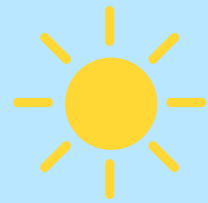


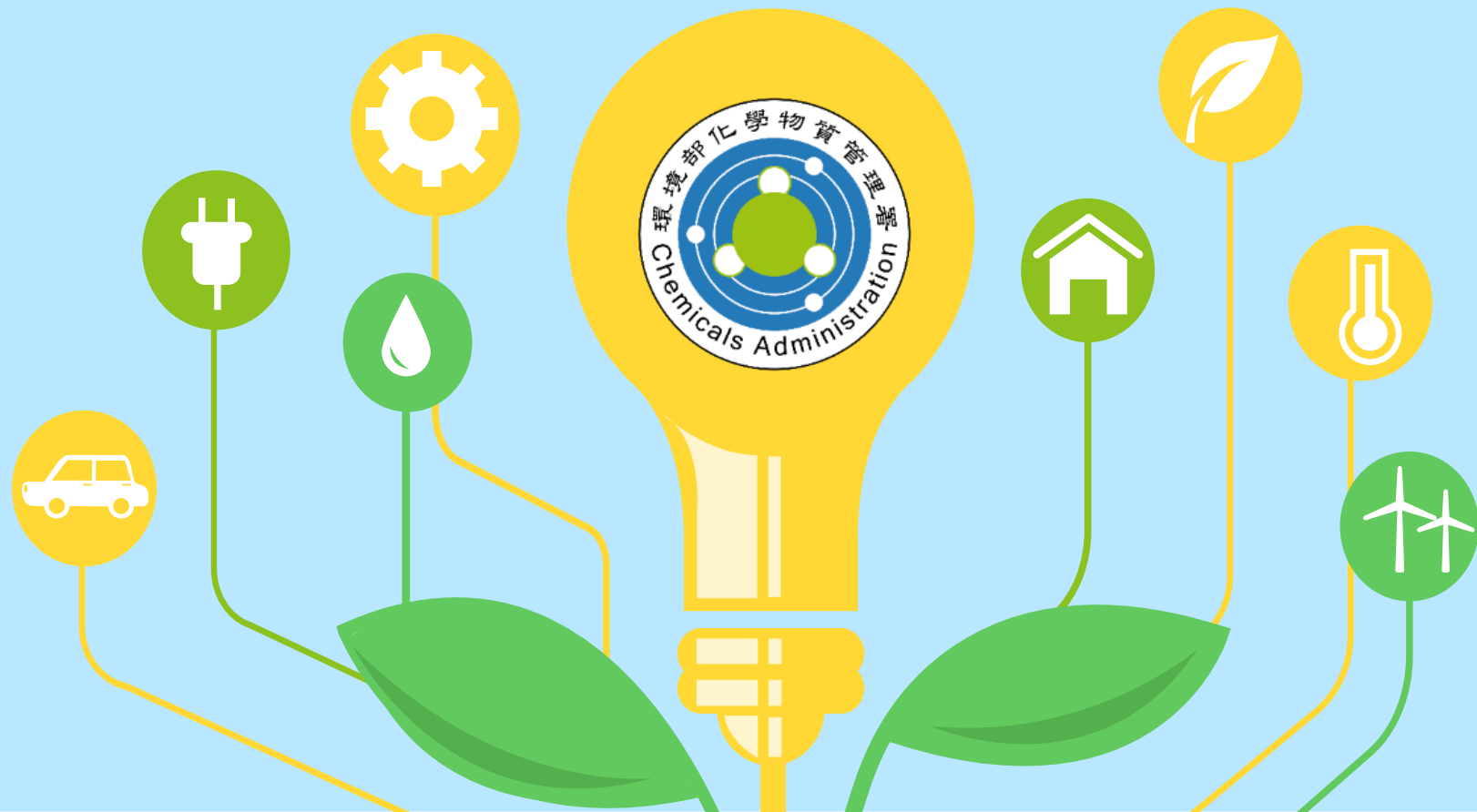


綠色化學科技的推動與 高風險物質替代方案



化學物質管理署
蕭寶桂特約高級
環境技術師

113年12月25日



簡報大綱

- 01 ▶ 簡介
- 02 ▶ 綠色化學的核心概念與應用
- 03 ▶ 智慧科技vs.高風險化學物質
- 04 ▶ 資料庫關聯模型與風險診斷
- 05 ▶ 未來展望與挑戰

01

簡介

日新月異的化學物質

- 化學物質

- 現代、方便、多彩、文明、科技
- 食衣住行育樂購都有它

- 未安全運作、良善管理

- 污染環境、危害健康

- CAS. No 化學物質

- 超過2.3億種



- 我國既有化學物質清單超過 10萬種
- 流通運作物質超過 25,500種
- 登錄新化學物質約 7,000種

無所不在的存在

化學物質各運作型態，有不同的功能或影響

勞動環境



- 毒性化學物質
- 管制性化學品
- 工業用爆炸物



公共運輸



- 消防安全
- 危險物品運輸
- 槍砲彈藥



事業、用路人



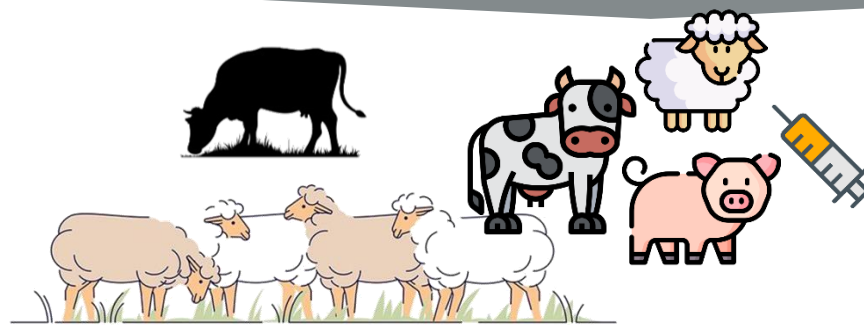
人體健康



- 食品
- 化妝品
- 藥品/毒品管制



環境污染



- 農藥
- 肥料
- 飼料
- 動植物用藥

動植物、生態環境



02

綠色化學的核心概念與 應用

綠色化學（永續化學）

- 綠色化學之父John Warner 及Paul Anatas：
“ Green Chemistry: Theory and Practice ”（綠色化學：理論與實踐，1998）

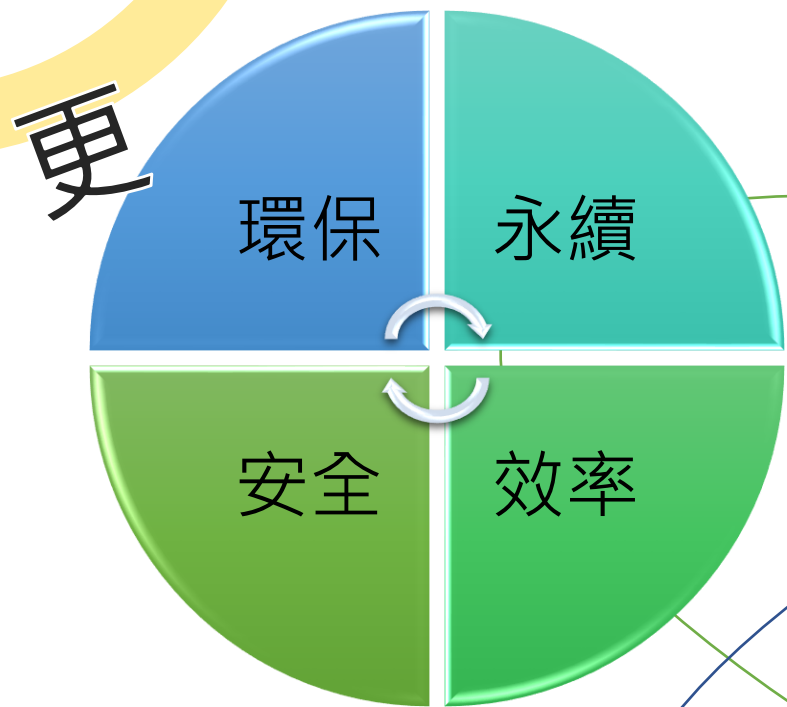


John Warner, 108.8.23



Paul Anatas, 107.6.19

綠色化學益處



源頭管制風險低

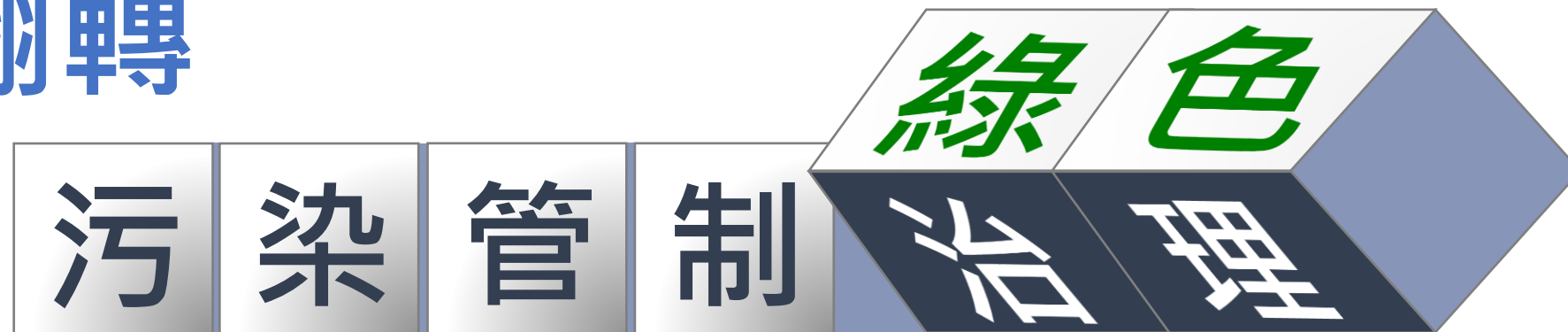
減少能資源損耗

國際接軌促貿易

環保與經濟共榮



觀念翻轉



減少危害性
進行風險防控



危害預防及應變



安全且永續

由生命週期角度提出轉型作法

■減少化學危害

- 制定永續挑戰的解決方案

涵蓋 生命週期

- 原料、製程、產品永續性
- 在供應鏈與價值鏈中實現無毒循環

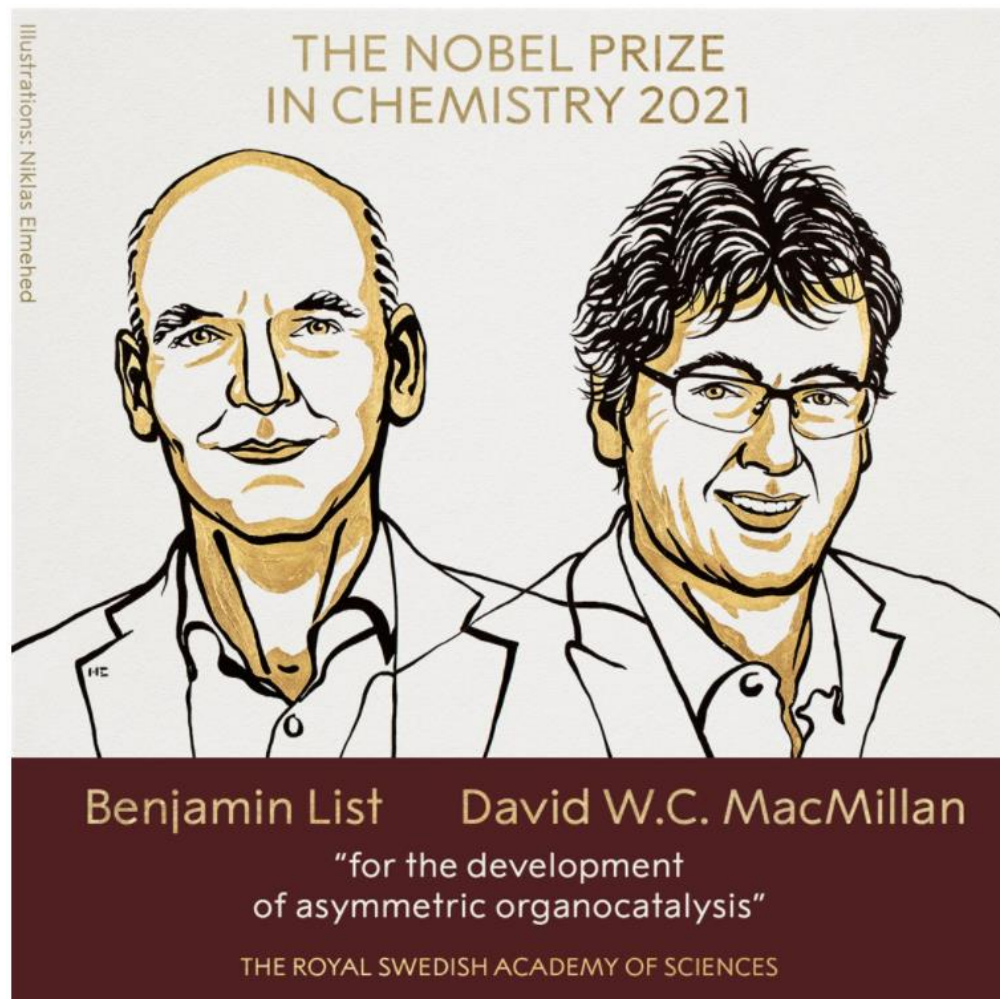
10項轉型綠色化學可循方向

- 減少化學危害
- 避免後悔替代
- 永續採購
- 生產永續性
- 產品永續性
- 減少化學品排放及污染
- 實現無毒循環
- 社會效益最大化
- 保護勞工、消費者及弱勢群體
- 制定永續挑戰的解決方案



《2021諾貝爾化學獎》

不對稱有機催化

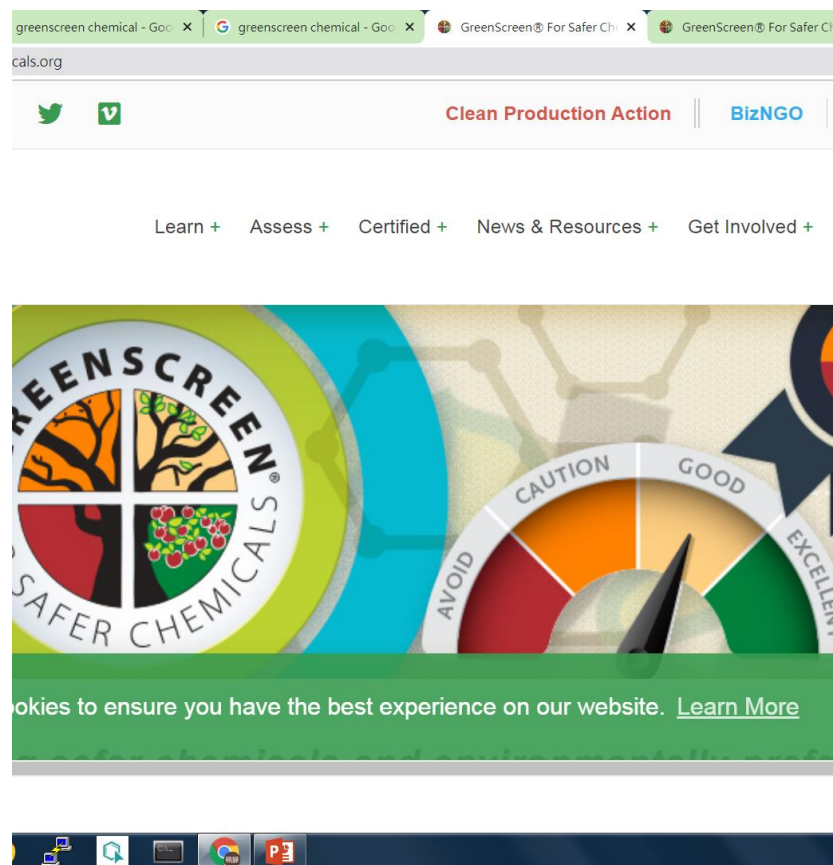


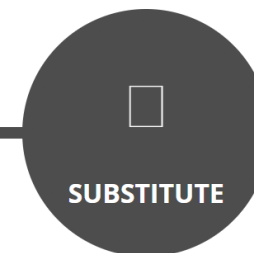
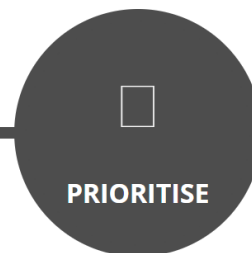
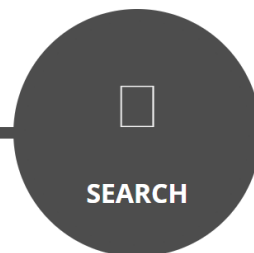
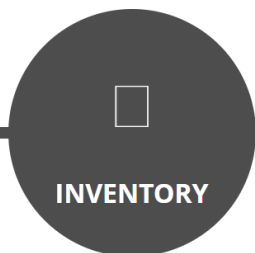
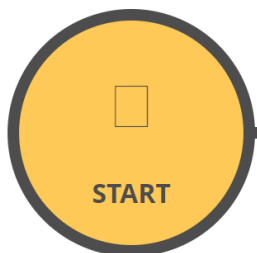
有機催化 (organocatalysis)

- ✓ 高精確度的工具
- ✓ 可用於分子建構，對藥學研究做出重大貢獻
- ✓ 有助於讓化學相關產業對環境更友善

GreenScreen® for Safer Chemicals

- 基於美國EPA Design for Environment延伸
- 公開透明的化學物質危害與風險評估準則
- 由非政府組織NGO建立來推行綠色化學
- 由通過Clean Production Action認證的機構來評估
- GreenScreen 清單轉譯器
 - 查詢目標是否在國際上的危害物質列表中
- GreenScreen 認證
 - 驗證產品與製程是否符合綠色化學原則
 - 紡織品、建材、消防泡沫、清潔劑等
- 國際知名廠商採購單位採用
Walmart、Hewlett Packard (HP)、Levi Strauss & Co、
U.S. Green Building Council等





Keep one step ahead with PRIO

The PRIO tool helps you to find and replace hazardous substances in your articles or chemical products. By replacing hazardous substances, you will take care of your employees, your customers, and the environment. It also allows your products to be recycled and reused providing the basis for the development towards a non-toxic circular economy.

In PRIO you will find both substances that are banned and substances that are still allowed to be used. By phasing out the use of hazardous substances you can keep one step ahead of the

About PRIO

-  Background - PRIO
-  PRIO criteria for phase-out substances and priority risk-reduction substances
-  What substances are in PRIO?

<https://www.kemi.se/prioguiden/english/start>

03

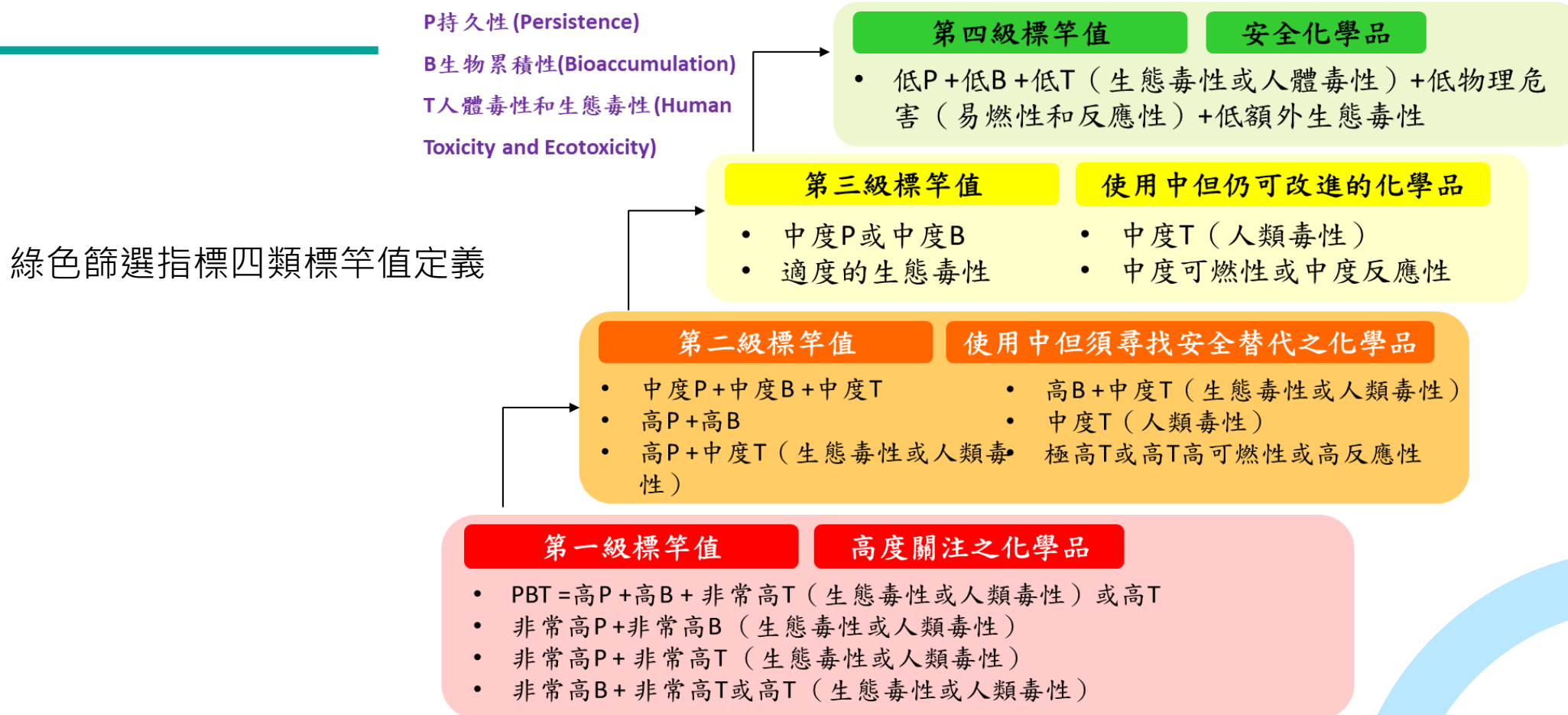
智慧科技vs.高風險化學物質

風險評量基準

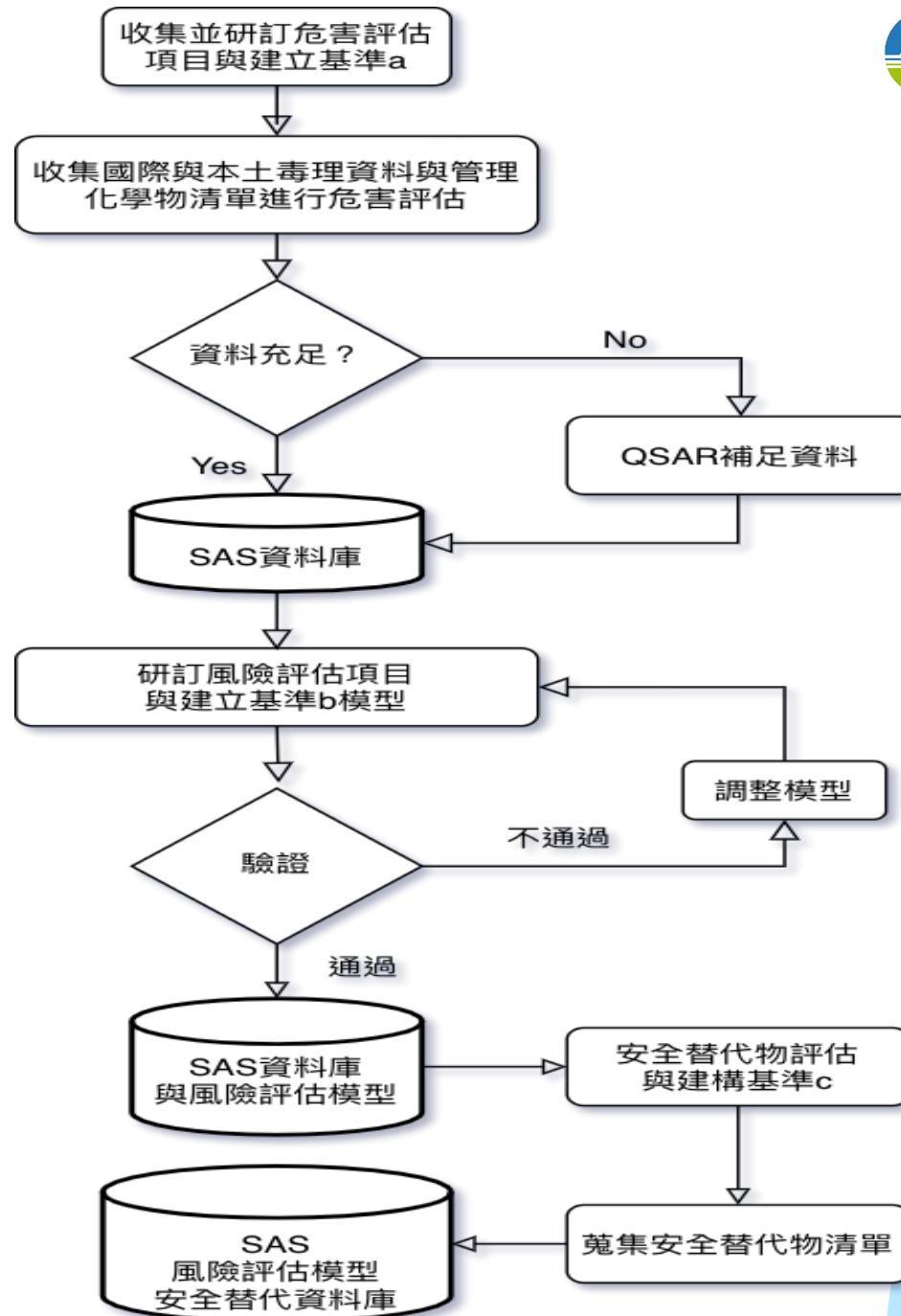


環境部化學物質管理署
Chemicals Administration
Ministry of Environment

GreenScreen：透過**PBT**三個鑑定化學品之基本原則建立4個標竿值 (Benchmark)



化學物質搜尋、 評估及篩選



爬取國際與本土資料庫

✓國際資料庫

- 下載PubChem內約1億1千萬個化學物資料→分析資料、資料整理→採用具有GHS註解之**18萬個化學物存入SAS資料庫**→危害評估資料

✓本土資料庫 下載兩個資料來源共341個化學物，分別是

- 1. 透過環境部公開API下載
- 2. 化學署毒化物快速查詢取得

危害評估項目與建立基準a

✓收集並研訂危害評估項目與建立基準a

- 基於1) **GHS (Global Harmonized System of Classification and Labeling of Chemicals)**、2) **GreenScreen for safer chemicals**，建構危害評估項目 (基準a)

✓收集34份清單並進行危害評估

- 基於基準a，整合國際毒理資料庫、管制化學物清單、本土毒理資料庫後，對各化學物進行危害評估，**危害資料不足處則使用計算毒理方法QSAR進行預測**
- 資料整理、整合後設計**資料庫綱要 (database schema)**，並儲存資料

風險評估項目與建立基準b

✓研訂風險評估項目與建立基準b

- 基於GreenScreen 危害評估，研訂適用本土以及國際進出口之風險評估項目（基準b），建構數值模型，動態調整模型評估是否尋找安全替代

✓資料庫爬蟲程式以確保資料自動更新

- ✓爬取並移除不需使用資料，將資料整合設計資料庫綱要存入資料庫中建立關聯性

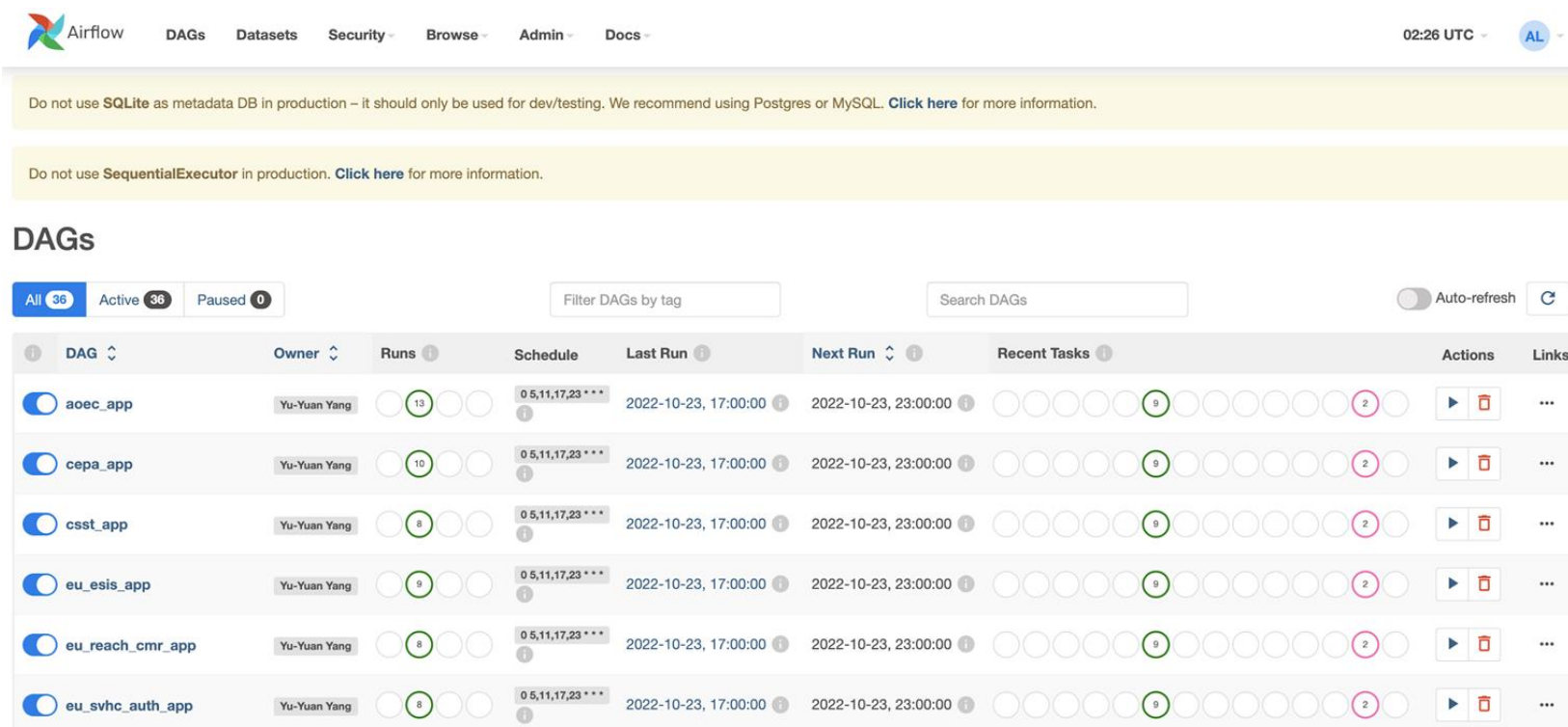
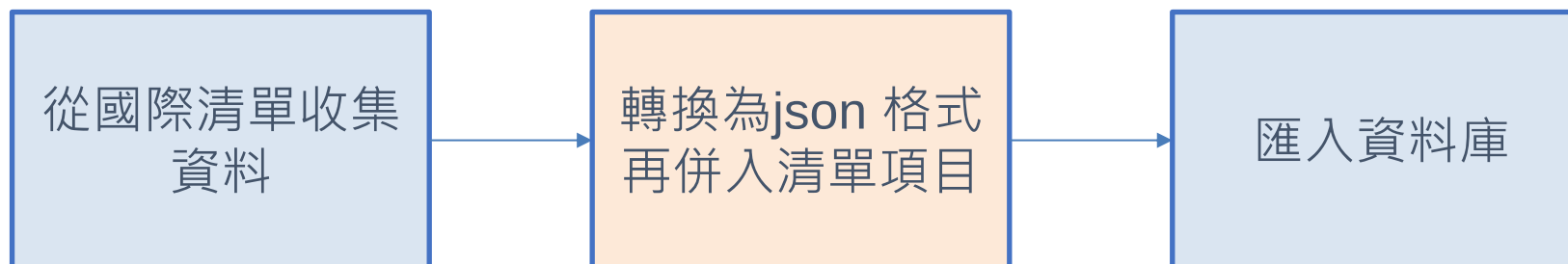
✓完成18萬的化學物質危害與風險評估，並取得1050個安全替代物

資料自動更新

- ✓資料自動更新採用Apache Airflow框架串接爬蟲程式
 - Google, Amazon雲端運算皆提供Airflow服務串接雲端服務
 - 資料科學領域（大數據）常用框架
 - 規劃每週定時啟動更新資料



Apache Airflow 框架串接工作流程



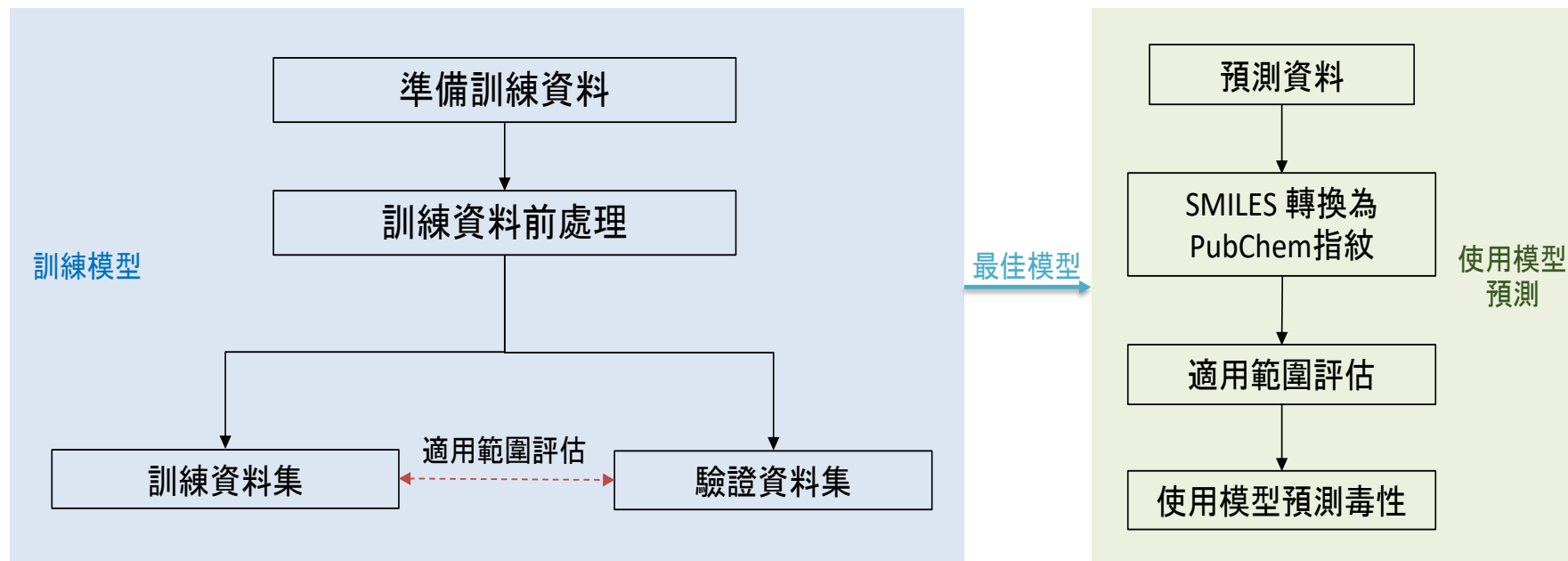
The screenshot shows the Apache Airflow web interface. At the top, there's a navigation bar with links for DAGs, Datasets, Security, Browse, Admin, and Docs. The main content area displays a list of DAGs (Directed Acyclic Graphs) with columns for DAG name, Owner, Runs, Schedule, Last Run, Next Run, Recent Tasks, Actions, and Links. The DAGs listed are: aoec_app, cepa_app, csst_app, eu_esis_app, eu_reach_cmr_app, and eu_svhc_auth_app. Each DAG has a status indicator (Active, Paused) and a list of recent task runs.

DAG	Owner	Runs	Schedule	Last Run	Next Run	Recent Tasks	Actions	Links
aoec_app	Yu-Yuan Yang	13	0 5,11,17,23 ***	2022-10-23, 17:00:00	2022-10-23, 23:00:00	9	[Play, Stop]	...
cepa_app	Yu-Yuan Yang	10	0 5,11,17,23 ***	2022-10-23, 17:00:00	2022-10-23, 23:00:00	9	[Play, Stop]	...
csst_app	Yu-Yuan Yang	8	0 5,11,17,23 ***	2022-10-23, 17:00:00	2022-10-23, 23:00:00	9	[Play, Stop]	...
eu_esis_app	Yu-Yuan Yang	9	0 5,11,17,23 ***	2022-10-23, 17:00:00	2022-10-23, 23:00:00	9	[Play, Stop]	...
eu_reach_cmr_app	Yu-Yuan Yang	8	0 5,11,17,23 ***	2022-10-23, 17:00:00	2022-10-23, 23:00:00	9	[Play, Stop]	...
eu_svhc_auth_app	Yu-Yuan Yang	8	0 5,11,17,23 ***	2022-10-23, 17:00:00	2022-10-23, 23:00:00	9	[Play, Stop]	...

QSAR模型

- 從化學物質結構預測毒性的量化模型
- 歐盟通過下列四點的QSAR模型便能取代實驗用於法規的測試評估：
 - 具有足夠的科學可信度
 - 適用於待測物質
 - 評估結果項目符合分類標籤
 - 提供足夠的模型建立細節

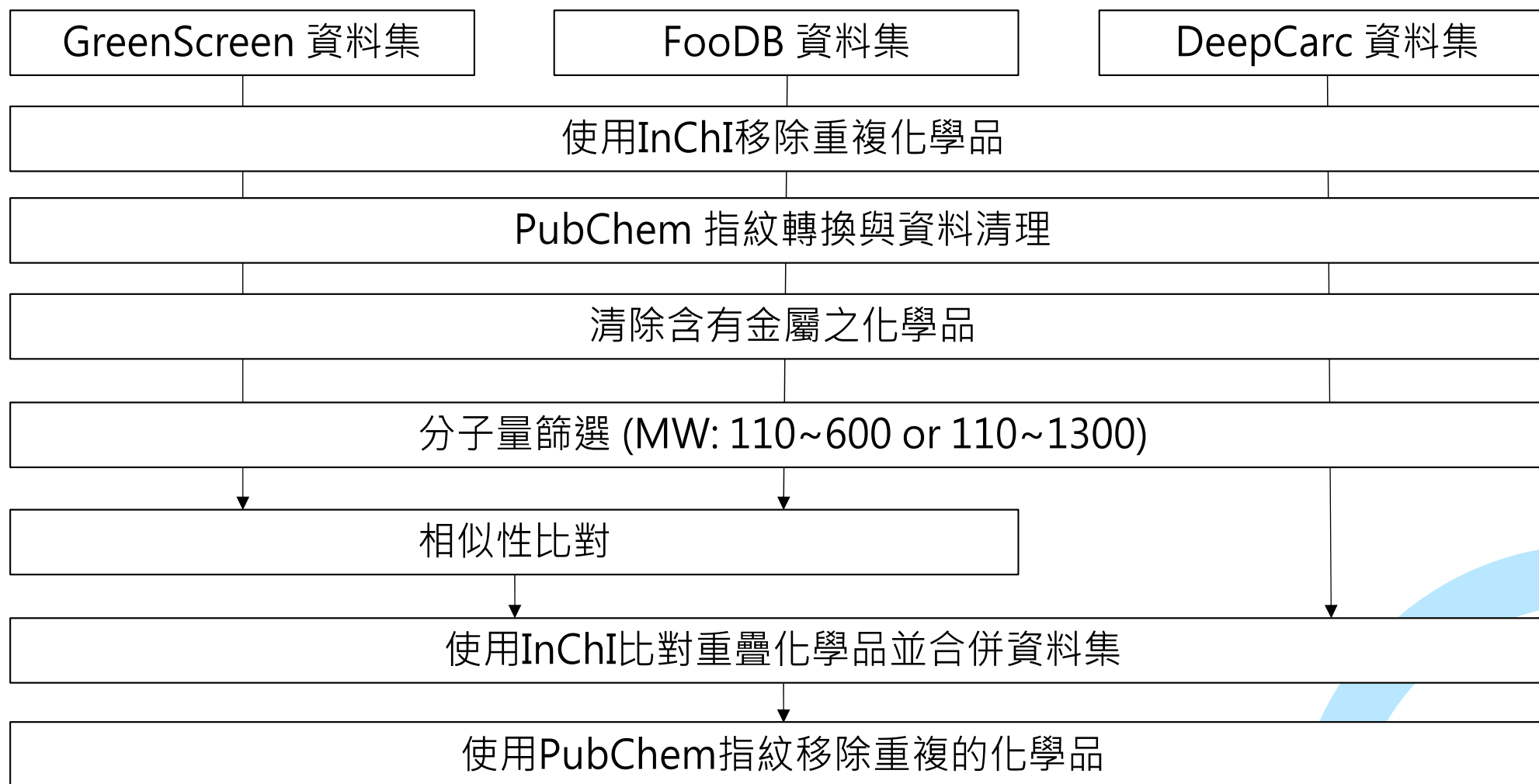
QSAR演算法



準備訓練資料

- ✓ GreenScreen指引所整理的資料集 (資料量=1440筆)
- ✓ FooDB (資料量=70477筆)
- ✓ DeepCarc團隊所整理的致癌性資料集 (資料量=863筆)

訓練資料集前處理流程



調整危害資料不足的QSAR模型

- GHS資料

- PubChem資料庫中有兩種GHS資料，一是廠商自主上傳後統整而成的安全與危害項目，二是來自聯合國的GHS分類資料
 - 兩者皆以危害編碼 (H code) 呈現，可對應到危害終點的危險程度分類
 - 一個化學物質可對應到多個危害編碼
- 聯合國的資料，其危害編碼的數量和可信度完善
- GHS評估後無危害的危害終點項目依照GreenScreen的分類訂定為低危害

調整危害資料不足的QSAR模型

- EPI Suite (預測軟體介面套組)

- EPI Suite是美國EPA推出的免費預測模型工具套組，其中包含16個QSAR預測模型
- 採用最新版的EPI Suite™ 4.11，填補欠缺資料的兩項危害終點：存續性以及生物累積性
- 存續性採用三級逸度預測模型 (level III fugacity model)，計算化學物質在大氣、土壤、水體、沉積物中經過相變、反應、運輸等作用後在環境中的分布比例及半衰期
- 借由模型預測的大氣、土壤、水體半衰期對照GreenScreen標準訂出危害程度

調整危害資料不足的QSAR模型

- 內分泌干擾

- 採用美國EPA 內分泌干擾物監測計畫中所使用的的雌激素與雄激素受體結合模型來填補欠缺資料 (參考資料：
https://www.epa.gov/sites/default/files/2017-09/documents/2017_edsp_white_paper_public.pdf ,
<https://github.com/ericwatt/eapath>)
 - 預測結果為是雌激素/雄激素受器活化物可能機率或受器拮抗物可能機率
- 由於預測結果為機率，藉由此模型預測之化學物質標註具有干擾可能性機率

GHS (化學品全球調和制度)

- Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals
- 由聯合國歐洲經濟委員會建立 (UNECE)
- 2002年「永續發展世界高峰會」約翰尼斯堡行動計畫後開始推行
- 每年更新版本
 - 最新版：v10 (2023)



GHS pictograms

GHS危害評估項目(29項)



環境部化學物質管理署
Chemicals Administration
Ministry of Environment

物理危害	爆裂物
	易燃氣體
	氣溶膠與加壓化合物
	氧化性氣體
	加壓氣體
	易燃液體
	易燃固體
	自反應物質與混合物
	發火性液體
	發火性固體
	自熱物質與混合物
	禁水性物質
	氧化性液體
	氧化性固體
	有機過氧化物

物理危害	金屬腐蝕物
	減感爆裂物
健康危害	急性毒性
	皮膚腐蝕/刺激
	眼睛嚴重傷害/刺激
	皮膚或呼吸致敏
	生殖細胞致突變性
	致癌性
	生殖毒性
	特定器官毒性(單次暴露)
	特定器官毒性(多次暴露)
	呼吸危害
環境危害	水生環境危害
	臭氧層危害

化學物質之危害性評估

• GreenScreen危害性評估 (Hazard Assessment)

- 針對**18個人類健康與環境終點**中每一個的PBT (P : Persistence持久性 , B : Bioaccumulation生物累積性 , T : Human 人體毒性和生態毒性) 特性危害等級進行分類
- 危險等級範圍從非常高 (Very High) -中度-非常低 (Very Low)**

GreenScreen 危害性評估結果表

Group I Human					Group II and II* Human									Ecotex		Fate		Physical	
C	M	R	D	E	AT	ST		N		SnS*	SnR*	IrS	IrE	AA	CA	P	B	Rx	F
						SINGLE	REPEATED*	SINGLE	REPEATED*										
DG	L	L	M	M	DG	L	L	M	M	L	L	L	L	L	L	vH	M	L	L

Glossary of GreenScreen® Hazard Endpoint Abbreviations

AA Acute Aquatic Toxicity
AT Acute Mammalian Toxicity
B Bioaccumulation
C Carcinogenicity
CA Chronic Aquatic Toxicity

D Developmental Toxicity
E Endocrine Activity
F Flammability
IrE Eye Irritation
IrS Skin Irritation

M Mutagenicity and Genotoxicity
N Neurotoxicity
P Persistence
R Reproductive Toxicity
Rx Reactivity

SnS Sensitization (Skin)
SnR Respiratory Sensitization
ST Systemic/Organ Toxicity

* Repeated exposure

- vL : 非常低
- L : 低
- M : 中度
- H : 高
- vH : 非常高
- DG : 缺乏評估數據
- Blank : 未進行評估

GreenScreen 18項危害性終點評估指標



第一類人體健康 Human Health Group I	第二類人體健康 Human Health Group II	第二類人體健康* Human Health Group II*	環境毒性與宿命 Environmental Toxicity & Fate	物理性危害 Physical Hazards
致癌性 Carcinogenicity (C)	急性哺乳動物毒性 Acute Mammalian Toxicity (AT)	全身毒性 & 器官效應-重複暴露終點評估 Systemic Toxicity & Organ Effects – Repeated Exposure sub-endpoint (ST-repeated)	急性水生動物毒性 Acute Aquatic Toxicity (AA)	反應性 Reactivity (Rx)
致突變性和遺傳毒性 Mutagenicity & Genotoxicity (M)	全身毒性 & 器官效應 Systemic Toxicity & Organ Effects (ST-single)	神經毒性-重複暴露終點評估 Neurotoxicity – Repeated Exposure sub-endpoint (N-repeated)	慢性水生動物毒性 Chronic Aquatic Toxicity (CA)	可燃性 Flammability (F)
生殖毒性 Reproductive Toxicity (R)	神經毒性 Neurotoxicity (N-single)	皮膚過敏性 Skin Sensitization (SnS) 呼吸道過敏性 Respiratory Sensitization (SnR)	其他生態毒性之可行研究 Other Ecotoxicity studies when available	
發育毒性 (包括發育神經毒性) Developmental Toxicity (incl. Developmental Neurotoxicity) (D)	皮膚刺激性 Skin Irritation (IrS)		持久性 Persistence (P) 生物累積性 bioaccumulation (B)	
內分泌活動 Endocrine Activity (E)	眼睛刺激性 Eye Irritation (IrE)			

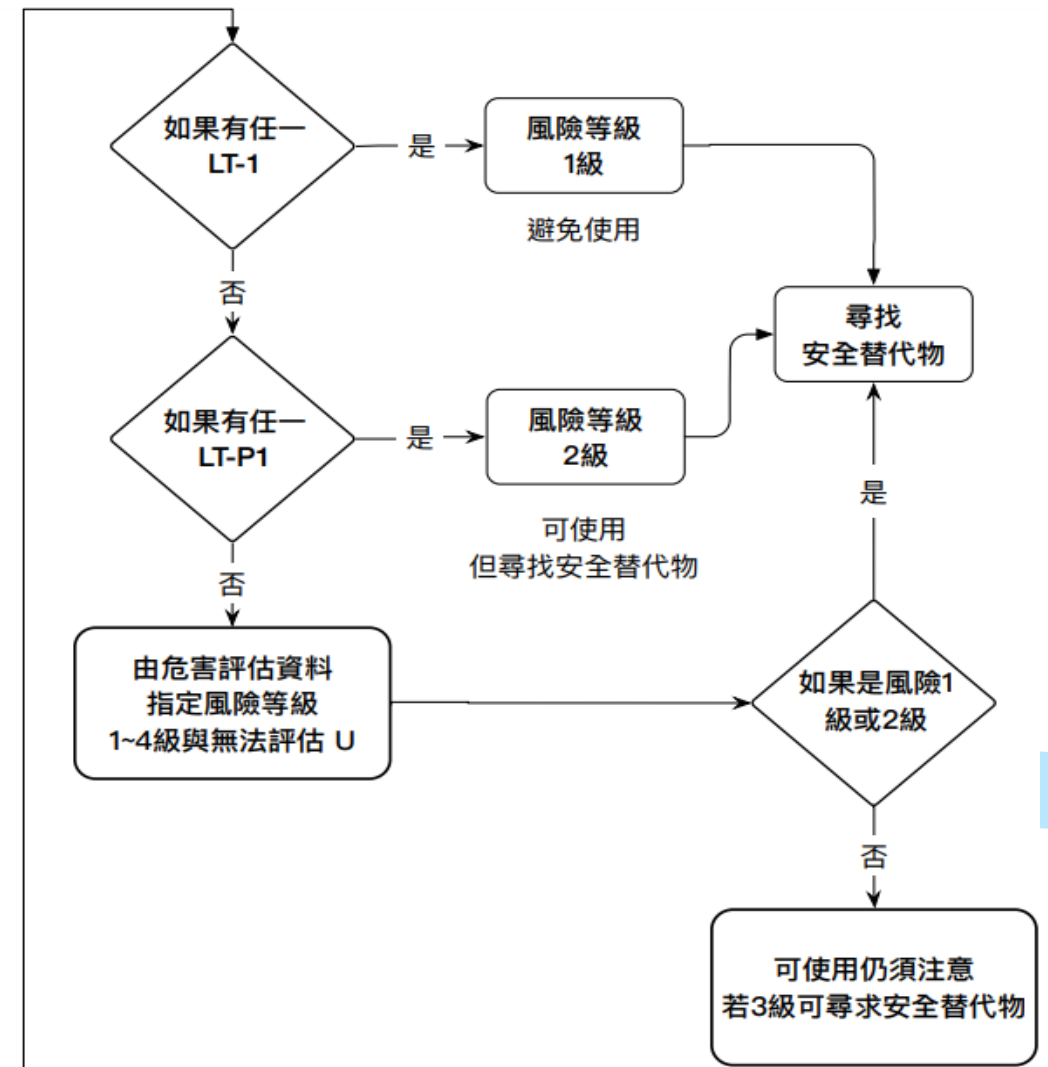
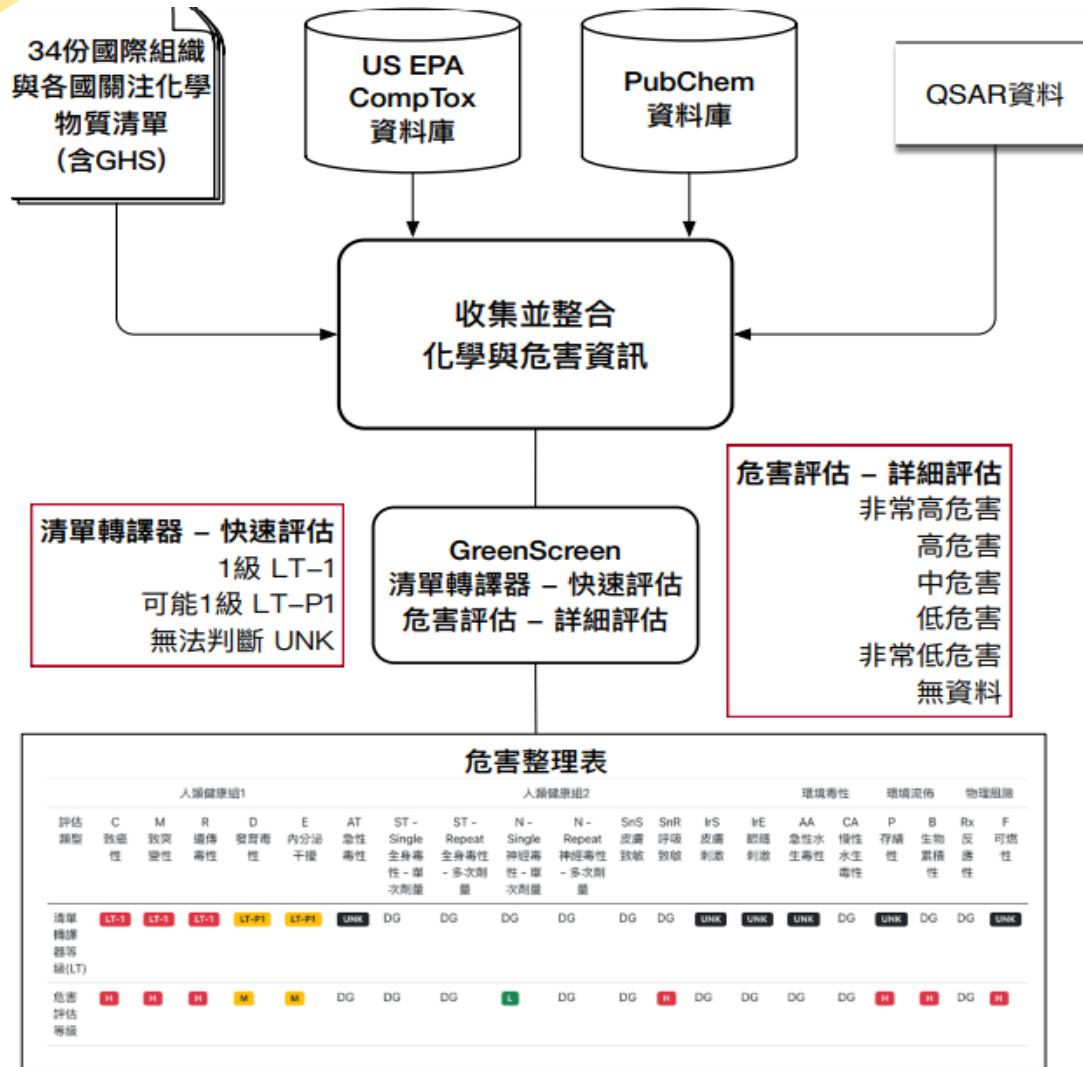
GHS 對應到 GreenScreen 危害評估

	非常高危害	高危害	中危害	低危害
致癌性	NA	H350, H350i	H351	Not classified
致突變性	NA	H340	H341	Not classified
生殖毒性	NA	H360F, H360FD, H360Fd	H360Df, H361f, H361fd	Not classified
發育毒性	NA	H360D, H360FD, H360Df, H362	H360Fd, H361d, H361fd	Not classified
急性毒性	H300, H310, H330	H301, H311, H331	H302, H312, H332	H303, H313, H333, Not classified
全身毒性 單次劑量	H370	H371, H304	H335, H336, H305	Not classified
全身毒性 重複劑量	NA	H372	H373	Not classified

GHS 對應到 GreenScreen 危害評估

	非常高危害	高危害	中危害	低危害
皮膚致敏	NA	H317 (Category 1A)	H317 (Category 1B)	Not classified
呼吸致敏	NA	H334 (Category 1A)	H334 (Category 1B)	Not classified
皮膚刺激	H314	H315	H316	Not classified
眼睛刺激	H318	H319	H320	Not classified
急性 水生毒性	H400	H401	H402	Not classified
慢性水生毒性	H410	H411	H412	H413, Not classified
反應性	H200, H240, H241, H260, H271	H201, H202, H203, H206, H207 (Category 2), H242 (Type C, D), H251, H261, H270, H272 (Category 2)	H204, H205, H207 (Category 3), H208, H242 (Type E, F), H252, H262, H272 (Category 3), H290	Not classified
可燃性	H220, H224, H230, H231	H221 (Category 1B), H222, H225, H228 (Category 1), H229 (Category 1), H250	H221 (Category 2), H223, H226, H227, H228 (Category 2), H229 (Category 2)	H229 (Category 3) Not classified

化學物質搜尋、評估及篩選流程



04

資料庫關聯模型與 風險診斷

高風險化學物質之安全替代化學物質 搜尋、評估及篩選

Search chemicals for hazard/risk assessments and seek possible substitutions for hazardous chemicals.

化學物



請輸入關鍵字，例如DEHP



可以嘗試搜尋 Benzene 、聯合國危險貨物編號(UN No): 1114 、或歐盟編號(EC No): 200-753-7 、CAS No: 71-43-2

202818

化學物

123

危害項目

1316247

化學物危害評估數

資料庫綱要

- 資料庫設計為13個資料表，包含化學物、毒理、危害、風險，各國地區法規限制使用以及資料表之間相關資料表，以下為主要11個資料表綱要

- 化學物Chemical資料表
- CAS編號資料表
- 危害Hazard資料表
- 危害評估Hazard Assessment資料表
- 限制使用化學物Restriction資料表
- 毒理Toxicity資料表
- 風險Risk資料表
- 風險評估 Risk Assessment資料表
- 暴露途徑Route資料表
- 限制清單List資料表
- 物種Organism資料表

剩下2個關聯資料表為串接多對多資料故省略

編號	資料庫/列表名稱	化學物數量
1	美國國家衛生研究院 PubChem	147,408
2	美國國家廢棄物減少計畫重點化合物清單	2642
3	美國極度危害物質清單	1,906
4	美國加州第65號提案化學物質清單	984
5	美國環保署整合性風險資料系統	571
6	美國衛生與公眾服務部-第十四次致癌物報告	272
7	美國疾病控制中心 - 職業致癌物清單	126
8	美國華盛頓州持久性生物累積毒素清單	74
9	美國國家毒物計畫非癌症健康影響評估-繁殖或發育專著清單	20
10	美國環保署毒物釋放清單	16
11	加拿大國內物質清單	22,065
12	加拿大工作場所有害物質訊息系統 2015 分類清單	5,663
13	加拿大環境保護法(規章1)有毒物質清單	159
14	歐盟GHS	4,474
15	歐洲化學總署公告REACH法規附件17	2,248
16	歐盟內分泌干擾物優先列表	564
17	歐盟高度關切物質候選清單	422
18	歐洲化學總署公告高度關切物質清單-優先列表	109

34份國際與各國限制或管制化學物質清單

編號	資料庫/列表名稱	化學物數量
19	歐洲高度關注物質授權清單	108
20	歐盟化學法規毒性物質評估清單	36
21	德國聯邦環境局-對水有害的物質	12,670
22	德國最大工作場所濃度清單	1,591
23	奧斯陸-巴黎公約委員會清單	314
24	斯德哥爾摩公約-持久性有機污染物	33
25	國際內分泌干擾交流協會 - 潛在內分泌干擾物清單	1,483
26	國際化學品秘書處 - 立即替換清單	1,037
27	國際癌症研究機構清單	1,090
28	職業與環境診所協會-氣喘原清單	1,428
29	澳洲 GHS	6,943
30	紐西蘭GHS	5,439
31	日本GHS	3,291
32	韓國GHS	2,128
33	馬來西亞GHS	682
34	期刊文獻 Lancet	214
35	臺灣本土資料庫	341

34份國際與各國 限制或管制化學 物質清單 (續1)

擴增關聯化學物質資料庫



環境部化學物質管理署
Chemicals Administration
Ministry of Environment

編號	清單縮寫名	清單來源	清單名稱	危害終點	適用地區	適用產業別	是否有強制性	新增化學物數量
01	TRI Carcinogens	美國勞工部	US OSHA - Carcinogens	致癌性、持續性 生物累積性	美國	所有	強制	856
02	AFIRM Packaging RSL	服飾與鞋類國際限用物質清單管理團隊	The Apparel and Footwear International RSL Management Group (AFIRM) Packaging Restricted Substances List (RSL)	-	全球	C 大類「製造業」- 成衣及服飾品製造業; 皮革、毛皮及其製品製造業	全球	64
03	Endocrine Disruptor Lists (Danish EPA)	丹麥環保署	Endocrine Disruptor Lists (Danish EPA)	內分泌干擾	歐盟	C 大類「製造業」-其他化學製品製造業-清潔用品及化粧品製造業	強制	185
04	US EPA CompTox PFAS STRUCT	美國環保署	a list of all PFAS structures containing a specific defined substructures.	-	美國	所有	強制	14735
05	CFP Solar CoHCs Reference List	化學品足跡計畫 (CFP)	CFP Solar Chemicals of High Concern Reference List	人類健康危害、環境危害		所有	非強制	225
06	Cosmetic Ingredient Review (CIR)	化妝品成分回顧	Cosmetic Ingredient Review (CIR)	皮膚致敏、皮膚刺激	美國	C 大類「製造業」-其他化學製品製造業-清潔用品及化粧品製造業	強制	5766
07	Comprehensive Global Database of PFASs	經濟合作暨發展組織	Comprehensive Global Database of PFASs	-	全球	PFAS		4730
08	EU - SCCS Fragrance Allergens	歐盟	EU Scientific Committee on Consumer Safety - Fragrance Allergens	過敏原	歐盟	所有	強制	176
09	US FDA - Prohibited & Restricted Ingredients in Cosmetics	美國食藥署	US FDA - Prohibited & Restricted Ingredients in Cosmetics	人類健康危害	美國	C 大類「製造業」-其他化學製品製造業-清潔用品及化粧品製造業	強制	11
10	ZZS totale lijst	荷蘭公衛、衛生、運動部	Netherlands Substances of Very High Concern (RIVM ZZS)	致癌性、生殖毒性、生物累積性	歐盟	所有	非強制	2045

擴增關聯化學物質資料庫



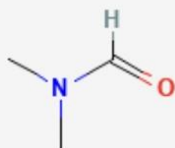
環境部化學物質管理署
Chemicals Administration
Ministry of Environment

編號	清單縮寫名	清單來源	清單名稱	危害終點	適用地區	適用產業別	是否有強制性	新增化學物數量
11	Perkins and Will - Precautionary List	帕金斯威爾建築事務所	Perkins and Will - Precautionary List	內分泌干擾、發育毒性（含神經發育毒性）、生殖毒性、系統毒性、器官毒性、眼睛刺激、皮膚刺激	北美	I 大類「工商服務業」-景觀、室內設計業; M大類「專業、科學及技術服務業」-建築、工程服務及技術檢測、分析服務業-建築服務業; M大類「專業、科學及技術服務業」-專門設計業-專門設計業-室內設計業	非強制	71
12	CA SCP - Candidate Chemicals	美國加州政府	State of California Safer Consumer Products Information Management System (Cal SAFER) - Safer Consumer Product Candidate Chemicals	內分泌干擾、發育毒性（含神經發育毒性）、生殖毒性、系統毒性、器官毒性、眼睛刺激、皮膚刺激	美國	所有	強制	3302
13	FCCdb	食品包裝論壇	Food Packaging Forum - Food Contact Chemicals database. Version 5.0	人類毒性、環境危害、物理危害	全球	C大類「製造業」-食品及飼品製造業	非強制	11618
14	CHE - Toxicant Database	健康與環境協作組織	Collaborative on Health and the Environment (CHE) - Toxicant and Disease Database	皮膚與呼吸敏感	全球	所有	非強制	613
15	MA TURA Chemical list	美國麻州政府	US Massachusetts Toxics Use Reduction Act		美國麻州	所有	非強制	1725
16	EDF - Chemical Detection Project: Full List of Chemicals Detected		Environmental Defense Fund (EDF) - Chemical Detection Project: Full List of Chemicals Detected	人類健康毒性	全球	所有	非強制	57
17	Silent Spring - Breast Cancer Chemicals	Silent Spring 研究機構	Silent Spring - Breast Cancer Chemicals Mammary Carcinogens Review Database	致癌性	全球	所有	非強制	209
18	SCJ - Potential Skin Allergens	美國莊臣集團	Scjohnson - Potential Skin Allergens in SC Johnson products	皮膚致敏	全球	C大類「製造業」	非強制	353
19	Suspect List of Possible Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS)	美國國家標準暨技術研究院 (US NIST)	US National Institute of Standards and Technology - Suspect List of Possible Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS)	-	美國	所有	非強制	4969
20	PFAS Master List	美國環保署	US Environmental Protection Agency (EPA) - PFAS Master List of PFAS Substances	-	美國	所有	強制	12034

危害/風險評估總覽與視覺化呈現

N,N-Dimethylformamide

危害評估總覽 ?

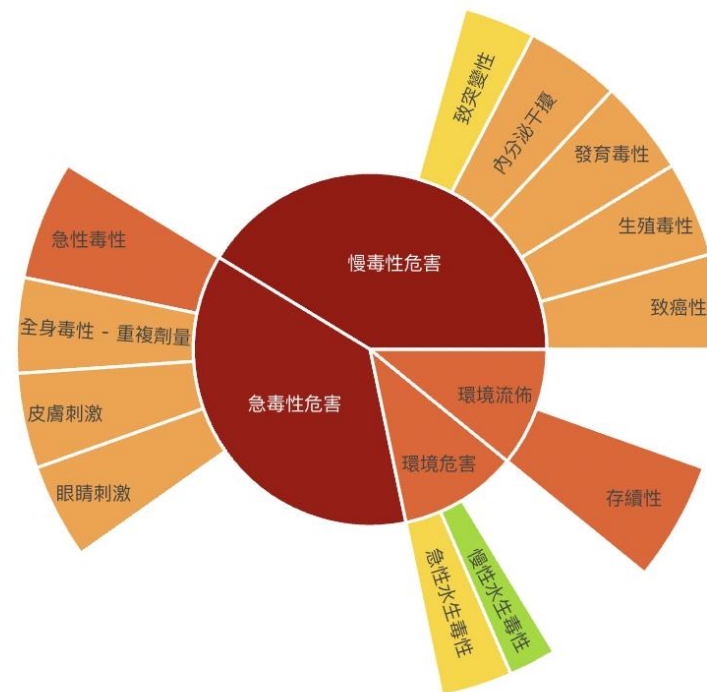


風險等級 ?

1

化學物資訊

- PubChem CID: [6228](#)
- CAS: 68-12-2
- UN NO: 2265
- EC NO: 200-679-5
- 安全資料表 : 
- SMILES: CN(C)C=O



內容選單

1. [風險評估](#)
2. [化學物資訊](#)
3. [危害評估總覽](#)
4. [危害評估整理表](#)
5. [安全替代物](#)

危害評估

- 包含多種來源的危害資訊與規範，可使用篩選器選擇規範適用地區、產業別以及是否有強制性，功能並包含可選擇要查詢化學物質之慢性毒性、急性毒性或環境危害等不同危害類型資料呈現

危害評估整理表 ?

篩選地區	請選擇篩選地區	篩選產業	請選擇篩選產業	具有強制性	是否具有強制性	送出	重置
慢毒性危害		急性危害		環境危害	環境流佈	物理危害	
評估類型		致癌性	致突變性	生殖毒性	發育毒性	內分泌干擾	
危害評估等級		高	中	資料不足 無法分類	資料不足 無法分類	資料不足 無法分類	
危害名稱		危害評估					
致癌性		資料來源：QSAR模型 決策樹 C5.0 可信度 相對低 危害等級分類清楚。 危害評估等級：高 預測值：高度/中度毒性					
		資料來源：QSAR模型 隨機森林 可信度 相對低					

Python
(34+20化學物質資料庫)
GreenScreen® 18評估項目
GHS 29項評估項目

內容選單

- 風險評估
- 化學物資訊
- 危害評估總覽
- 危害評估整理表
- 危害診斷模組
- 安全替代物

預測毒性

• 提供四種計算化學方式預測毒性

危害診斷模組是由以下四種計算化學方法構成，所預測之毒性警示提供參考，仍須與其他資料綜合評估：

1. 子結構警示
2. 相似性警示
3. 交叉參照
4. 分類模型

OECD QSAR Toolbox
US EPA TEST
US EPA CompTox

子結構警示	相似性警示	交叉參照	分類模型
危害名稱	危害評估		
致癌性	資料來源：Classification Model: Tox Tree ? 可信度 相對低 包含多種危害終點，危害等級分類模糊。 額外註解：Negative for genotoxic carcinogenicity:NO; Negative for nongenotoxic carcinogenicity:YES; 預測值：高度/中度毒性		
致癌性	資料來源：Classification Model: Tox Tree ? 可信度 相對低 包含多種危害終點，危害等級分類模糊。 額外註解：Negative for genotoxic carcinogenicity:NO; Negative for nongenotoxic carcinogenicity:YES; 預測值：高度/中度毒性		

內容選單

1. 風險評估
2. 化學物資訊
3. 危害評估總覽
4. 危害評估整理表
5. 危害診斷模組
6. 安全替代物

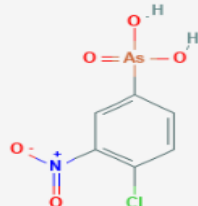
提供安全替代資訊

- 模組依**結構相似性**、**工業用途**以及**實際案例**，探討三種情況下提供可能的安全替代物資訊

安全替代物參考目前安全替代資料庫與軟體運作邏輯，分為以下三類：

- 依照結構相似性分類，需具備
 - 由結構相似性尋找具有相似官能基之化學物質，相近於具有類似功能之化學物，篩選條件為谷本相關係數 0.8 以上。
 - 由風險評估判斷為較低風險之化學物質，如風險評估等級為三級、四級、資料不足。
實務上是否能替代仍須參照該領域知識，並參考其物理化學特性作為選擇參考，若為資料不足（U），則代表目前對於該化學品危害與風險評估較少，故選擇上需多謹慎，並多留意該化學物之相關毒理研究。
- 依照工業用途區分，此清單為整理工業用途較安全化學物，而非可替代此頁面之化學物質，建議可由此頁籤右上方搜尋欄過濾工業用途再行篩選，例如可篩選「抗氧化劑」。資料來源：美國環保署更安全化學物質成分清單 Safer Chemical Ingredients List。
- 依照實際案例探討，資料來源：OECD SAAT

系統依照子結構，列出風險等級為三級（可用、但可尋求更安全替代物）、四級（安全化學物質）、與資料不足（U、無足夠資料可供判別風險等級）[?]

依結構相似性	依工業用途	依案例探討
化學物結構	名稱與CAS	風險等級相似度 (介於0~1，越高越相似)
	(4-chloro-3-nitrophenyl)arsonic acid 5430-08-0	U 0.86

內容選單

- 風險評估
- 化學物資訊
- 危害評估總覽
- 危害評估整理表
- 危害診斷模組
- 安全替代物

TURI P2OASys

US EPA PARIS III

OECD 替代評估工具
(SAAToolbox)

可搜尋項目



化學物

請輸入關鍵字，例如DEHP

化學物
聯合國危險貨物編號
歐盟編號
CAS
危害

202818
化學物

123
危害項目

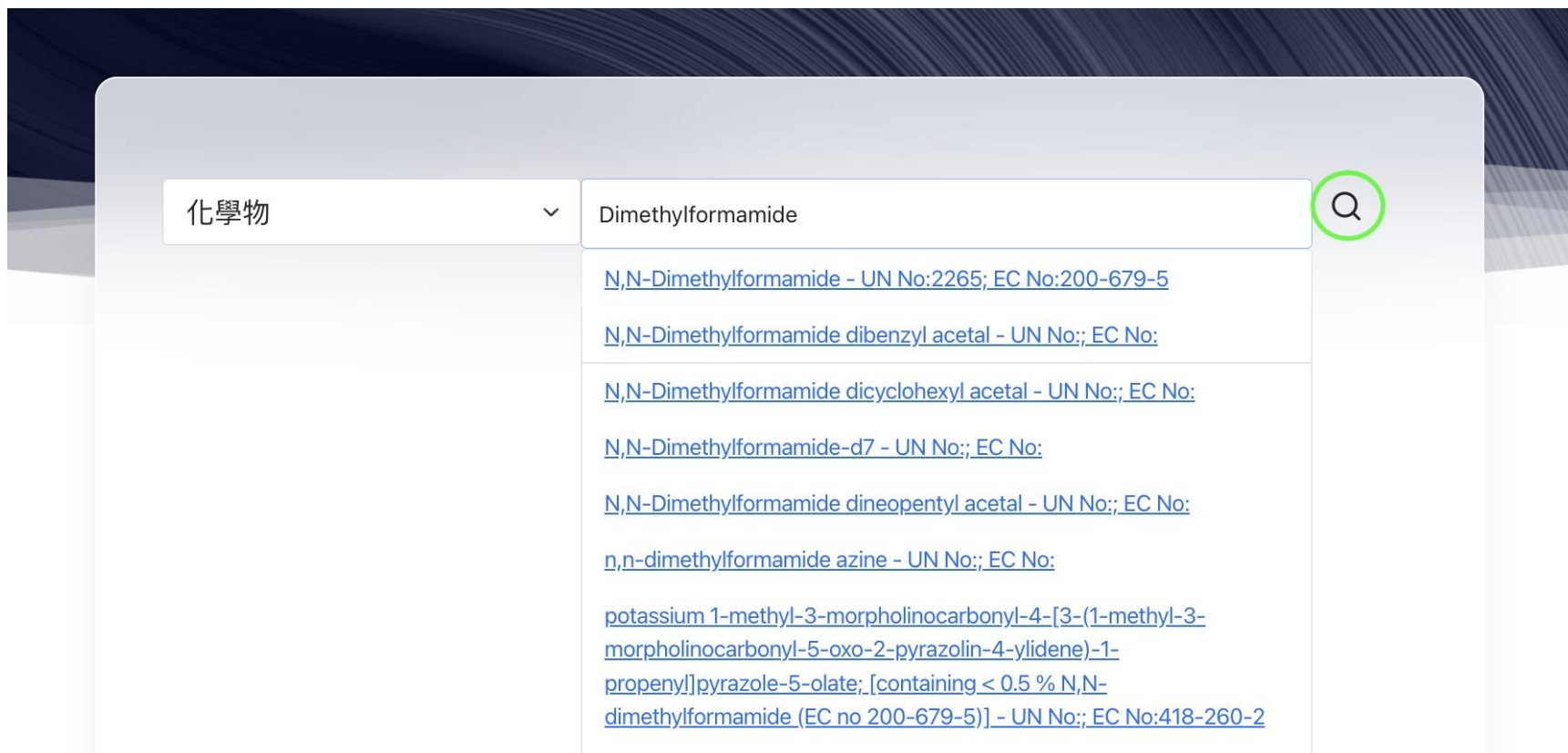
1316247
化學物危害評估數

可根據以下進行搜尋

1. 化學物名稱
2. 聯合國危險貨物編號(UN No)
3. 歐盟編號(EC No)
4. CAS No

輸入快速提供搜尋建議

(ex: 二甲基甲醯胺 Dimethylformamide (DMF))



The screenshot shows a web-based search interface for chemicals. On the left, there is a dropdown menu labeled "化學物" (Chemical) with a downward arrow. To its right is a search input field containing the text "Dimethylformamide". A green circular search icon is positioned to the right of the input field. Below the input field, a list of search suggestions is displayed, each preceded by a blue underlined link. The suggestions include:

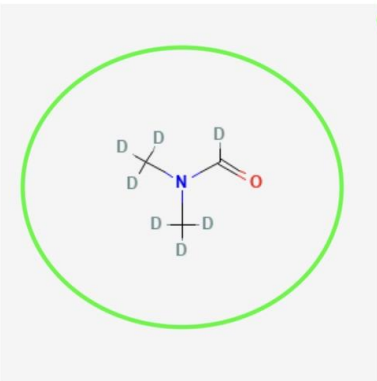
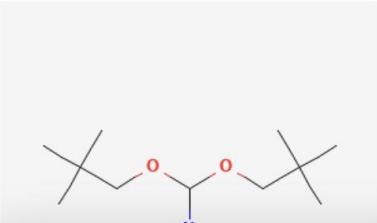
- [N,N-Dimethylformamide - UN No:2265; EC No:200-679-5](#)
- [N,N-Dimethylformamide dibenzyl acetal - UN No:; EC No:](#)
- [N,N-Dimethylformamide dicyclohexyl acetal - UN No:; EC No:](#)
- [N,N-Dimethylformamide-d7 - UN No:; EC No:](#)
- [N,N-Dimethylformamide dineopentyl acetal - UN No:; EC No:](#)
- [n,n-dimethylformamide azine - UN No:; EC No:](#)
- [potassium 1-methyl-3-morpholinocarbonyl-4-\[3-\(1-methyl-3-morpholinocarbonyl-5-oxo-2-pyrazolin-4-ylidene\)-1-propenyl\]pyrazole-5-olate; \[containing < 0.5 % N,N-dimethylformamide \(EC no 200-679-5\)\] - UN No:; EC No:418-260-2](#)

[Home](#) / 搜尋結果

搜尋結果：Dimethylformamide

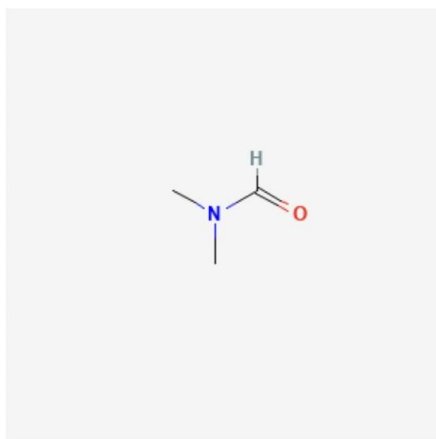
顯示 10 項結果

搜尋:

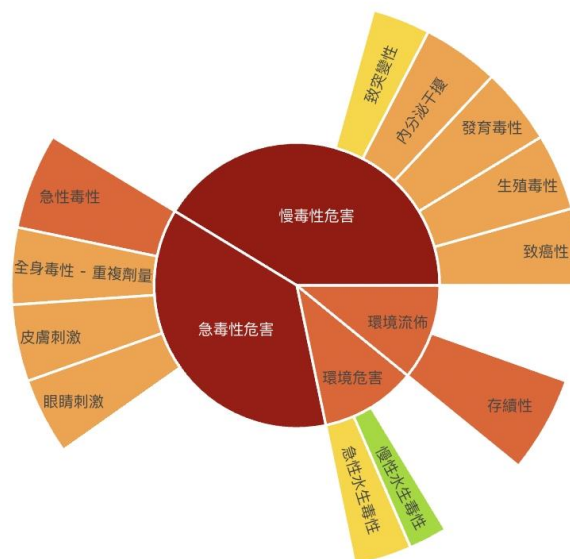
結構	化學物名稱	CAS No.	PubChem CID
	N,N-Dimethylformamide-d7	4472-41-7	78225
	N,N-Dimethylformamide diisopentyl acetal	4909-78-8	78623

危害/風險評估總覽與視覺化呈現

N,N-Dimethylformamide



危害評估總覽 ?



風險等級 ?

1

化學物資訊

- PubChem CID: [6228](#)
- CAS: 68-12-2
- UN NO: 2265
- EC NO: 200-679-5
- 安全資料表: [PDF](#)
- SMILES: CN(C)C=O

內容選單

1. 風險評估
2. 化學物資訊
3. 危害評估總覽
4. 危害評估整理表
5. 安全替代物

危害評估整理表 ?

慢毒性危害	急毒性危害	環境危害	環境流佈	物理危害	
評估類型	致癌性	致突變性	生殖毒性	發育毒性	內分泌干擾
危害評估等級	高	中	中	高	高
危害名稱	危害評估				
致癌性	資料來源：國際癌症研究機構清單  可信度：相對高 危害等級分類清楚。 清單轉譯器等級：1級 第2a類：極可能為人體致癌物 額外註解：國際癌症研究機構（IARC）分類系統中，有較強力證據表明可能會導致人類癌症的化合物				

安全替代物

安全替代物分為兩類，依照工業用途，以及依照子結構列出功能可能可替代之較低風險化學物做為參考，實務上是否能替代仍須參照該領域知識。

依工業用途			依子結構		
顯示	10	▼	項結果		
			搜尋:		
名稱	CAS	工業用途	安全性	註解	
Propanoic acid, 2-hydroxy-, monopotassium salt	996-31-6	加工助劑-添加物	●		
4'-hydroxyacetophenone	99-93-4	防腐劑-抗氧化劑	▲		
1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	99-85-4	芳香劑	▲	缺乏足夠致敏資料	
Terpineol	98-55-5	芳香劑	●		

05

未來展望與挑戰

優化與推廣

持續擴增化學物質資料庫

蒐集國內產業常用化學物質資訊更新至資料庫，以提供模組更全面的化學物質資料支持

持續推廣至相關利害關係人

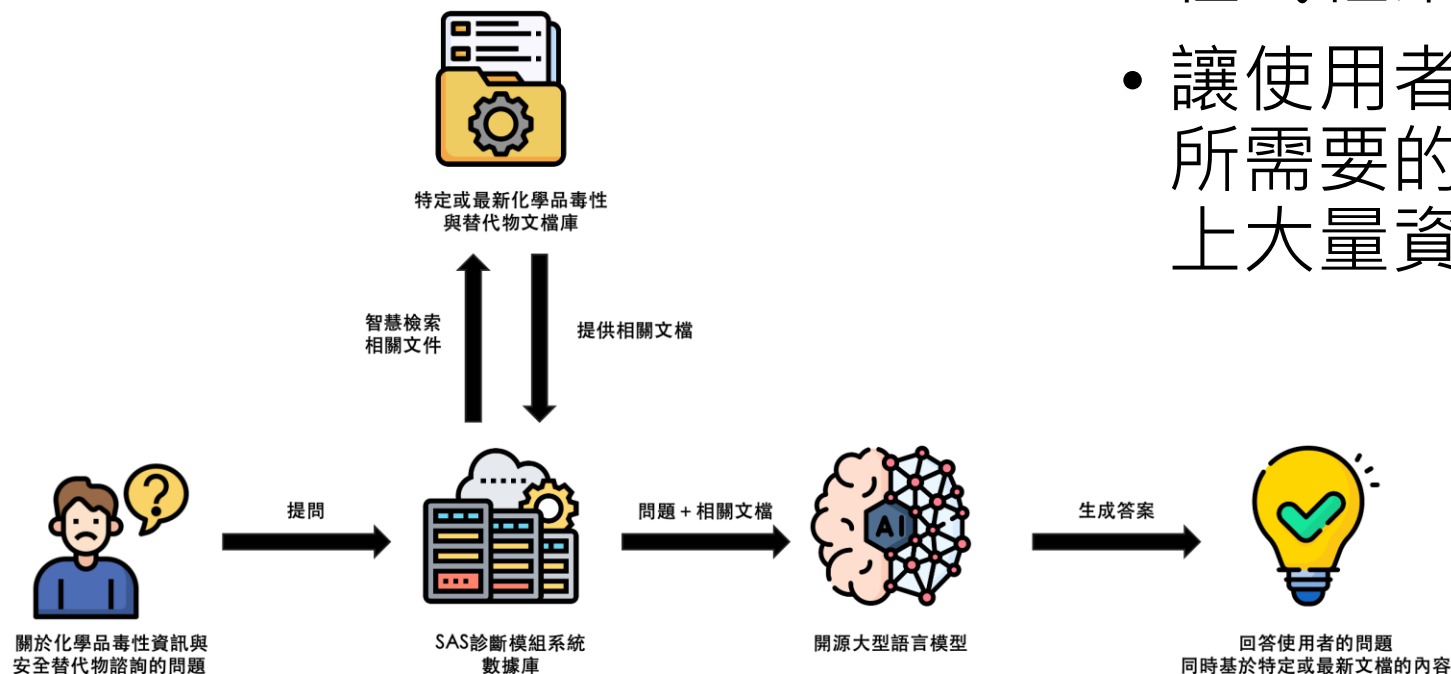
不同產業之上、中、下游供應鏈研發單位、採購單位、管理單位及學術研究單位等

以人類語言描述方式獲取資訊

設計以人工智慧大型語言模型(Large Language Model, LLM)獲取化學物質毒性資訊與安全替代物資訊

與AI系統對談取得所需資料

- AI 大型語言模型的使用簡介

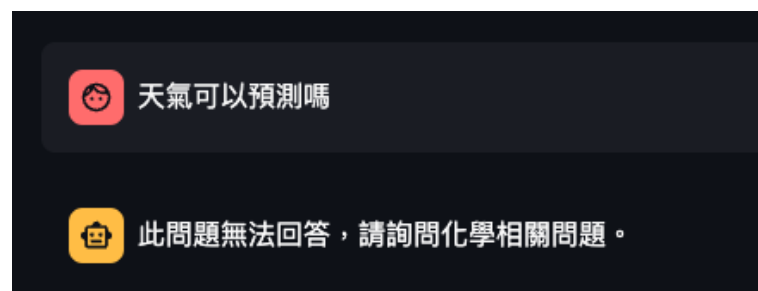
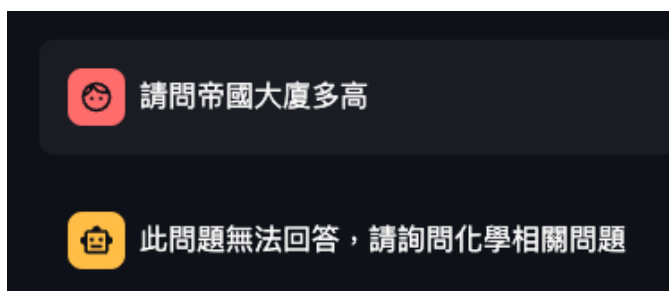


- 透過nVIDIA NeMo GuardRails撰寫程式框架，過濾不恰當的輸入輸出
- 讓使用者可以自然語言提問，獲取所需要的資訊，不需自行瀏覽頁面上大量資料

透過LLM實現使用者與資料庫的互動概念

大型語言模型建構對談機器人

- 目前測試可限定於問題於化學物、危害與安全替代物相關
- 無關的問題會被GuardRails護欄阻擋不予回應





SAS GPT 對談機器人 - 測試版

A SAS GPT powered by ChatGPT-4o & NeMo-Guardrails

🗨️ 對談機器人目前會回覆  Benzene的相關問題，機器人基於事實根據SAS系統整理的世界各國危害資訊以及美國EPA安全替代物回答問題，但仍建議您再次確認。如遇較多人使用時，回覆速度會稍微慢一些，請等候一下，謝謝您。

系統會自動帶入Benzene到您的問題，您可嘗試提問：「有什麼危害資訊」、「有什麼安全替代物」

 請提問化學物質相關問題

 有什麼危害資訊

 根據資料來源，Benzene（苯）具有多種危害，主要包括：

1. **致癌性**：苯被多個機構列為已知或極可能的人類致癌物質。根據歐盟GHS和國際癌症研究機構（IARC）的分類，苯被歸類為致癌性危害第1A或1B級。
2. **致突變性**：苯具有致突變性，這意味著它可能會引起基因突變。根據多個國家和地區（如歐盟GHS、加拿大、澳洲等）的分類，苯被歸類為生殖細胞致突變性危害第1A或1B級。
3. **生殖毒性**：苯對生殖系統具有毒性影響，可能影響生育能力和胎兒發育。美國加州第65號提案將苯列為生殖毒性物質。
4. **發育毒性**：苯可能對發育過程產生毒性影響，特別是在胎兒發育期間。這一點在美國加州第65號提案中有所提及。
5. **內分泌干擾**：苯被列為潛在的內分泌干擾物，可能影響內分泌系統的正常功能。
6. **急性毒性**：苯具有急性毒性，可能對人體造成短期的健康影響。根據資料，苯的急性毒性被列為非常高。
7. **環境危害**：苯對水生環境具有急性和慢性毒性，可能對水生生物造成危害。

這些危害信息來自多個國際和國家機構的公告和清單，如歐洲化學總署、國際癌症研究機構、美國環保署等。

請提問化學物質相關問題



感謝聆聽，敬請指教

Thank You

