

「2017年度化学品管理のためのQSAR/*in silico*セミナー（基礎編）」を開催しました。

日化協では、2017年11月1日（水）に、日化協会議室において、「2017年度化学品管理のためのQSAR/*in silico*セミナー（基礎編）」を開催しました。このセミナーは、QSAR（定量的構造活性相関）をはじめとする*in silico*評価（コンピュータによるシミュレーション技術及び既存の情報並びに暗黙知を活用するコンピュータによる毒性予測や計算化学を含む広範囲な評価手法）の化学業界での普及・活用を推進することを目的に定期的に開催しています。今回、51名の参加があり、活発な質疑応答が行われ、関心の高さが伺われました。

今回は2つのテーマで講演がありました。

① 一般財団法人 化学物質評価研究機構 林 多恵 氏

「(Q)SAR及びカテゴリーアプローチの概要」

- 1) 化学物質の特性を予測する手法
- 2) (Q)SARとは
- 3) カテゴリーアプローチとは
- 4) 活用例の紹介

② 独立行政法人 製品評価技術基盤機構 池永 裕 氏

「OECD QSAR Toolboxの概要」

- 1) QSAR Toolboxの概要
- 2) QSAR Toolboxの操作手順
- 3) QSAR Toolboxの活用事例

アンケート結果から、「QSAR、カテゴリーアプローチの全体像がわかり参考になった」、「QSAR Toolboxを使用してみようと思う」といった好評の声を多くいただきました。一方で、「もう少し時間をかけていただいた方が良かった。」「具体例をもっと知りたかった。」という声もあり、次回以降の運営に生かしていきたいと思えます。

