗料, ハイテク材料。私たちの日常の豊かで便利な生活は, 化学物質を原材料にした多くの製品によって支えられている。化学物質は製品の中に含まれているだけではなく, 製品が生産され, 使用され, 廃棄される間に, 大気, 水, 土壌などの環境中に排出されていく。環境中に出た化学物質は, 川や海の底質(水底を構成している表層の土砂やヘドロなど)に蓄積したり, 食物連鎖を通して生物体内に濃縮されたりする。環境中の化学物質は, 呼吸や飲料水, 食品などの摂取を通して人間の体内に入る。化学物質の中には有害

な性質(たとえば, 発がん性, 奇形や生殖機能異常誘因性)をもつものも少なくなく, このような物質が, 環境に排出され, 環境中の経路を通して人の健康や生態系に有害な影響を及ぼす可能性のことを, 環境リスクと呼んでいる。

従来, 環境リスクの大きな化学物質については法律により規制を行ってきた。たとえば, 製造・使用に関する法律としては, 「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律」がある。また, 排出・廃棄に関する法律としては, 「大気汚染防止法」「水質汚濁防止法」「廃棄物の処理及び清掃に関する法律」がある。

しかしながら, 個々の物質のリスク評価と並行して, 多くの物質の環境リスクを全体としてできるだ

け低減させることが重要なというまでもない。このような考え方のもと、化学物質対策の現状への課題と新たな取り組みの必要性が認識され、事業所および一般市民由来の化学物質の環境への排出のありように注意が向けられるようになってきた。これを受けて、化学物質の環境リスク削減には、行政だけではなく、事業所、市民の立場から取り組む必要があるとの考えが芽生え、NGOが市民を代表して行政や事業者に対してリスク削減の働き掛けが行われるようになってきた。多くの化学物質がもつ環境リスクを全体として低減させていくためには、行政、事業者、市民、NGOの各主体がそれぞれの立場から協力して、環境リスクをもつ化学物質の排出削減に取り組んでいく必要がある。

しかし、具体的な活動を進めるには、どのような物質が、どこから出て、どこへ行っているのか、その量はどのくらいなのか、という基本情報を関係者間で共有することが不可欠となる。また、それぞれの活動および対策の効果を確認するには、化学物質の排出、移動などの状況を定期的に追跡し、評価する必要もある。これらを可能にする新しい化学物質管理手法がPRTR制度（Pollutant Release and Transfer Register）である。

PRTR制度の基本は、有害性のある化学物質が、どのような発生源からどれくらい環境中に排出されたか、あるいは廃棄物に含まれて事業所の外に運び出されたかというデータを把握し、集計し、公表する仕組みである。事業者は行政機関に年に1回集計結果を届け出なければならず、行政機関は、そのデータを整理集計するとともに、家庭や農地、自動車などから排出される対象化学物質の量を推計し、2つのデータを公表しなければならない。

このPRTR制度によって、毎年対象化学物質がどの発生源からどれだけ排出されているかをそれぞれの立場にある者の間で把握できるようになる。PRTR制度は、1999年7月、「特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律」（略

名「化学物質排出把握管理促進法」）の成立によって、2001年4月に運用が始められた。

2. PRTR制度ができた経緯

話が前後するが、このようなPRTR制度が成立するまでの経緯について少し述べてみたい。現在米国には有害化学物質排出目録制度（TRI制度、Toxics Release Inventory: TRI）があるが、これが制定された背景には以下のような事故が関係している。1984年、インド・ボパールの化学工場（米国企業）事故でメチルイソシアネートが大気へ放出され、その結果、死者2,000人以上を出す惨事となった。1985年、同企業が米国内で同じ事故を起こしたこともあり、1986年、米国で緊急計画および市民の知る権利条例のもとに、「有害化学物質排出目録（TRI）」制度が実施された。これが最初の本格的PRTR制度とされている（しかしながら、これに先立つ1974年、オランダでは国として環境問題に取り組んでいた背景もあり、排出目録制度が施行されている）。

1992年、リオデジャネイロで国際連合環境開発会議（地球サミット）が開催された。この会議では、行動計画「アジェンダ21」が議論され、1) 化学物質のリスクについて広く認識することが化学物質の安全性の確保に欠かせない、2) PRTR制度を情報の伝達・交換を通じた化学物質の管理の方法、あるいは化学物質のライフサイクル全体を視野に入れたリスク削減の手法と位置づける、3) 政府は国際機関および産業界と協力してこのような仕組みを充実させるべきである、との認識が共有された。

これに基づいて地球サミットで採択された「リオ宣言」が、その後の国際的なPRTR制度普及の思想的礎となった。要点は以下の2点である。1) 個人が有害物質の情報を含め、国などがもつ環境に関連した情報を入手して、意思決定プロセスに参加できないといけない。2) 国も情報を広く利用できるようにしなければならない。

これらはまさに現在のPRTR制度の根幹をなす重要な考え方といえる。

その後、OECD（経済協力開発機構）理事会は、1996年、加盟国がPRTR制度の導入に取り組むように勧告を出すことになる。これを受け、わが国でも、1996年10月、「PRTR技術検討会」（座長：近藤次郎東京大学名誉教授）が設置され、1997年5月、「PRTR技術検討会報告書」が提出されたことでパイロット事業が開始された。その後、環境庁、通商産業省共同で「特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律」案が取りまとめられ、1999年国会で可決、7月13日公布された^{注1)}。これが通称、「化管法」（以下、化管法）と呼ばれるものである。ここで驚くことは、かつて経済発展に付随した環境問題で大きく揺れたわが国ですら、このような化学物質の環境排出の把握に関する総合的な法律ができたのはわずか15年ほど前だったという事実である。

3. 化管法の柱としてのPRTR制度とSDS制度

化管法の柱はPRTR制度（2001年4月実施）とSDS制度（2001年1月実施）の2本である。SDS（Safety Data Sheet：安全データシート）制度は、従来MSDS（Material Safety Data Sheet：化学物質等安全データシート、以下、MSDS）制度と呼ばれていたが、2003年に国連で採択された「化学品の分類および表示に関する世界調和システム（The Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals: GHS）」の定義にしたがって、2012年6月からSDS制度（以下、SDS）と呼称が変更となっている。これにより輸出入に伴う製品情報の矛盾を回避できることになる。

まずPRTR制度で何がわかるかをあらためて詳しくみてみよう。

- ・ 事業者が国へ報告した対象物質の年間排出量・移動量の集計値と、家庭、農業、自動車などからの年間排出量の推計値

- ・ 全国の事業者が大气、水、土壌へ排出している化学物質とその集計値
- ・ 全国の事業者が廃棄物として処理するために事業所外へ移動している化学物質とその集計値
- ・ 全国の家計、農業、自動車などから排出される化学物質とその量の推計値
- ・ 化学物質別の排出量・移動量
- ・ 業種別の排出量・移動量
- ・ 都道府県別の排出量・移動量

このように、PRTR制度により、さまざまな場所からの化学物質の排出および移動の様子を把握できることになる。

化管法第14条に規定するSDSの対象となる化学物質は、「第一種指定化学物質」「第二種指定化学物質」と定義され、合計で562物質が指定されている。この中で、PRTR制度では第一種指定化学物質462物質が指定されている。

また、化管法対象事業者は、業種、従業員数、対象化学物質の年間取扱量の条件に合致した事業者とされ、都道府県は地域のニーズに応じてそのデータを公表できる。国は国民からの請求に基づき個別事業所データを開示するとされ、国は集計結果を踏まえて環境モニタリングや健康・生態系への影響について調査を行うことになっている。さらに、MSDSの交付義務が明記されており、事業者が指定化学物質やそれを含む製品を他の事業者に出荷する際に、その相手方に対してSDSを交付することにより、その成分や性質、取り扱い方法などに関する情報を提供することが義務化された。

このほか、国および地方公共団体による支援措置、化学物質の有害性などの科学的知見の充実、化学物質の有害性などのデータベースの整備と利用の促進、事業者に対する技術的な助言、化学物質の排出や管理の状況などについての国民理解の増進、そしてこれを支援できる人材育成について規定されている。

4. リスク管理のための化学物質情報の統合化

SDSへの必須記載項目は、国により異なるが、基本的には次に掲げる16項目が規定もしくは推奨されている。

1. 化学品及び会社情報
2. 危険有害性の要約
3. 組成及び成分情報
4. 応急措置
5. 火災時の措置
6. 漏出時の措置
7. 取扱い及び保管上の注意
8. ばく露防止及び保護措置
9. 物理的及び化学的性質
10. 安定性及び反応性
11. 有害性情報
12. 環境影響情報
13. 廃棄上の注意
14. 輸送上の注意
15. 適用法令
16. その他の情報

かなり重たい項目が並んでいることがご理解いただけるだろう。ここにあげたさまざまな情報は、現実にはどこか1か所で集中的に集約され管理されているわけではない。更新された情報についても、それをすぐに把握できるようにはなっていない。このことがSDSに記載した情報に変更が生じているにもかかわらず、その把握が遅れたり、さらには対応の不十分さにつながったりすることが想定される。大企業では人手と予算をかけることが可能でも、中小企業では満足な対応ができないことも十分に想定される。政府にはコストがかからず誰にでも利用できる情報提供システムの構築への取り組みが期待されている。

米国、オーストラリアでは、すでにこれを支援するために大学およびNGOなどの団体による取り組み

があり、大学のデータベースがオンラインで公開され、SDSの作成に必要な情報を入手できるようになっているとの報告書が（独）製品評価技術基盤機構よりなされている^{注2)}。

わが国でも同様の目的の動きが科学技術振興機構により進められてきた。それが化学物質リンクセンターである。

4.1 化学物質リンクセンターの基本的考え方

化学物質リンクセンターは、科学技術振興機構（JST）が主導して開発を進めてきたWeb上に存在する仮想的な情報センターである（開発検討委員会委員長：東京大学・船津公人）。以下のURLにアクセスすることでセンターの利用が可能となっている。

<http://chemlink.jp/>

化学物質リンクセンターの設置の第一の目的は、日本国内外に散在する化学物質関連情報データベースの相互連携を図り、どのデータベースからでも分散した情報を調査可能とすることにある。その目的は信頼すべき研究・情報機関の有害物質情報やその処理・措置情報の提供による国民の安全性の確保である。

このような情報の集約的な利用により、新規物質情報の提供による基礎・応用研究の推進と重複研究排除による研究経費資源の節約が図られるとともに、散在する化学物質情報取得時の経費的、時間的ロスの削減がもたらされる。このイメージを図1に示した。

次の目的として、データベースの相互連携により、各データベースの機能上の長所を生かし、各機関におけるデータベースシステムの構築、運用経費の低減化を図れる点があげられる。これは各機関における長期安定的なデータベース構築とデータ提供につながる。また、インターネット上に散在している化学物質関連情報データベースの相互連携を図り、どのデータベースからでも目的の情報が調査可能となるなど、データベースの相互連携によって、各データベースの機能上の長所を生かし、より効率的で効果的な運

用が可能となる。この姿を化学物質リンクセンターという仮想センターとして実現している（図2）。

そして最後に、ALL JAPANとしての化学物質情報利
活用の牽引役として活用できるという、研究活動の
インフラとしての役割への期待である。

化学物質リスクに関する情報は、1つの機関だけで
そろえられるものではない。さまざまな機関で取得
され、蓄積・更新される情報が誰にでも簡単に入手
できる仕組みは、SDSの作成のみならず、科学研究全
般にとっても極めて有効な体制といえる。

図1 化学物質リンクセンターの位置づけと活用イメージ
—誰でも、どこでも、一元的に、すべての情報を—

図2 化学物質リンクセンター

4.2 化学物質リンクセンターにおける日化辞の役割

現在この化学物質リンクセンターに連動しているのは、産業技術総合研究所：有機化合物のスペクトルデータベース (SDBS)、物質・材料研究機構：高分子データベース (PoLyInfo)、神奈川県環境科学センター：化学物質安全情報提供システム (kis-net)、国立医薬品食品衛生研究所：既存化学物質毒性データベース (JECDB)、科学技術振興機構：日本化学物質辞書データベース (日化辞Web) の5つのデータベースである。それぞれのデータベースは化学物質名、CAS登録番号などのキーで連携されており、あたかも1つのデータベースのように、構造情報、化学物質の各種物性、安全情報、毒性情報、法令、用途などを収集、利用できる特徴がある。まさにSDSを作成する際の大きな助けとなる。

図2を見てわかるように、化学物質リンクセンターにはリンクのためのメタデータがあるのみで、利用者は化学物質リンクセンターの存在を意識することなく、どのデータベースも平等な位置付けでアクセスできるように工夫されており、それぞれのデータベースの運営方針は各機関の独自性を尊重している。しかしながら、日化辞Webが基本的にこの化学物質リンクセンターを成立させている中心的データベースであることは論を俟たない。この化学物質リンクセンターにさらに多くの機関のデータベースが統合されていくなれば、日本の化学関係のデータベースの有用性は飛躍的に高くなり、世界からの見え方、ブランドとしての価値も大きく変わってくると思われる。1957年に設立された日本科学技術情報センターの設立の趣旨はまさにそれであったわけであり、その流れを引き継ぐ科学技術振興機構がもつ、日本の情報インフラ整備と確立に対する役割とその責任はいまなお大きい。

5. データ・シェアリングとの連携

このように化学物質リンクセンターの目的や役割を見てくると気がつくと思うが、そもそも公的機関が保有する化学物質情報はこういう形で公開され、社会に利用されてこそ意義があるということになる。特に国民の税金によって生み出されたデータ、情報は特定の個人の独占的な所有物とはいえない。さらに安全および生命にかかわる場合はなおさらである。このような情報を、研究論文などからその都度探してくるのは多くの時間とコストがかかり、同じ実験を行うなどの無駄にもつながる。ここにデータ・シェアリングという考え方が出てくる。すでに米国ではこの考え方に沿った動きが大学や国立研究所で具体的に動いており、ヨーロッパでもEU-OPENSREEN^{注3)} やResearch Data Alliance Europeという組織のもと、活動が進んでいる^{注4)}。

ストラスブール大学のAlexandre Varnek教授は、フランスの大学などに所属する研究者を対象に、論文などで公表するデータは実際に生み出されているデータの何割くらいかをアンケート調査したところ、3割との結果だったと語ってくれた。残りはごみのように捨てられるとのこと。そのときは目的にかなわなかったデータであったとしても、別の目で見れば得難いデータかもしれない。Varnek教授はこのようなデータを研究者でシェアしあえる仕組みを作ろうとしている¹⁾。

わが国でもデータ・シェアリングの議論が起これ始めている。科学研究にとってのインフラとはハードウェアというよりも情報システムといえる。情報戦略に勝る者が常に勝者の道を歩むことは歴史が証明している。ここで紹介した、化学物質リンクセンターはまだインフラとしてのデータ・情報シェアリングシステムのほんの始まりにしかすぎないが、この成長の先には科学技術立国である日本の1つの躍動的な姿を投影することができる。そう思うのは私だけであろうか。

6. おわりに

化学物質リスクに関して、化管法、PRTR制度、SDS制度、そしてその運用を支援する意味での化学物質リンクセンターなどについて概説してきた。今回は環境リスクとそれに関連したことを中心に科学情報インフラの必要性と現状を書いてきたが、これがたとえば、材料開発に対象が変わったとしても話の筋に変わりはない。材料開発にはこれまで経験と勘に裏打ちされた実験的手法が大きく貢献してきたが、新物質の発見から材料としての実用化まで非常に長い時間と費用を要しているのも事実である。一方で研究・開発の過程で多くのデータや情報が蓄積されてきたことも事実であるが、それが新規材料の研究・開発に有効に使われていないのも事実であり、これを背景に米国ではかねてからのデータ・シェアリングの動きと相まってマテリアルズ・インフォマティクスの動きが始まっている。わが国に目を向けると、この動きを支えるだけの情報インフラやデータ・シェアリングの意識は十分に成熟しているのであろうか。

利用可能な情報が分散していてもそれが実質的に統合利用できる環境の意義は極めて大きい。それは、データ・情報の共有の上に立ってさらに新しいデータや情報の創出に取り組む意欲を支えてくれる。生命の安全にかかわることはもちろんのこと、広く科学の発展にかかわる情報には誰でも簡単にアクセスできる環境が必要であり、それが整っていることが言わばその国の成熟の指標でもあろう。何のための科学なのか、誰のための科学なのか。マスコミも含め、科学を支える情報の在り方をあらためて見直す機会がきているように感じられてならない。

船津 公人（ふなつ きみと）

1983年3月九州大学大学院理学研究科化学専攻博士課程を修了後、豊橋技術科学大学助手、助教授を経て、2004年4月から東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻教授、現在に至る。2011年ストラスブール大学招聘教授。1988年日本科学技術情報センター 丹羽賞・学術賞、2006年日本コンピュータ化学会論文賞などを受賞。30年以上にわたり、ケモインフォマティクスの基礎から応用まで幅広く研究を行い、その成果の社会実装にまで取り組んでいる。

本文の注

- 注1) 経済産業省. 化学物質排出把握管理促進法. http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/law/, (accessed 2015-01-22).
- 注2) 独立行政法人製品評価技術基盤機構. 化学物質管理. <http://www.nite.go.jp/chem/index.html>, (accessed 2015-01-22).
- 注3) EU-OPENSREEN. Welcome to EU-OPENSREEN. <http://www.eu-openscreen.eu/>, (accessed 2015-01-22).
- 注4) Research Data Alliance Europe. <http://rd-alliance.org>, (accessed 2015-01-22).

参考文献

- 1) Dragos Horvath, et al. Design of a General-Purpose European Compound Screening Library for EU-OPENSREEN, ChemMedChem, in press.

Author Abstract

Many chemical substances are provided in the world. More than fifteen years has passed since the laws for monitoring the flow of chemical substances and the influence to the environment were brought into force. In this article, PRTR and SDS systems as the pillar of the laws are described and Japan Chemical Substance Dictionary is referred as core dictionary for Link-center for information of chemical substances supplied by Japan Science and Technology Agency.

Key words

PRTR, SDS, Link-center for information of chemical substances, data sharing, Japan Chemical Substance Dictionary