No.	質問	回答
1	HESSはOECD QSAR Toolboxのデータを包括していると理解していますが、掲載物質はHESSの方が多いと理解してよろしいですか？	OECD QSARtoolboxは幅広いエンドポイントを対象として現在59種のデータベースに約100,000物質収載されており、HESSは反復投与毒性のみを対象として10データベース約2500物質が収載されております。HESSのデータベースが更新されると、QSARtoolboxに収載されているHESSデータベースも時間差はありますが更新されております。
2	厚労省新しい化学物質管管理の趣旨、目的に化学物質による労働災害は年間450件に拡大【ガン等遅発性疾病は除く】この450件は法令による規制対象外物質が8割、　但し　遅発性疾病　がん、有機粉じんによる肺疾患等化学物質等による重大な職業性疾病も後を絶たな状況と公表された中、これら遅発性疾病対応は健康診断記録を留めるとあります。御講義いただきました　IN SILLCO 評価手法が遅発性疾病【がん、これからの内分泌系疾患】で組まれていること、2027以降の取組について教えていただけますか　また　金属は2008年GHSにほぼ全て金属は酸化物として登録がされています鉄鋼メーカー、非鉄金属メーカーのSDSに鋼材としては、一般的な環境下では、現在の所危険有害性に関する有用な情報なし、ただし、溶接、溶断等に伴うヒュームや研磨等による微粉は呼吸器、目他の粘膜を刺激す場合が有りと記載されています	in silico 評価手法での遅発性疾病への取り組みについてですが、日本では規制への導入にいたっておりませんが、EPAのTSCAの審査ではOncoLogic™が使用されております。また、現在、論文等の発表による研究開発など検討が進められており、発達・生殖毒性に対してDARTが公開されております。
3	続き　・・　金属は切断、研磨等　多くの加工場で微粉が発生する作業です　微粉の大きさにもよりますが　酸化しやすい作業工程、作業環境です細かくなるKん族の微粉が酸化することの評価についてこの手法の活用についてご説明御願いします	一部の金属含有物質において、共通の金属イオン（Zn、Ni、Co等）となる物質は、それが毒性等に寄与する可能性があるためグループ化されることがあります。OECDのGUIDANCE ON GROUPING OF CHEMICALSにおいて、無機化合物のグルーピングついて記載されていますので、参考にしてください。また、ナノ酸化チタンのOECD IATAケーススタディーでは、分子構造に基づいて類似性を判断するだけでなく、結晶タイプやコーティングの有無によりサブグループ化し、in vitro遺伝毒性予測がなされています。

No.	質問	回答
4	化審法少量新規で分解性・蓄積性のQSAR活用されていますが、届出・申出への展開は検討されていないでしょうか。 また、少量新規のQSAR結果と届出申出された物質の実測値との相関性、精度は如何でしょうか。	化審法では新規化学物質の蓄積性を類推で評価する際に、類似物質より蓄積性が低いことの根拠としてQSARを利用することができます。 https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/todoke/shinki/130927_seibutsuchikuseki.pdf 少量新規で申出された物質は、ほとんど実測値がありませんのでQSAR結果との相関性等は分かりかねます。
5	化審法への理解が足りないところがあるためご教示ください。 KATEウェブサイトには「化審法登録には使えない」といった断りがついていたように思います。 化審法でも少量新規の場合はKATE等のQSARデータが使えるということでしょうか。 また，QSAR Toolbox中のトレーニングセットは工業化学品中心でしょうか。医薬品や農薬も含まれていて，医薬品や農薬でも適応領域内のデータが返されるのでしょうか。	化審法の少量新規では、KATEで予測できる環境毒性のデータを提出いただく必要はございません。申出いただいた構造情報をもとに、分解性と蓄積性についてはNITEがQSAR等を利用した評価を行っています。 QSAR Toolboxのデータベースには、工業化学品以外に医薬品や農薬のデータも含まれています。 QSAR Toolboxで利用できるQSARについては、モデルごとに適用範囲が異なりますので、予測対象物質が適用範囲に含まれるか個別にご確認ください。
6	OECD TGに皮膚感作性は採用されましたが、他の採用状況や進めている試験項目はございますか。	Defined ApproachのTGとしては、眼刺激性について2022年6月に発行されております。 https://www.oecd-ilibrary.org/environment/test-no-467-defined-approaches-for-serious-eye-damage-and-eye-irritation_28fe2841-en また、現在進めている試験項目等に関しましては、当機構からは回答いたしかねますので、OECDに直接お問い合わせいただければと思います。