2023/10/11

QSAR Toolboxの概要・操作説明

(独)製品評価技術基盤機構
化学物質管理センター
堀田　麻子

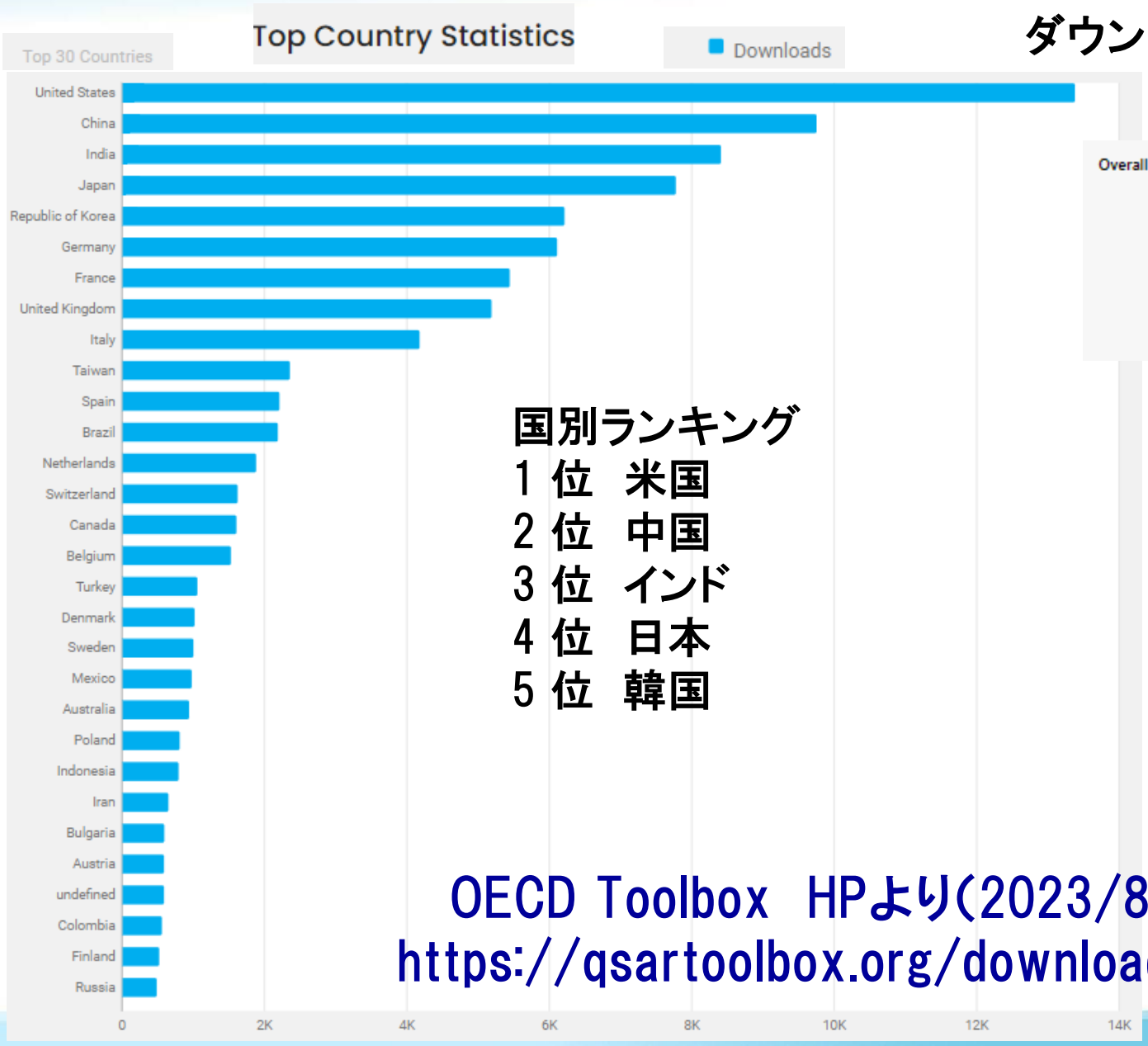
QSAR Toolboxの概要

QSAR Toolboxとは？

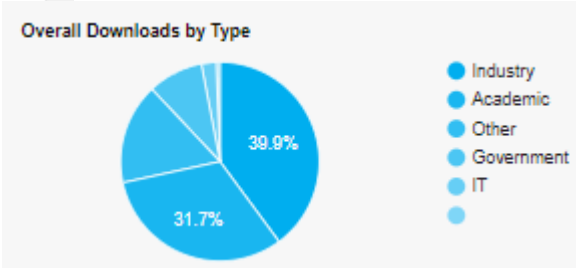
- ✓ OECDがECHA（欧州化学品庁）と共同で開発を行っているカテゴリーアプローチを支援するためのソフトウェア。
- ✓ 物理化学的性状、分解性、蓄積性、生態毒性、反復投与毒性などの様々なエンドポイント*に関するデータベースと化学物質をグループ分けするために必要な機能などが備わっている。
- ✓ 2008年3月にver.1.0が公開され、現行の最新版であるver.4.6 が2023年5月に公開。
- ✓ フリーソフトウェア （OECDのHP上にて公開。ユーザー登録が必要。）
- 公開サイト: https://qsartoolbox.org/

*化学物質の評価の指標とする項目

QSAR Toolboxのユーザは？



ダウンロード数: 約50,000名



国別ランキング
1 位　米国
2 位　中国
3 位　インド
4 位　日本
5 位　韓国

分野別ランキング
1 位　産業
2 位　学術
3 位　そのほか
4 位　行政
5 位　IT

OECD Toolbox　HPより(2023/8/14 確認)
https://qsartoolbox.org/download/statistics/

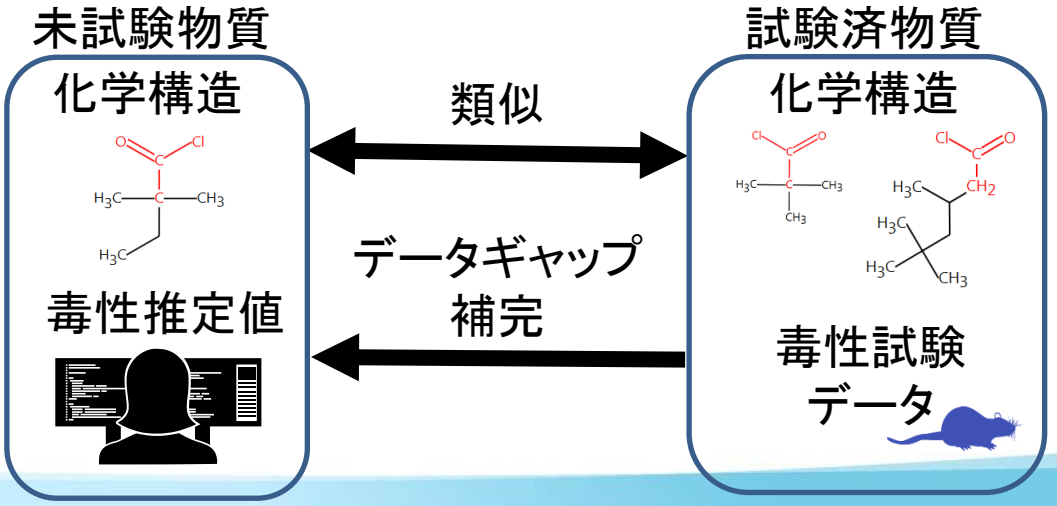
QSAR Toolboxの開発の経緯

- ✓ 2005年頃の開発当初は、各種QSARモデルを集めたライブラリの構築を計画。
- ✓ 開発メンバー間における議論において、QSARモデルの予測結果のみでは行政利用における判断根拠としては不十分であるとの認識が高まる。
- ✓ 最終的には、カテゴリー作成を支援する機能及びカテゴリーアプローチによるデータギャップ補完を支援する機能と共に、カテゴリー化の根拠を第三者に明確に示す機能が主体のシステムとして公開。

“for Grouping chemicals into categories”

QSAR Toolboxの機能概要

- ✓ グルーピングを行うための、毒性発現の原因となる部分構造を認識する機能（プロファイラー）と、各国から提供された各種エンドポイントの実測試験データベースが実装されている。
- ✓ プロファイラーにより、毒性発現の原因となる共通の部分構造を有する、カテゴリーの候補物質群を効率よく探すことができる。また、実測試験データベースから、これら物質群の実測試験データを収集できる。
- ✓ 収集した実測試験データを基に毒性発現の傾向を解析することにより、カテゴリーを構築し、未試験物質のデータを予測（データギャップ補完）することができる。



QSAR Toolboxでできること

実測試験データベース

・物理化学的性状、環境中運命と移送、生態毒性情報、人健康有害性分野における62データベースに、10万物質、300万件の実測データを収載

・日本からは化審法データ（分解性、蓄積性、生態毒性、人健康有害性）、光感作性データを提供

プロファイラー

・70 プロファイラー

・日本からはHESSカテゴリーを提供

QSAR

・254 QSARモデル

・日本からはKATEを提供

その他

・11インベントリー(約318,000物質)

・代謝DBとシミュレーター

実測試験データの検索

代謝産物の探索やシミュレート

QSAR予測の実行

類似物質の検索とカテゴリ構築

類似物質データからデータギャップ補完

データマトリックス・レポートの作成

QSAR Toolbox 4.6の操作説明

立ち上げ(1)

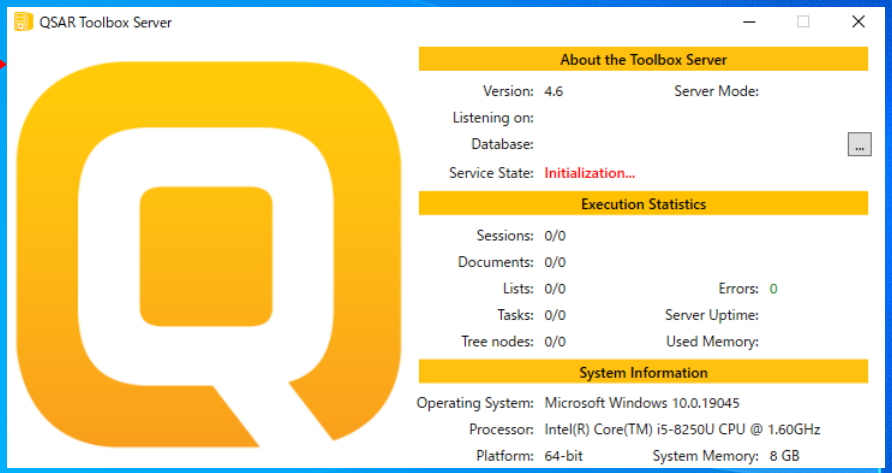
←①ダブルクリック

QSAR Toolbox 4.5 Server

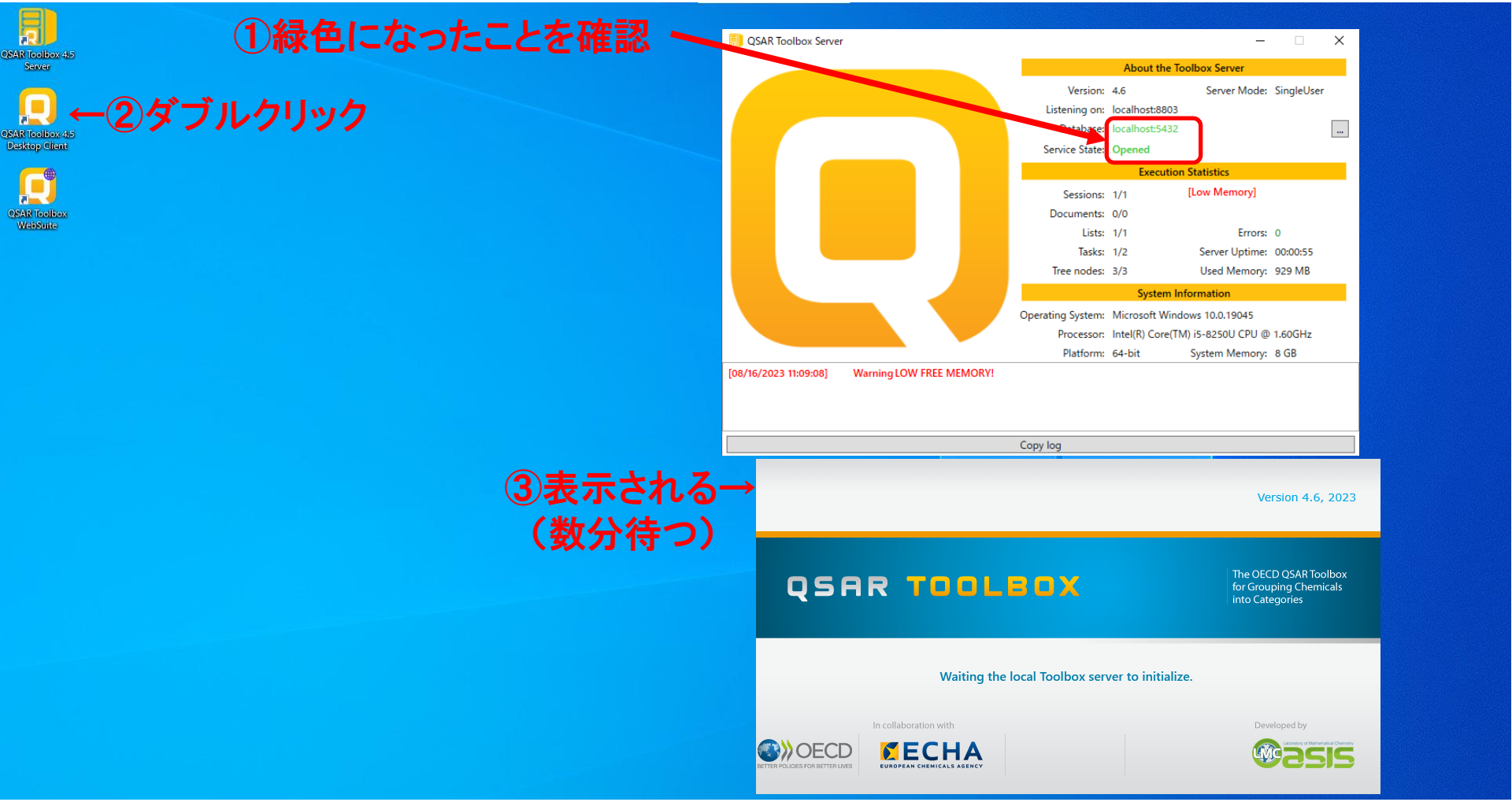
QSAR Toolbox 4.5 Desktop Client

QSAR Toolbox WebSuite

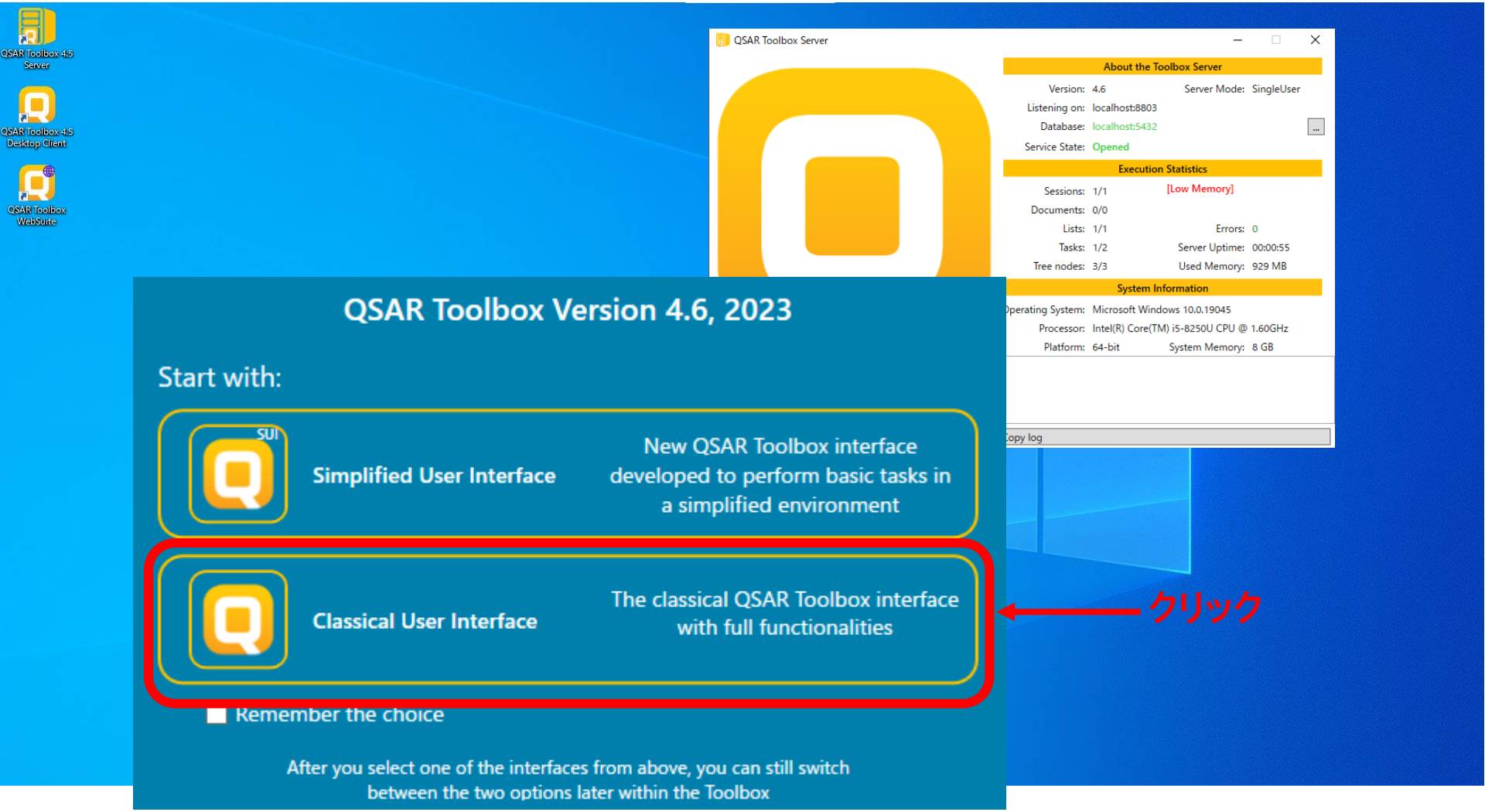
②表示される→



立ち上げ(2)

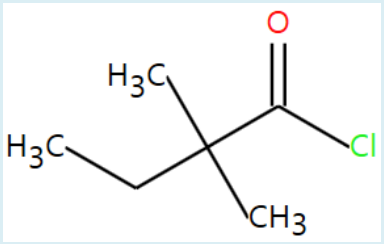

QSAR Toolbox 4.5 Server
QSAR Toolbox 4.5 Desktop Client
QSAR Toolbox WebSuite
①緑色になったことを確認
←②ダブルクリック
QSAR Toolbox Server
About the Toolbox Server
Version: 4.6
Server Mode: SingleUser
Listening on: localhost:8803
localhost:5432
Service State: Opened
Execution Statistics
Sessions: 1/1
[Low Memory]
Documents: 0/0
Lists: 1/1
Errors: 0
Tasks: 1/2
Server Uptime: 00:00:55
Tree nodes: 3/3
Used Memory: 929 MB
System Information
Operating System: Microsoft Windows 10.0.19045
Processor: Intel(R) Core(TM) i5-8250U CPU @ 1.60GHz
Platform: 64-bit
System Memory: 8 GB
[08/16/2023 11:09:08] Warning LOW FREE MEMORY!
Copy log
③表示される→
（数分待つ）
Version 4.6, 2023
QSAR TOOLBOX
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Waiting the local Toolbox server to initialize.
In collaboration with
OECD
ECHA
Developed by
Oasis

立ち上げ(3)


QSAR Toolbox 4.5 Server
QSAR Toolbox 4.5 Desktop Client
QSAR Toolbox WebSuite
QSAR Toolbox Server
About the Toolbox Server
Version: 4.6
Server Mode: SingleUser
Listening on: localhost:8803
Database: localhost:5432
Service State: Opened
Execution Statistics
Sessions: 1/1
[Low Memory]
Documents: 0/0
Lists: 1/1
Errors: 0
Tasks: 1/2
Server Uptime: 00:00:55
Tree nodes: 3/3
Used Memory: 929 MB
System Information
Operating System: Microsoft Windows 10.0.19045
Processor: Intel(R) Core(TM) i5-8250U CPU @ 1.60GHz
Platform: 64-bit
System Memory: 8 GB
Copy log
QSAR Toolbox Version 4.6, 2023
Start with:
SUI
Simplified User Interface
New QSAR Toolbox interface developed to perform basic tasks in a simplified environment
Classical User Interface
The classical QSAR Toolbox interface with full functionalities
Remember the choice
After you select one of the interfaces from above, you can still switch between the two options later within the Toolbox
クリック

リードアクロスの操作例

評価対象物質

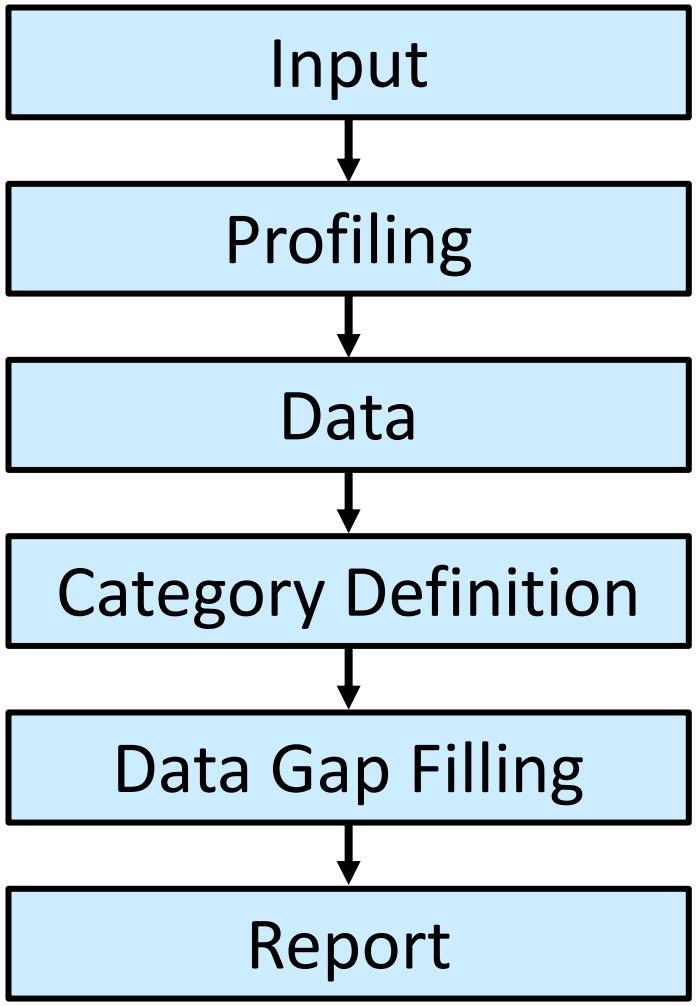


対象エンドポイント

皮膚感作性

CAS RN: 5856－77－9

QSAR Toolboxのワークフロー



①評価対象物質の入力

②カテゴリー属性等の抽出

③DBから実測試験データの抽出

④類似物質データの抽出

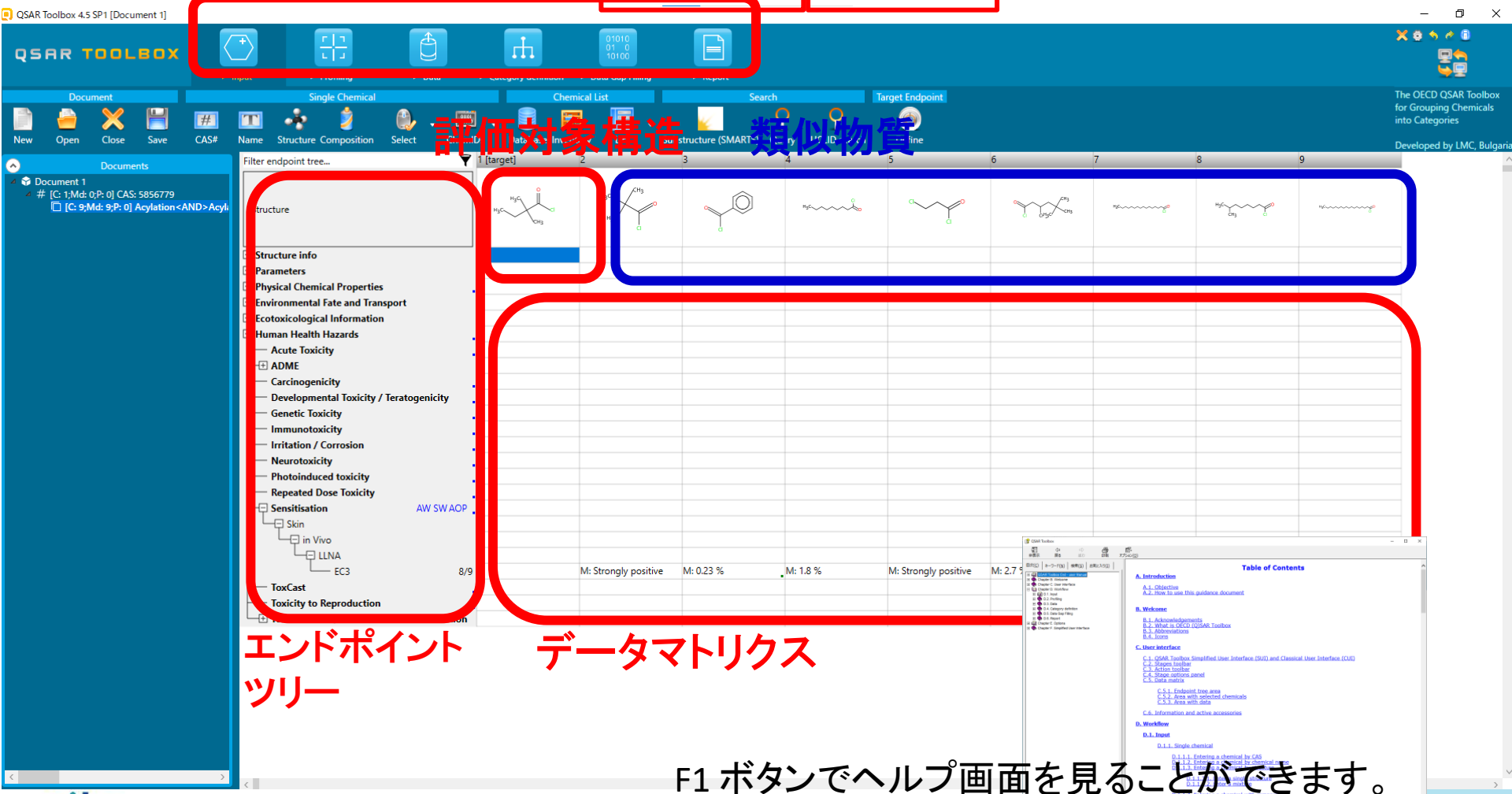
⑤データギャップ補完

⑥レポートの作成

QSAR Toolboxの基本画面構成

ワークフローに対応した6つのモジュール

Input | Profiling | Data | Category Definition | Data Gap Filling | Report

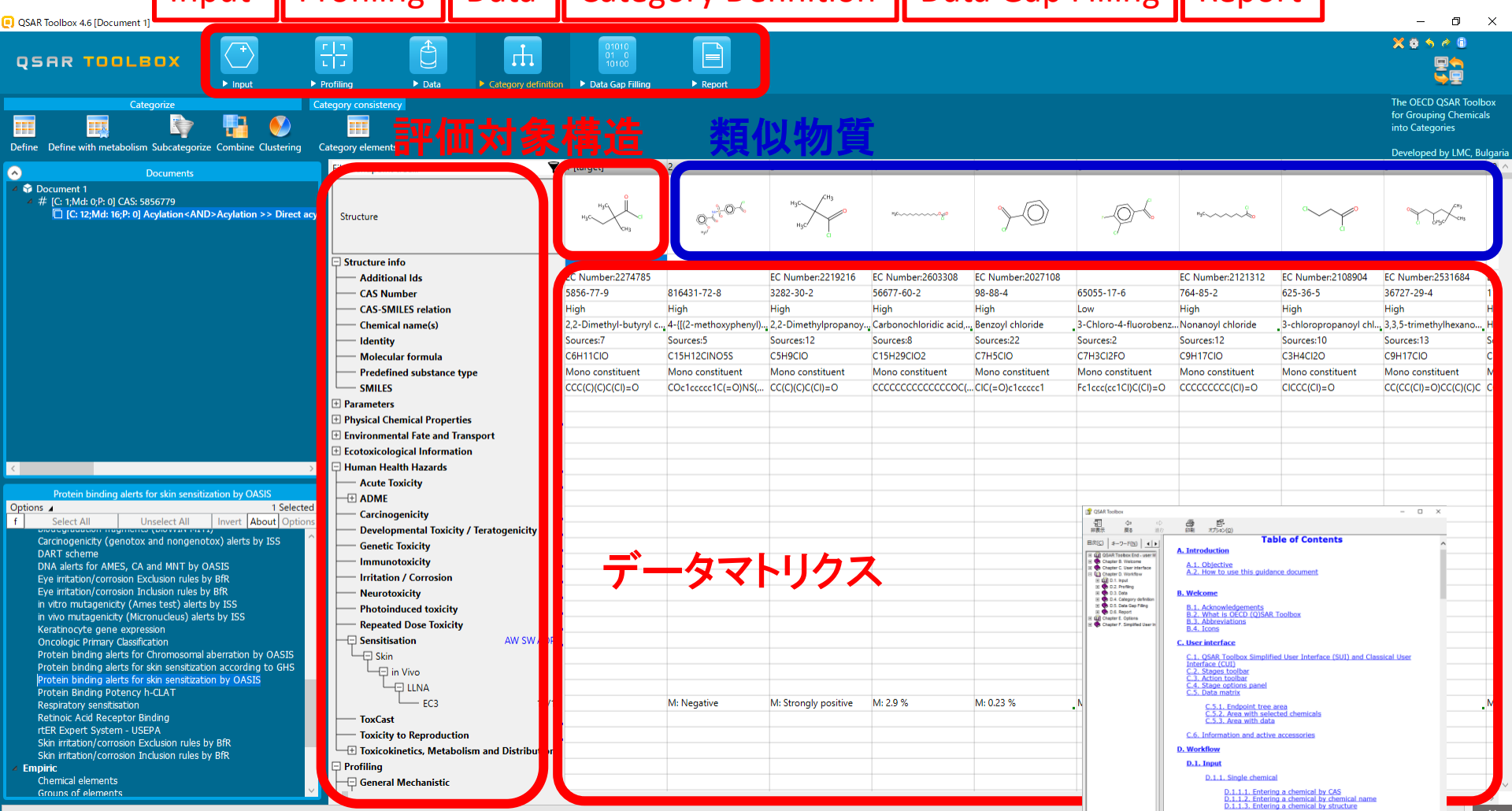


F1 ボタンでヘルプ画面を見ることができます。

QSAR Toolboxの基本画面構成

ワークフローに対応した6つのモジュール

Input | Profiling | Data | Category Definition | Data Gap Filling | Report

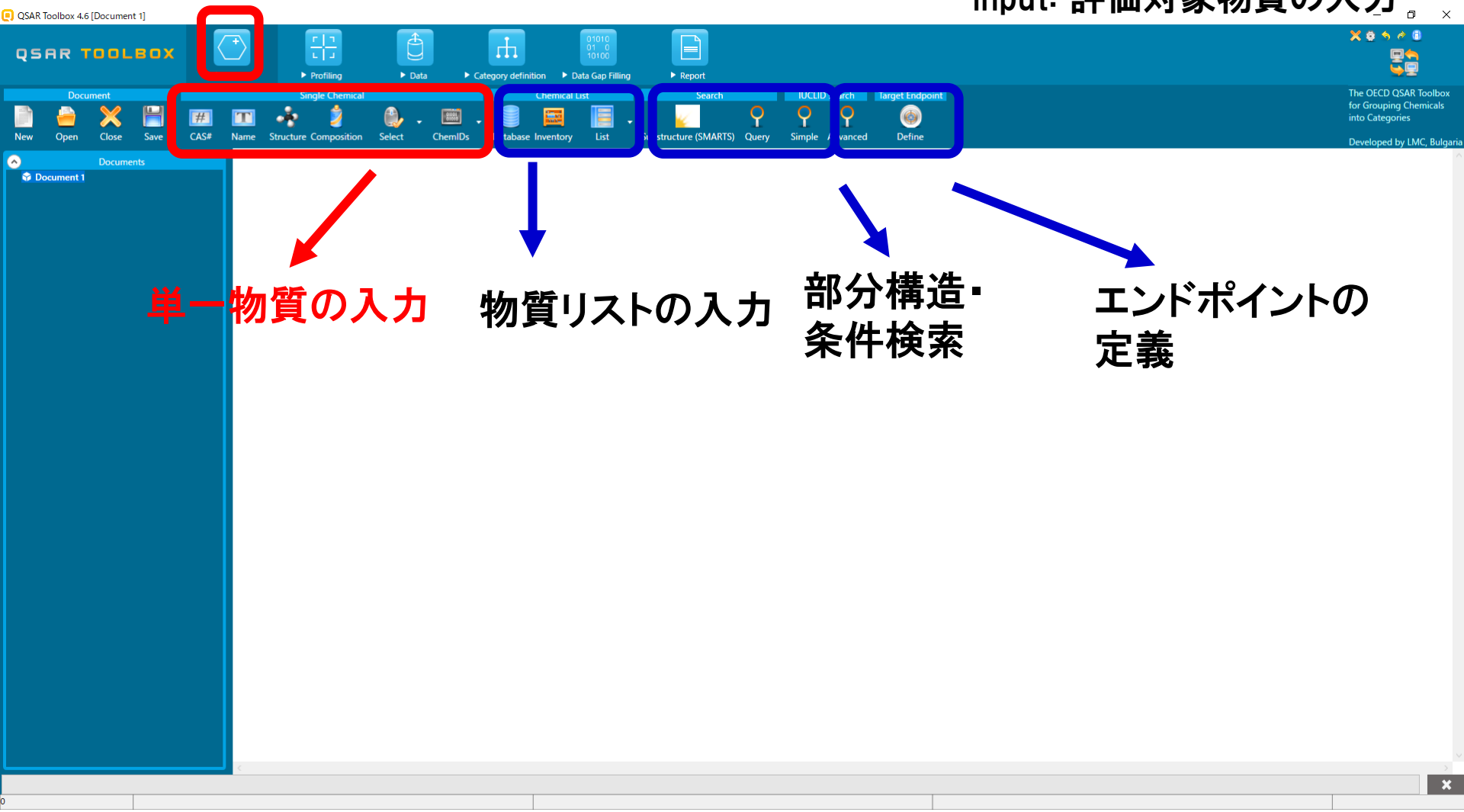


エンドポイントツリー

F1 ボタンでヘルプ画面を見ることができます。

Inputモジュール　画面構成

Input: 評価対象物質の入力



単一物質の入力

物質リストの入力

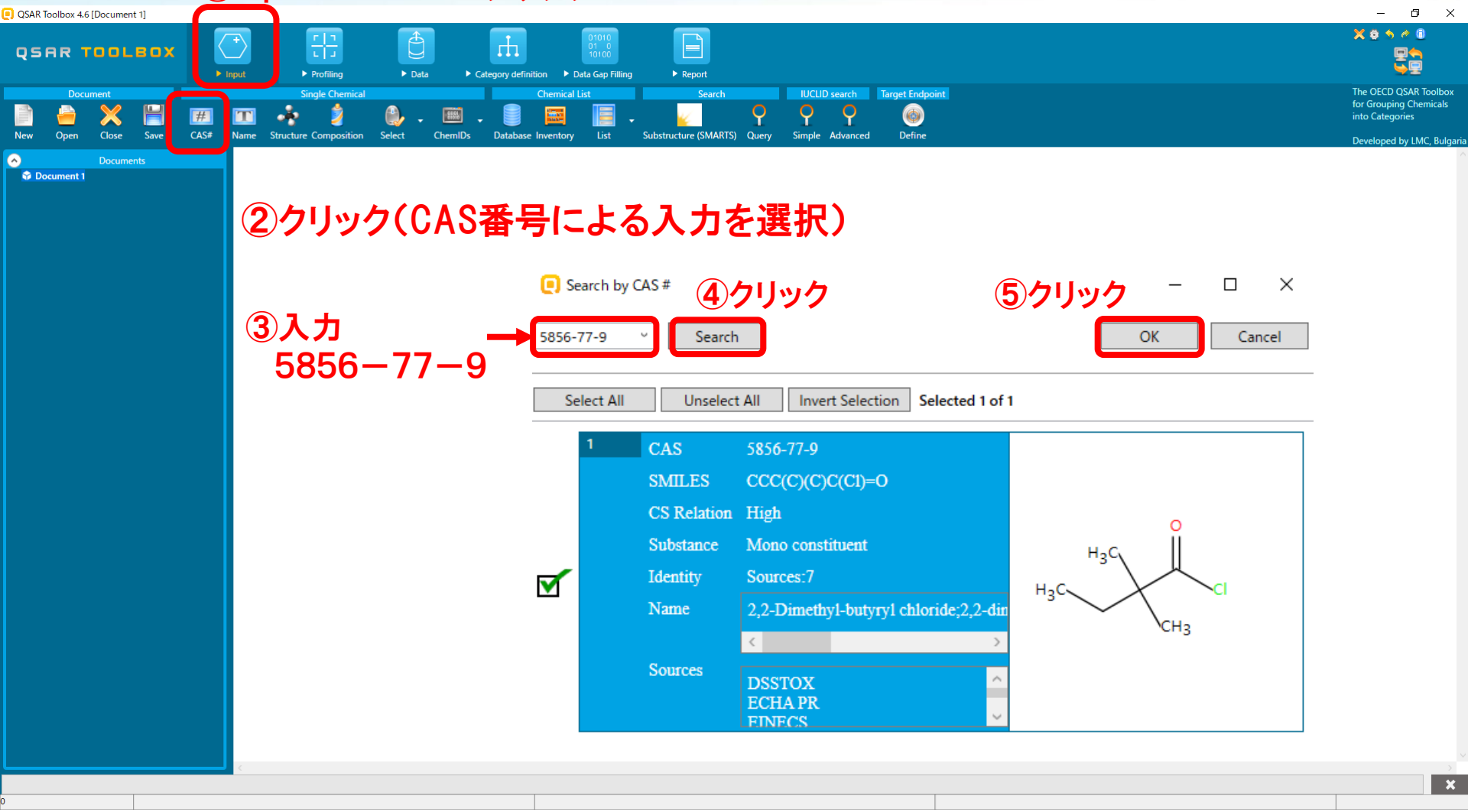
部分構造・条件検索

エンドポイントの定義

評価対象物質の入力

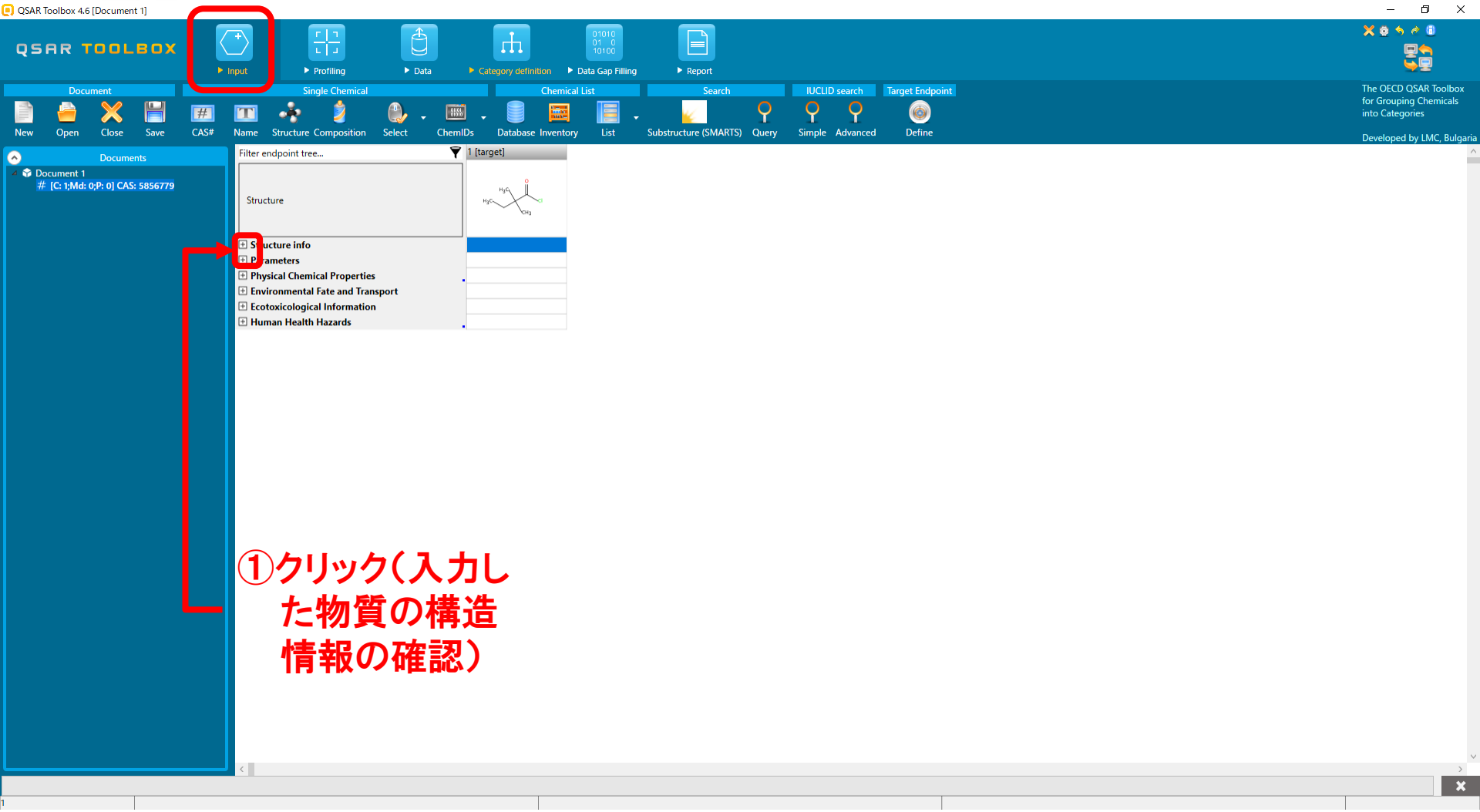
操作説明

①Inputモジュールクリック



評価対象物質の入力（結果）

操作説明



①クリック（入力した物質の構造情報の確認）

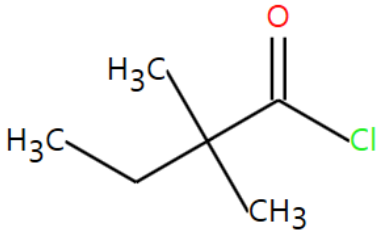
Profilingモジュール　画面構成

Profiling: カテゴリー属性等の抽出

プロファイラーによる該当するカテゴリーの特定

皮膚感作性のための蛋白結合アラートプロファイラー

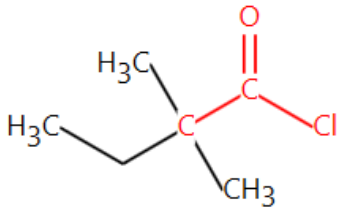
評価対象物質



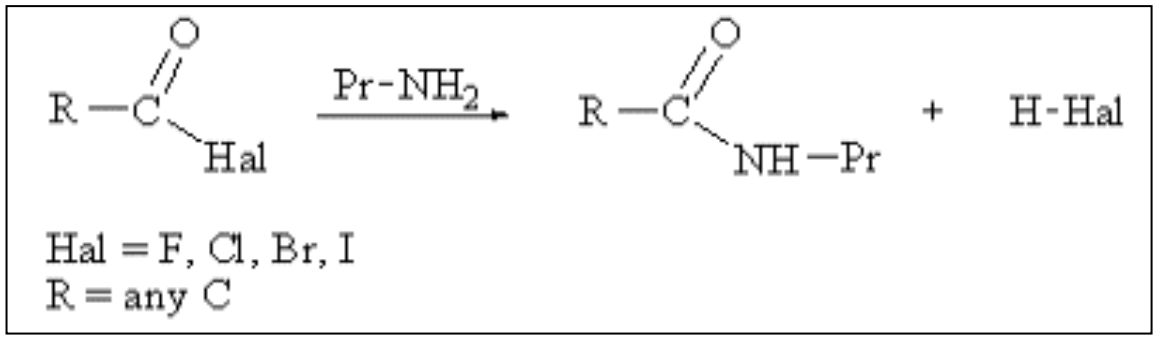
プロファイラ

皮膚感作性のための蛋白質結合アラート

プロファイリング結果



>> (Thio)Acyl and (thio)carbamoyl halides and cyanides

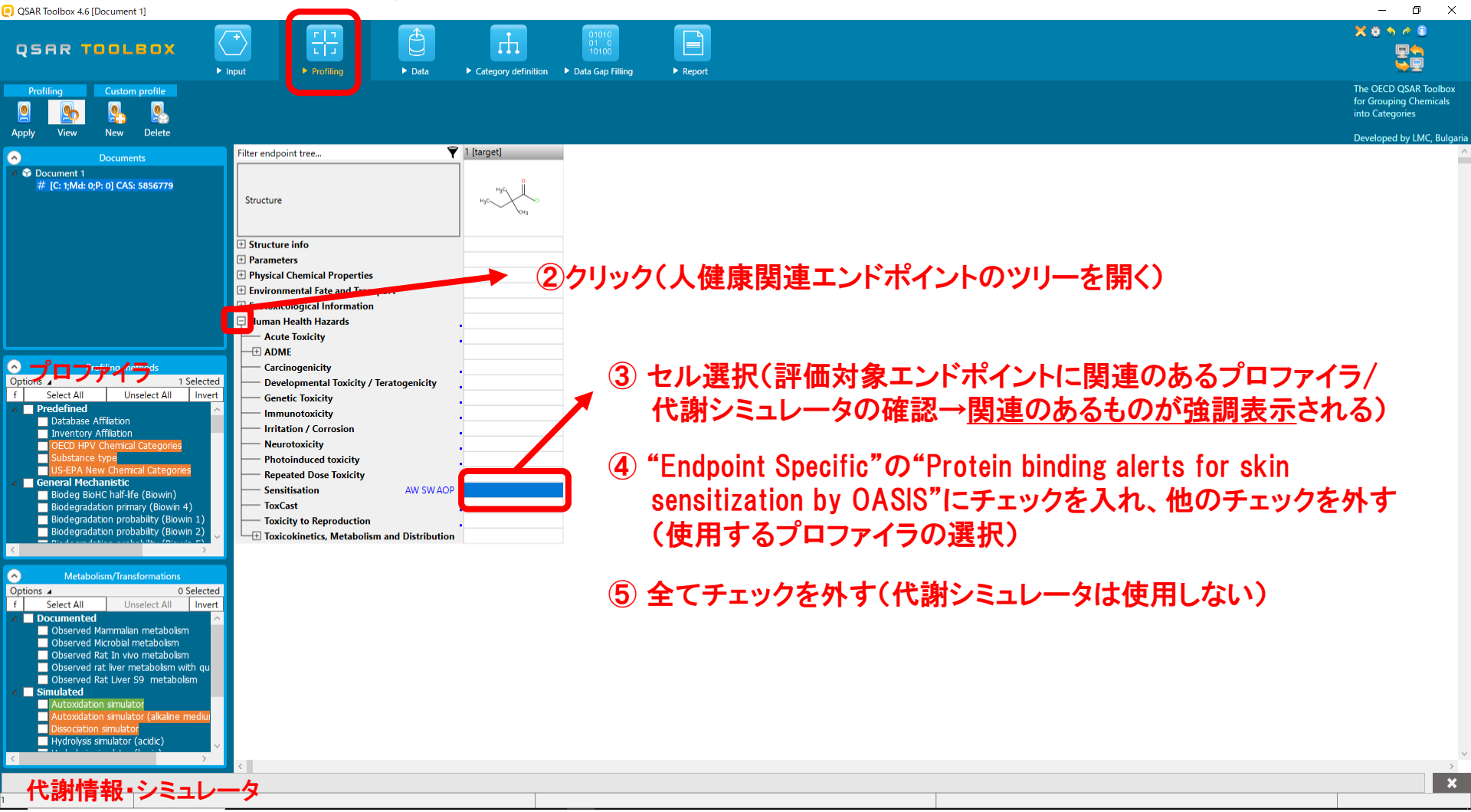


毒性発現の原因となる部分構造を特定

プロファイリング

操作説明

①Profilingモジュールクリック



②クリック（人健康関連エンドポイントのツリーを開く）

プロファイラ

③ セル選択（評価対象エンドポイントに関連のあるプロファイラ/代謝シミュレータの確認→関連のあるものが強調表示される）

④ “Endpoint Specific”の“Protein binding alerts for skin sensitization by OASIS”にチェックを入れ、他のチェックを外す（使用するプロファイラの選択）

⑤ 全てチェックを外す（代謝シミュレータは使用しない）

代謝情報・シミュレータ

緑　　：評価対象エンドポイントのためのデータや知見により開発されたプロファイラ

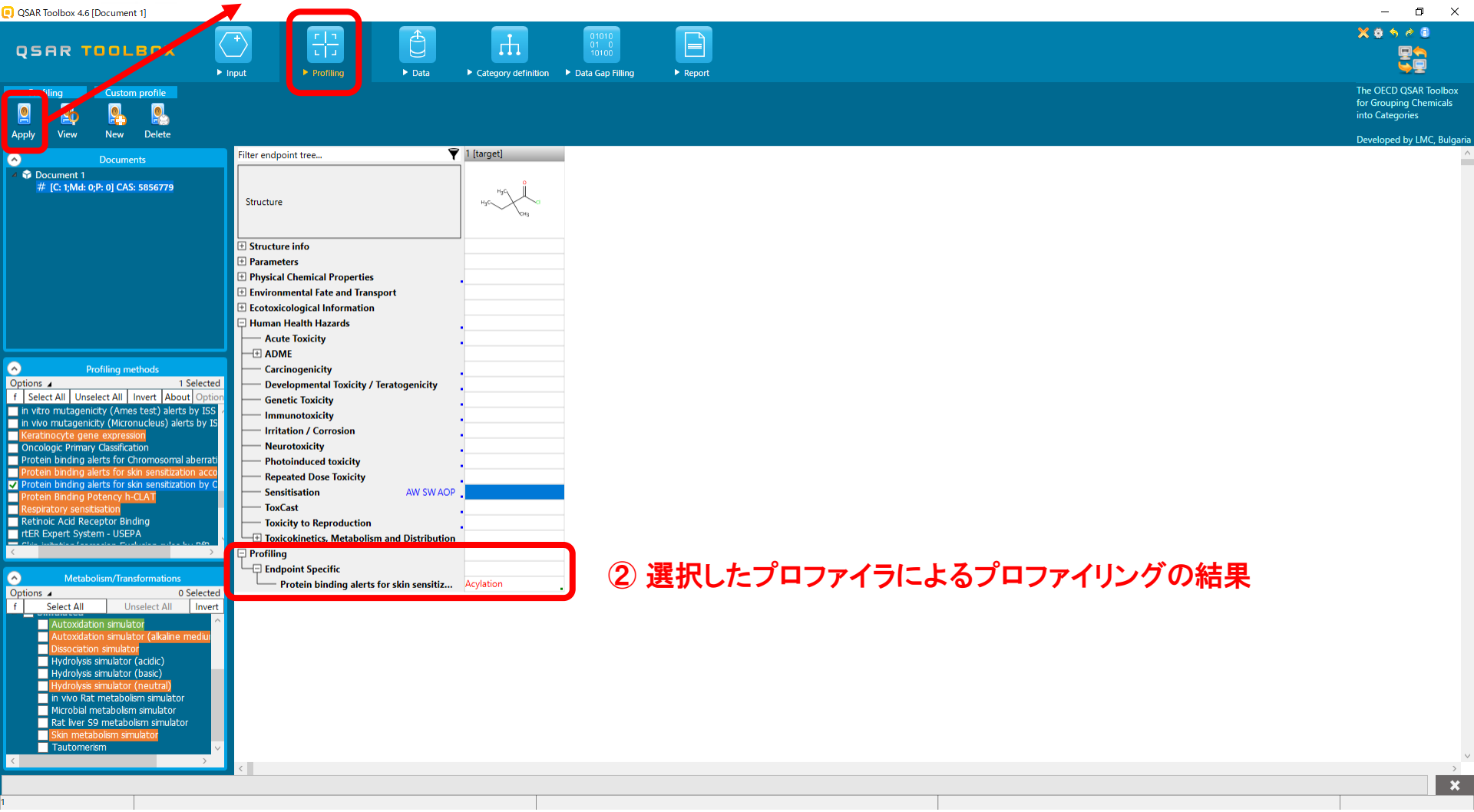
オレンジ：評価対象エンドポイントに、何らかの形で関係性があるデータや知見により開発されたプロファイラ

強調なし□：評価対象エンドポイントと開発に用いられたデータや知見の間に関連性があるというエビデンスがないプロファイラ

プロファイリング

操作説明

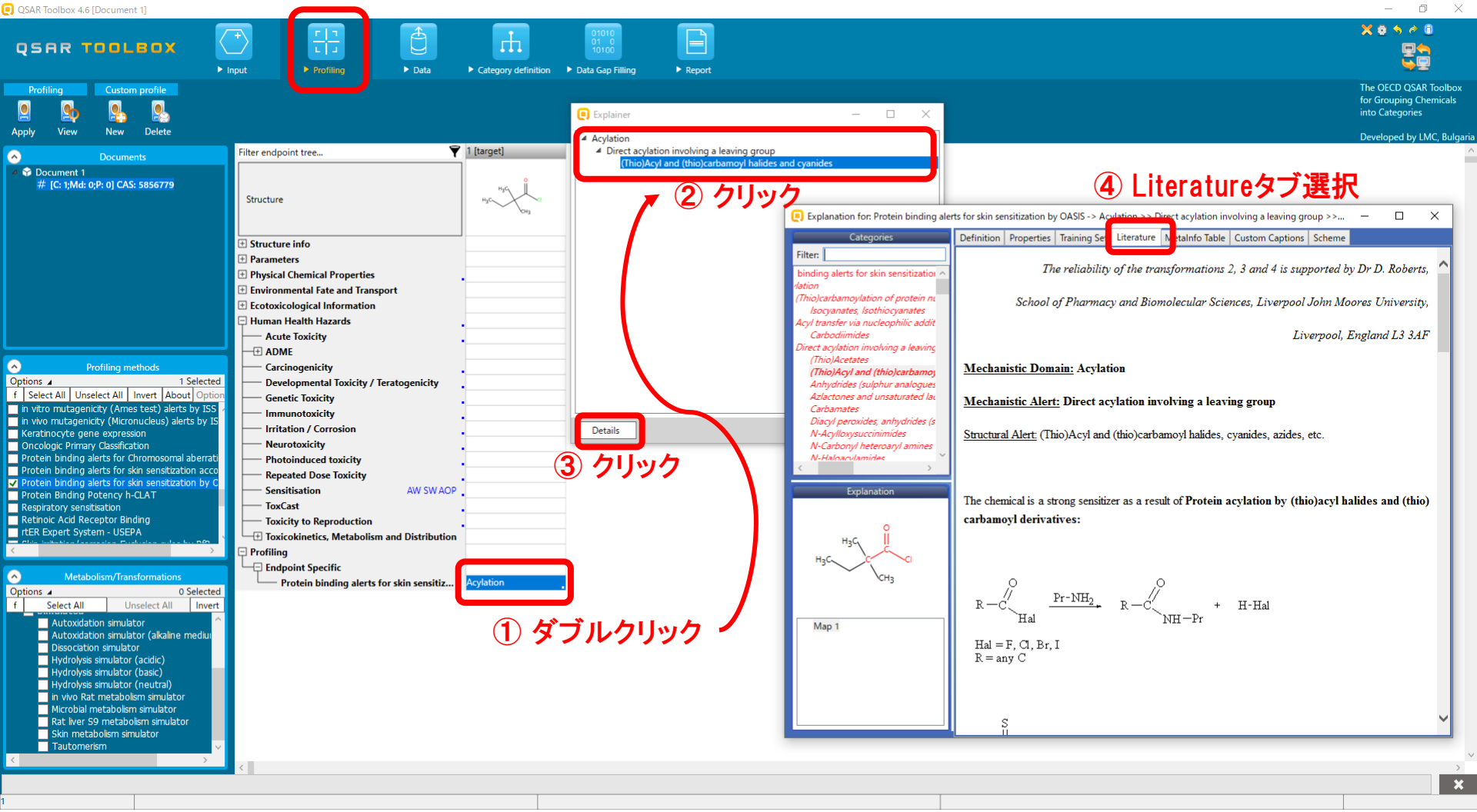
① クリック（選択したプロファイラによるプロファイリングの実行）



② 選択したプロファイラによるプロファイリングの結果

プロファイリング結果の詳細の確認

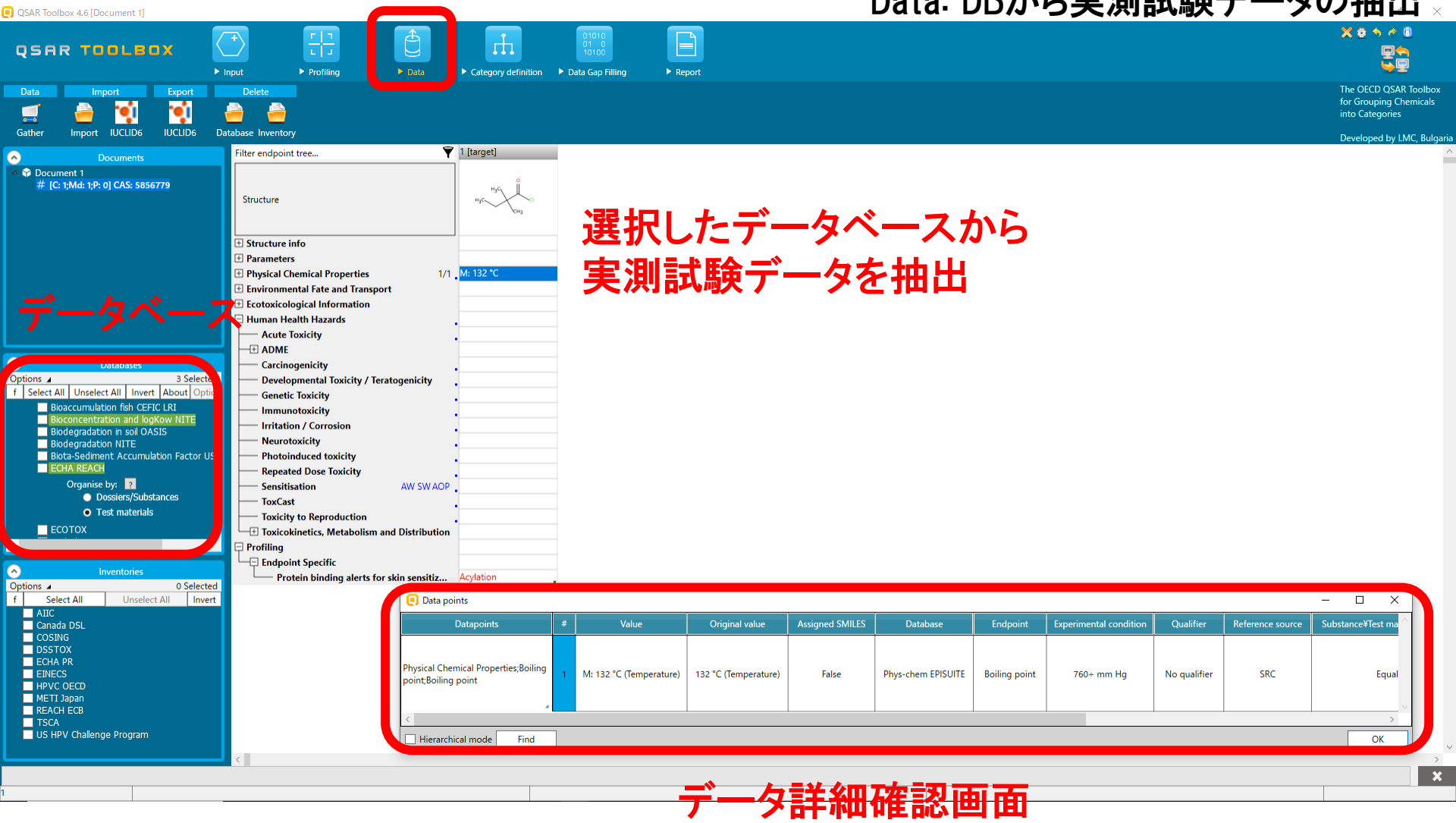
操作説明



⑤ アシルハライド基が蛋白結合を誘発するグループに属することを確認

Dataモジュール　画面構成

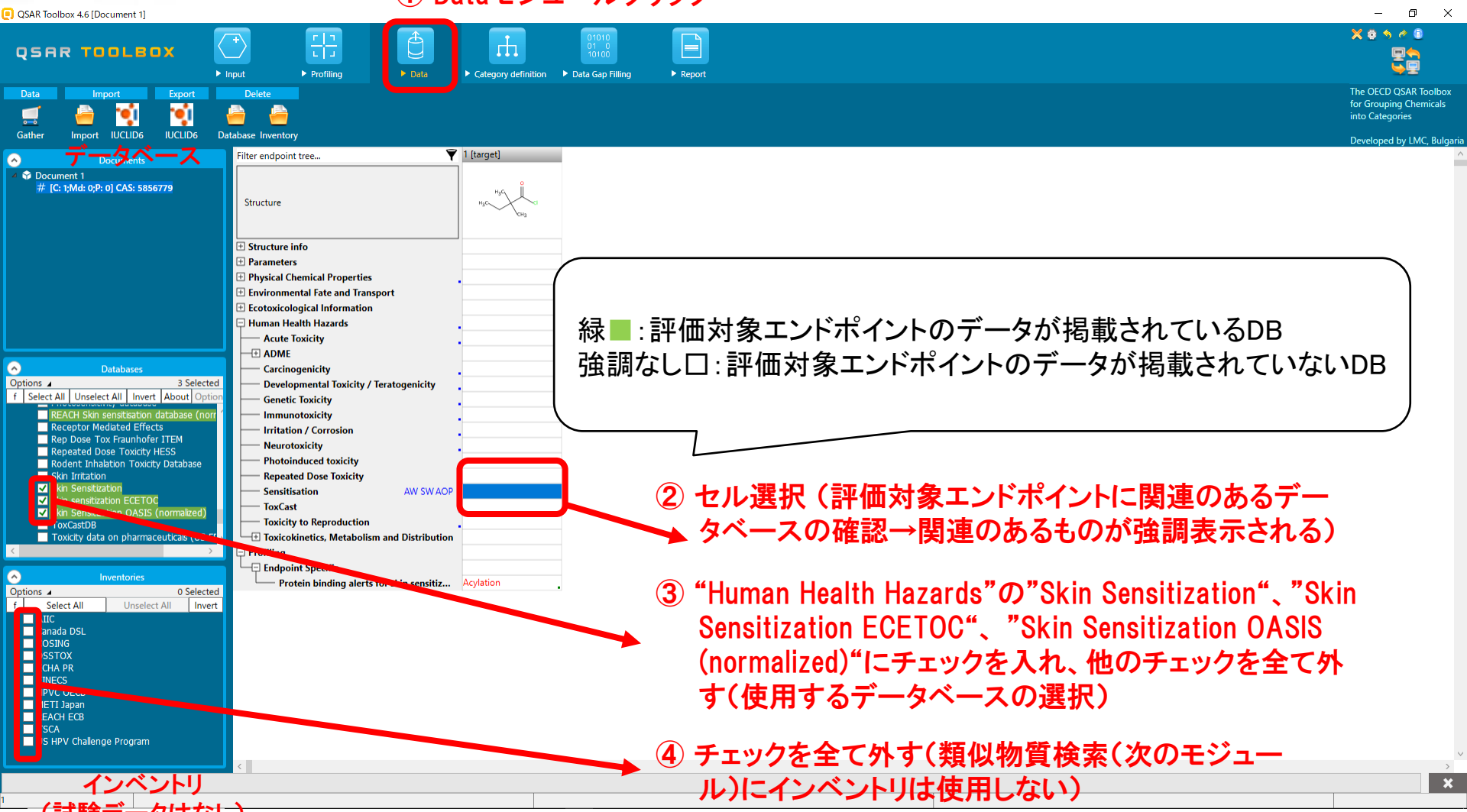
Data: DBから実測試験データの抽出



試験データの取得

操作説明

① Dataモジュールクリック



緑■：評価対象エンドポイントのデータが掲載されているDB
強調なし□：評価対象エンドポイントのデータが掲載されていないDB

② セル選択（評価対象エンドポイントに関連のあるデータベースの確認→関連のあるものが強調表示される）

③ “Human Health Hazards”の”Skin Sensitization“、”Skin Sensitization ECETOC“、”Skin Sensitization OASIS (normalized)“にチェックを入れ、他のチェックを全て外す（使用するデータベースの選択）

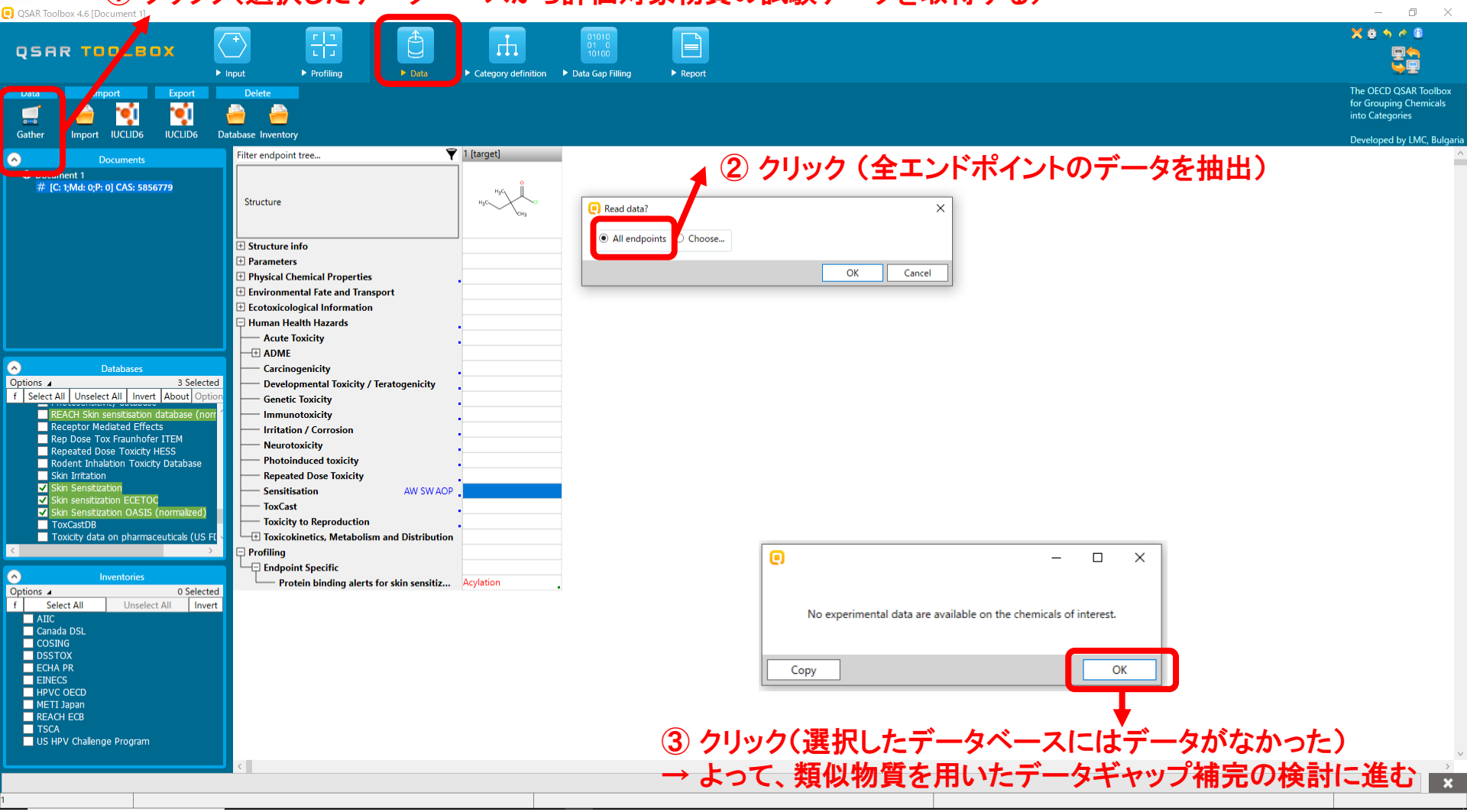
④ チェックを全て外す（類似物質検索（次のモジュール）にインベントリは使用しない）

インベントリ
（試験データはなし）

試験データの取得

操作説明

① クリック（選択したデータベースから評価対象物質の試験データを取得する）

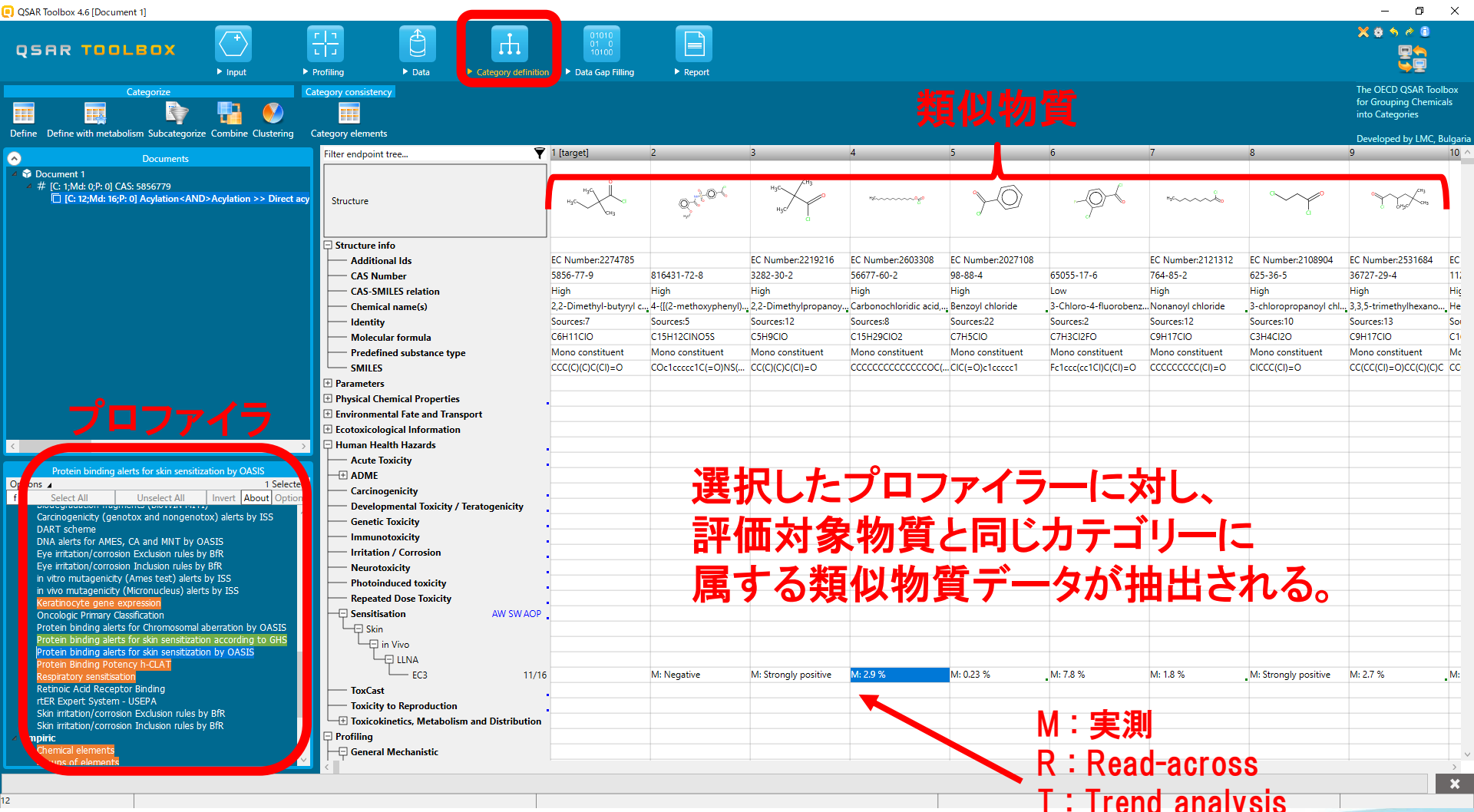


② クリック（全エンドポイントのデータを抽出）

③ クリック（選択したデータベースにはデータがなかった）
→ よって、類似物質を用いたデータギャップ補完の検討に進む

Category Definitionモジュール　画面構成

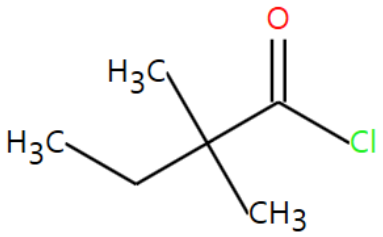
Category Definition: 類似物質データの抽出
（類似物質：選択したプロファイラーにより、同じカテゴリーに属する物質）



抽出される類似物質

皮膚感作性のための蛋白結合アラートプロファイラー

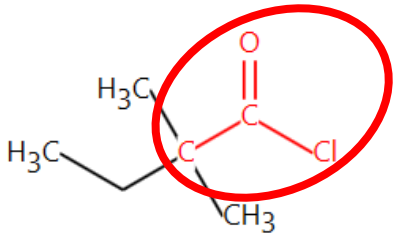
評価対象物質



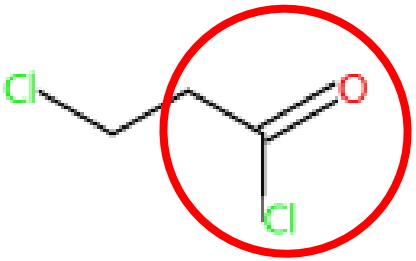
プロファイラ

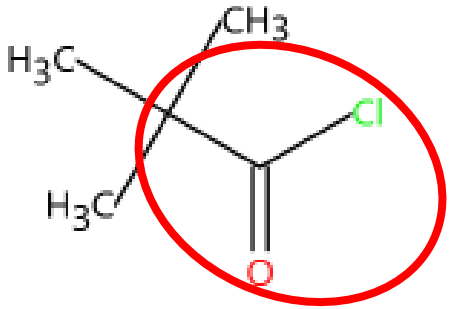
皮膚感作性のための
蛋白質結合アラート

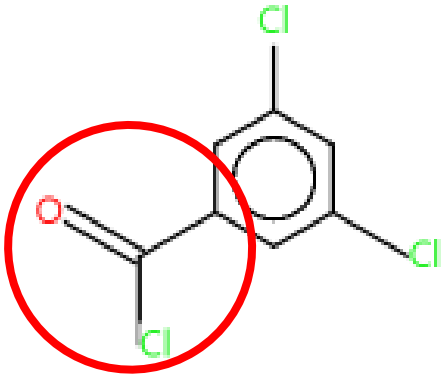
プロファイリング結果



>> (Thio)Acyl and (thio)carbamoyl halides and cyanides





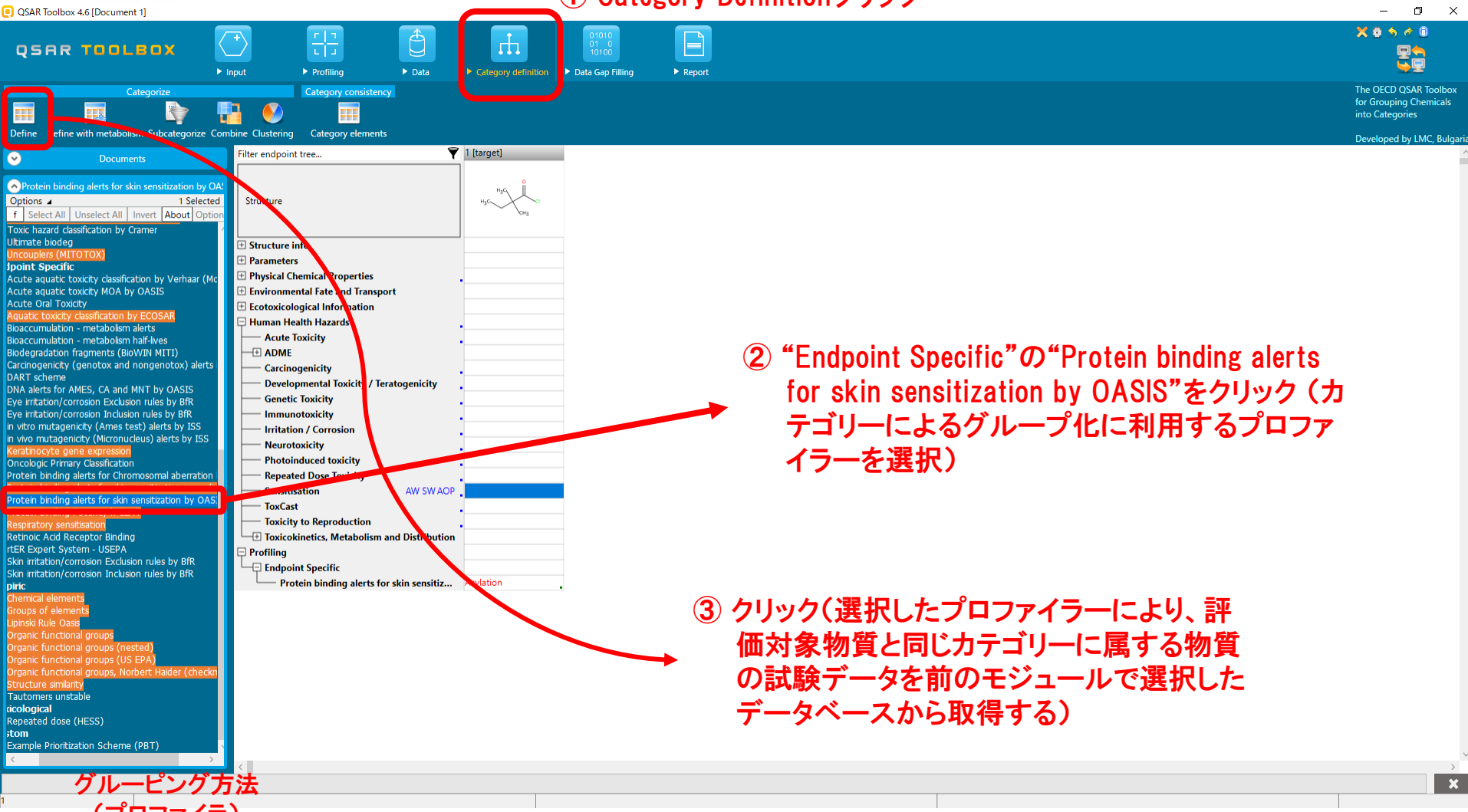


同じカテゴリの類似物質が抽出される

カテゴリー定義

操作説明

① Category Definitionクリック



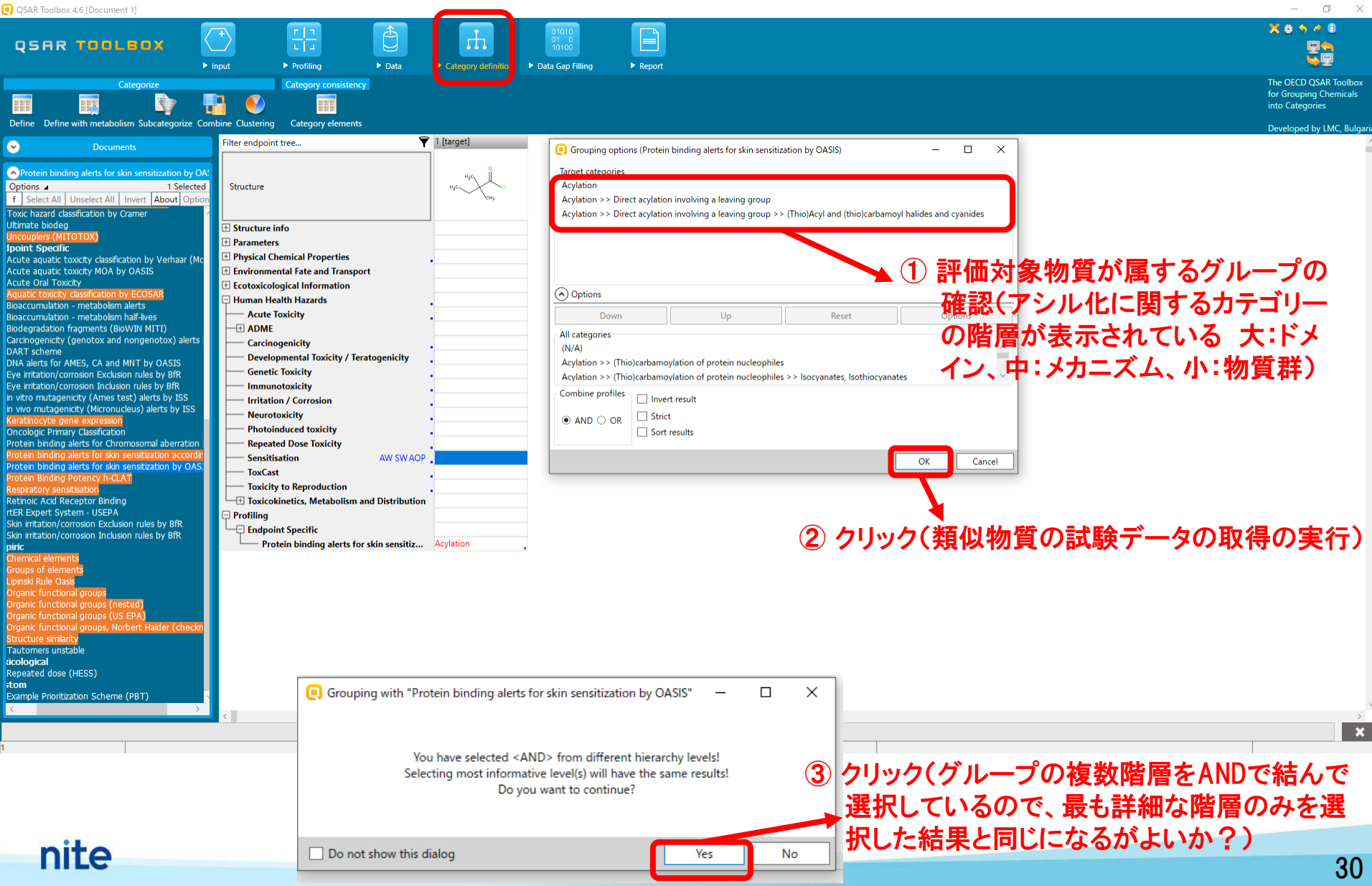
② “Endpoint Specific”の“Protein binding alerts for skin sensitization by OASIS”をクリック（カテゴリーによるグループ化に利用するプロファイラーを選択）

③ クリック（選択したプロファイラーにより、評価対象物質と同じカテゴリーに属する物質の試験データを前のモジュールで選択したデータベースから取得する）

グルーピング方法（プロファイラ）

カテゴリー定義

操作説明



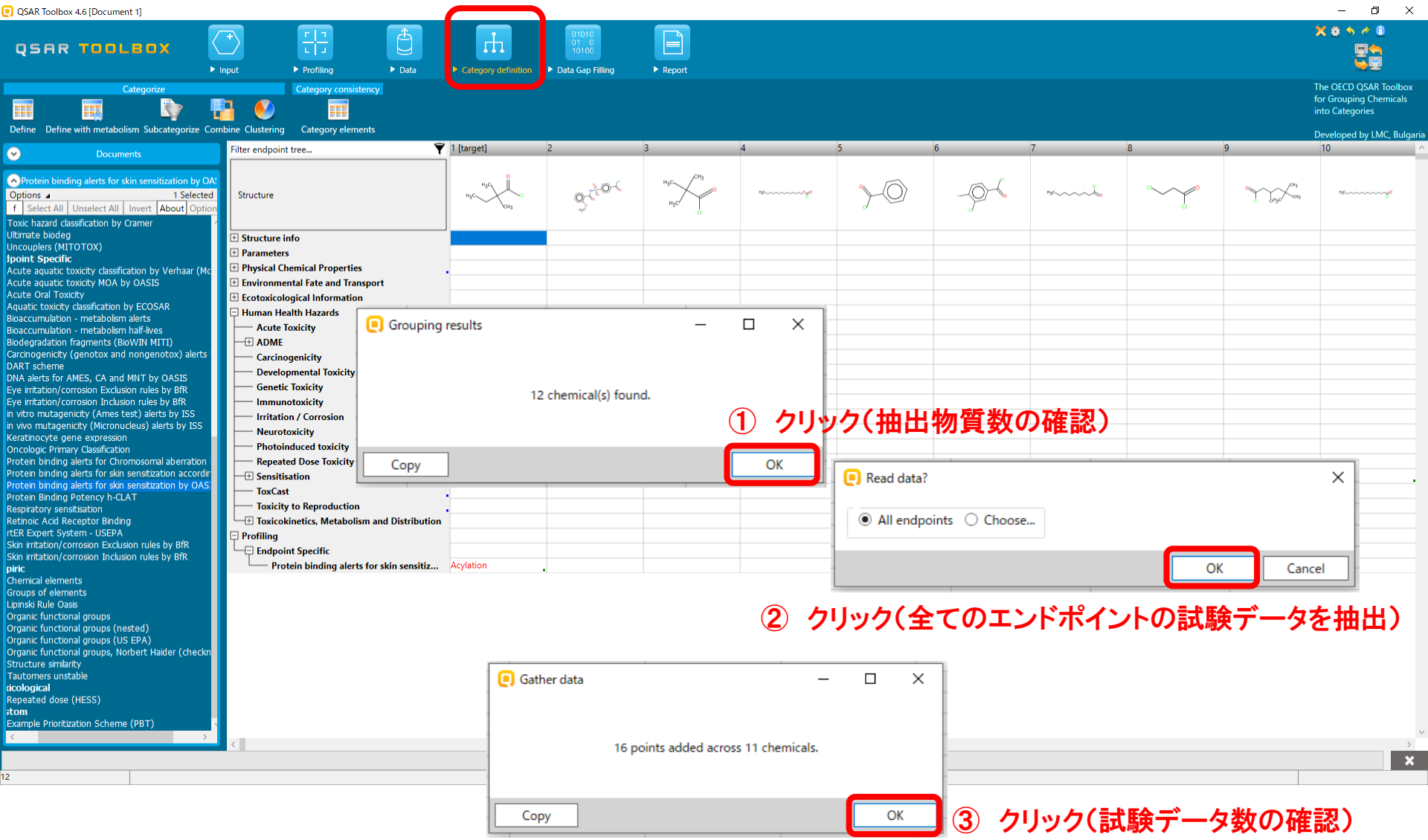
① 評価対象物質が属するグループの確認（アシル化に関するカテゴリーの階層が表示されている　大:ドメイン、中:メカニズム、小:物質群）

② クリック（類似物質の試験データの取得の実行）

③ クリック（グループの複数階層をANDで結んで選択しているので、最も詳細な階層のみを選択した結果と同じになるがよいか？）

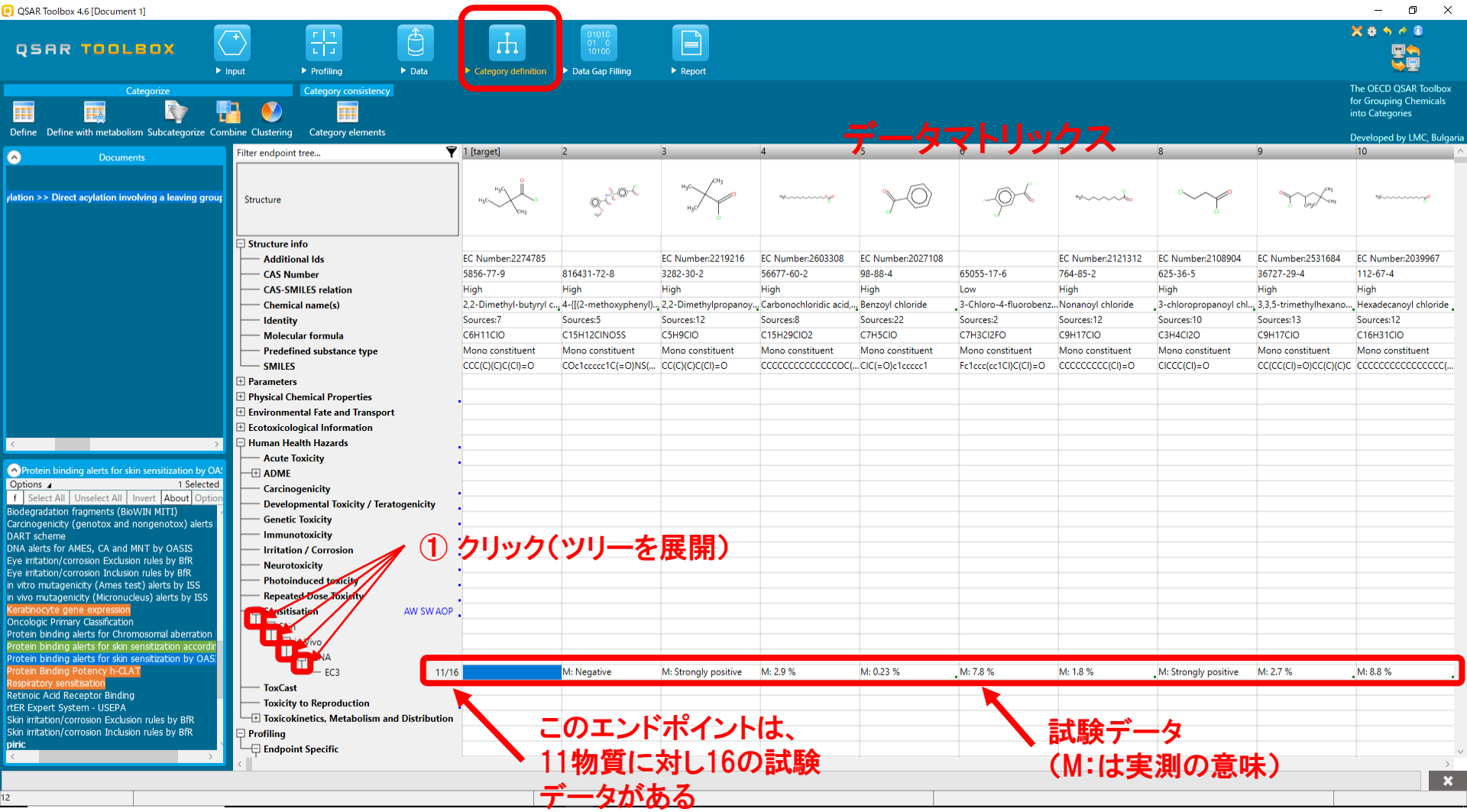
カテゴリー定義

操作説明



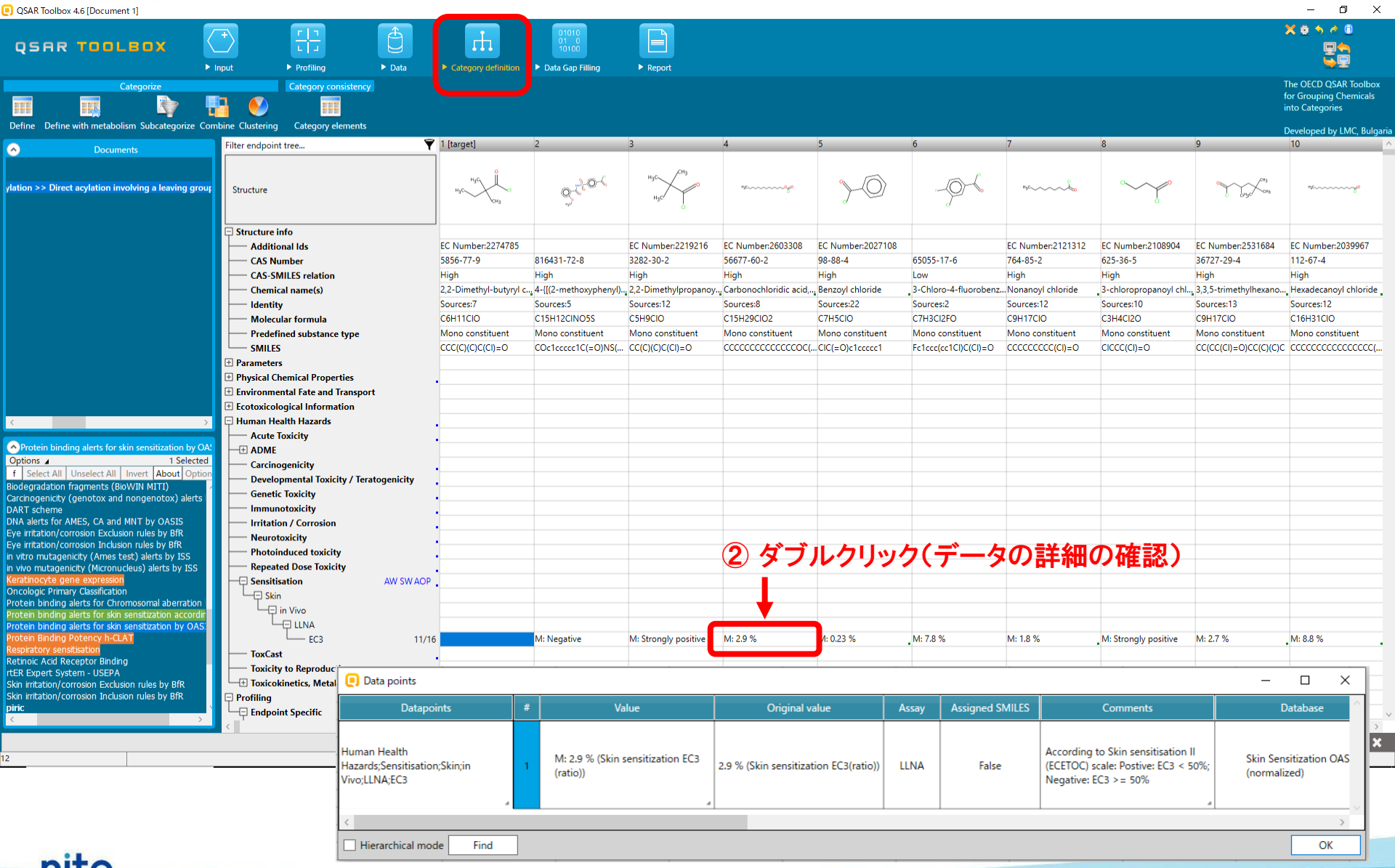
類似物質の試験データの確認

操作説明



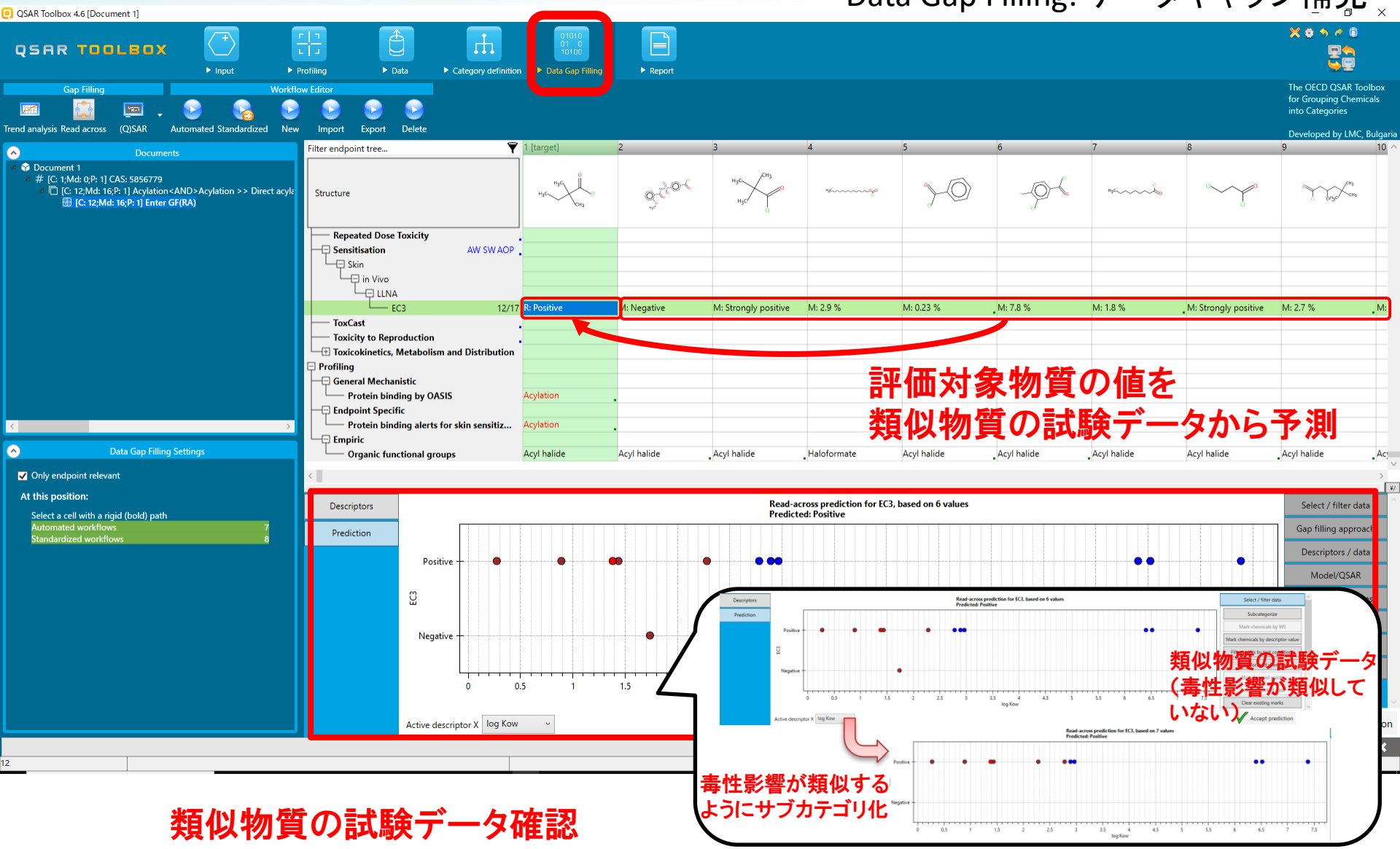
類似物質の試験データの確認

操作説明



Data Gap Fillingモジュール 画面構成

Data Gap Filling: データギャップ補完



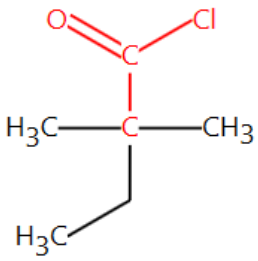
類似物質の試験データ確認
（毒性影響が類似していない場合には、
サブカテゴリー化による類似物質の検討が必要）

データギャップ補完

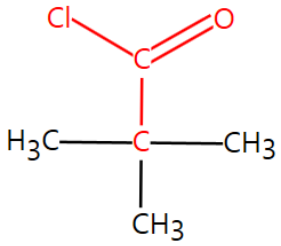
皮膚感作性のための蛋白結合アラートプロファイラー

評価対象物質

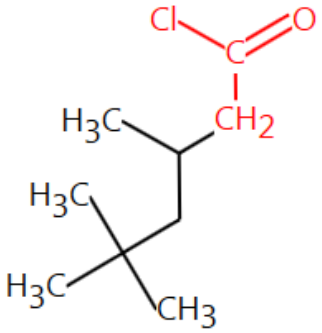
類似構造
(Common functional group)



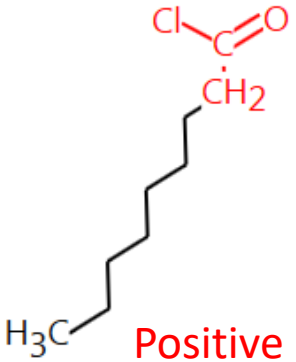
Positive
(Read-across)



Positive
(in vivo)



Positive
(in vivo)



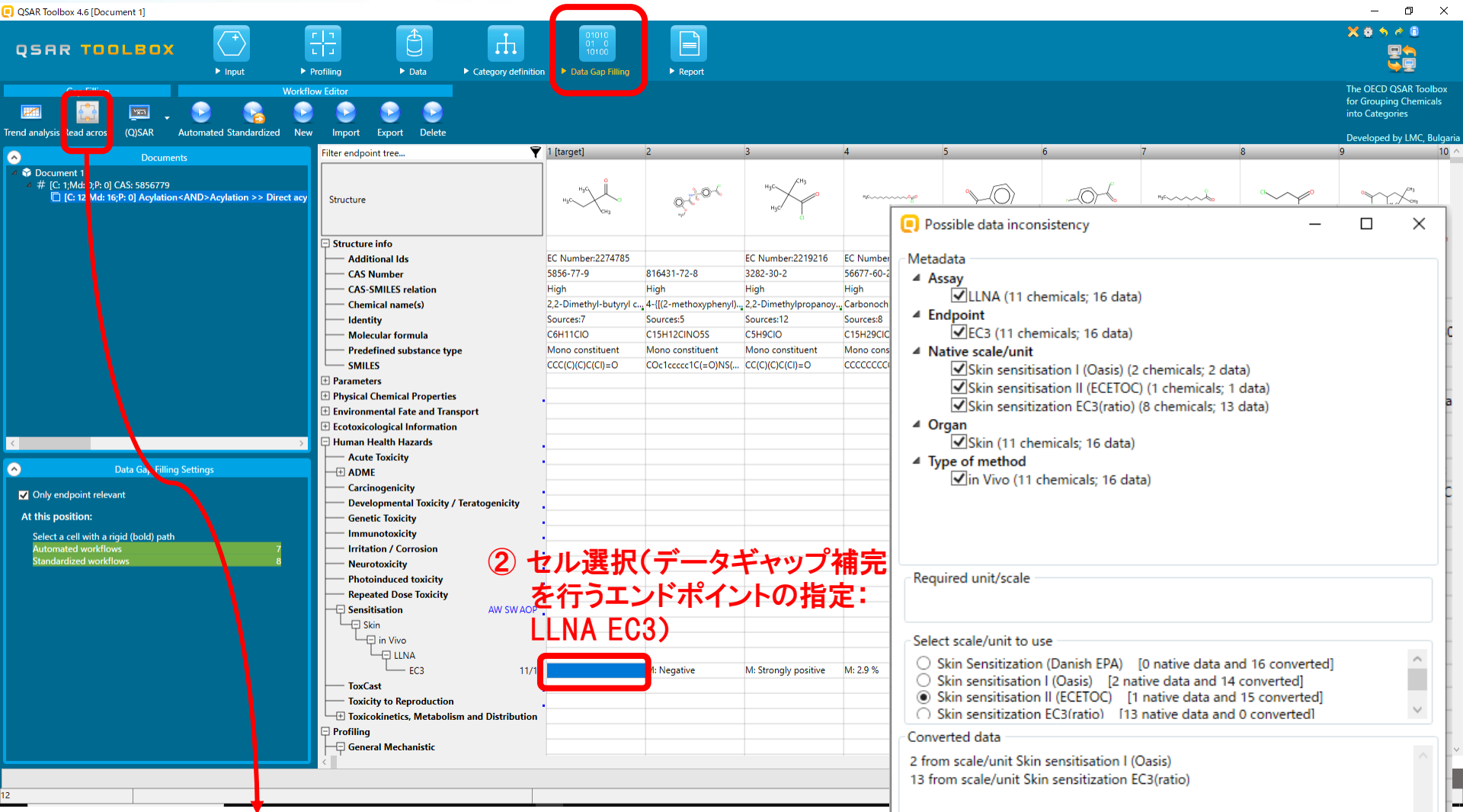
Positive
(in vivo)

類似する毒性影響

データギャップ補完

操作説明

① Data Gap Fillingクリック



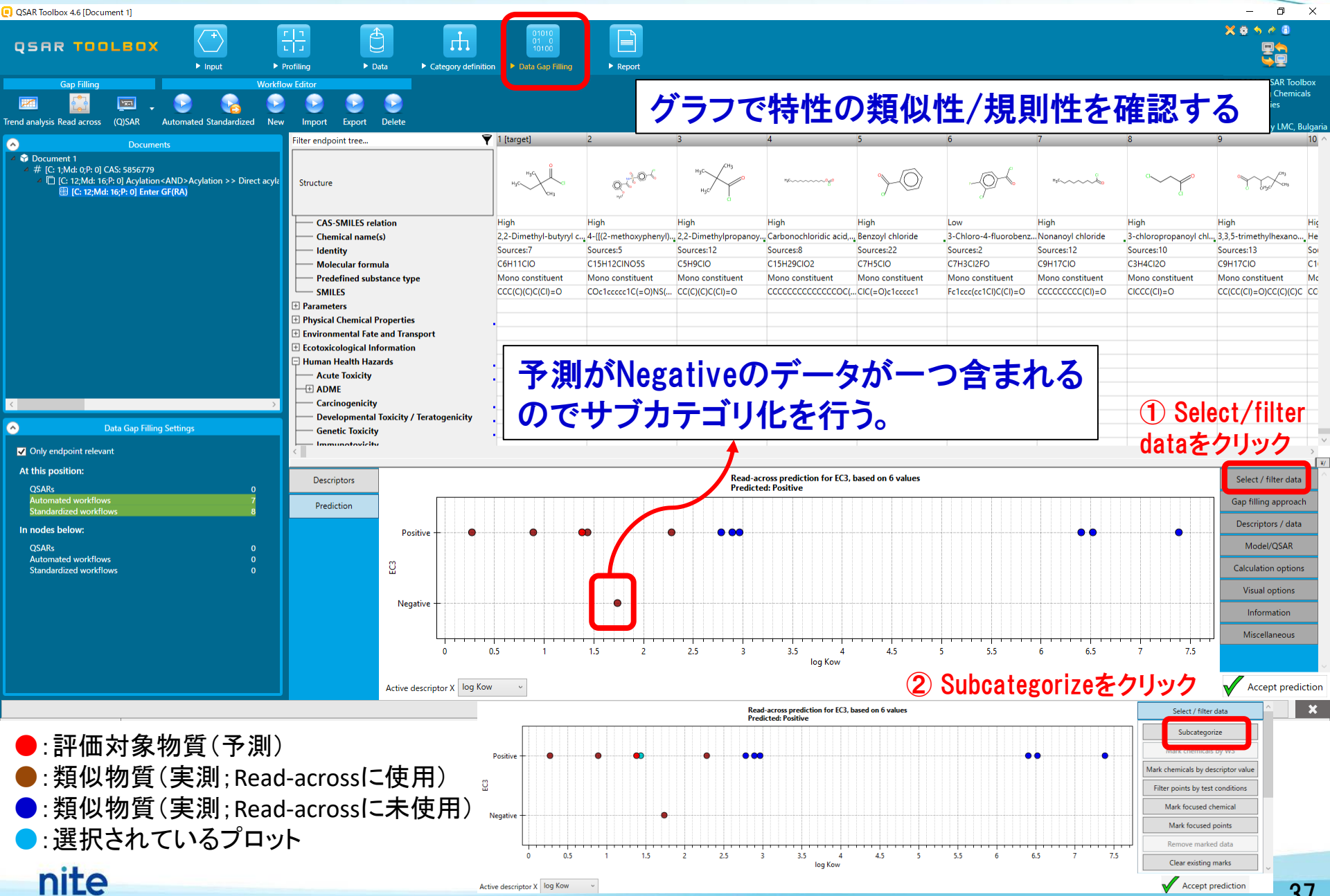
② セル選択（データギャップ補完を行うエンドポイントの指定：LLNA EC3）

③ クリック（データギャップ補完の方法の指定：Read-across）

④ クリック（陽性/陰性の分類方法の選択）

データギャップ補完

操作説明

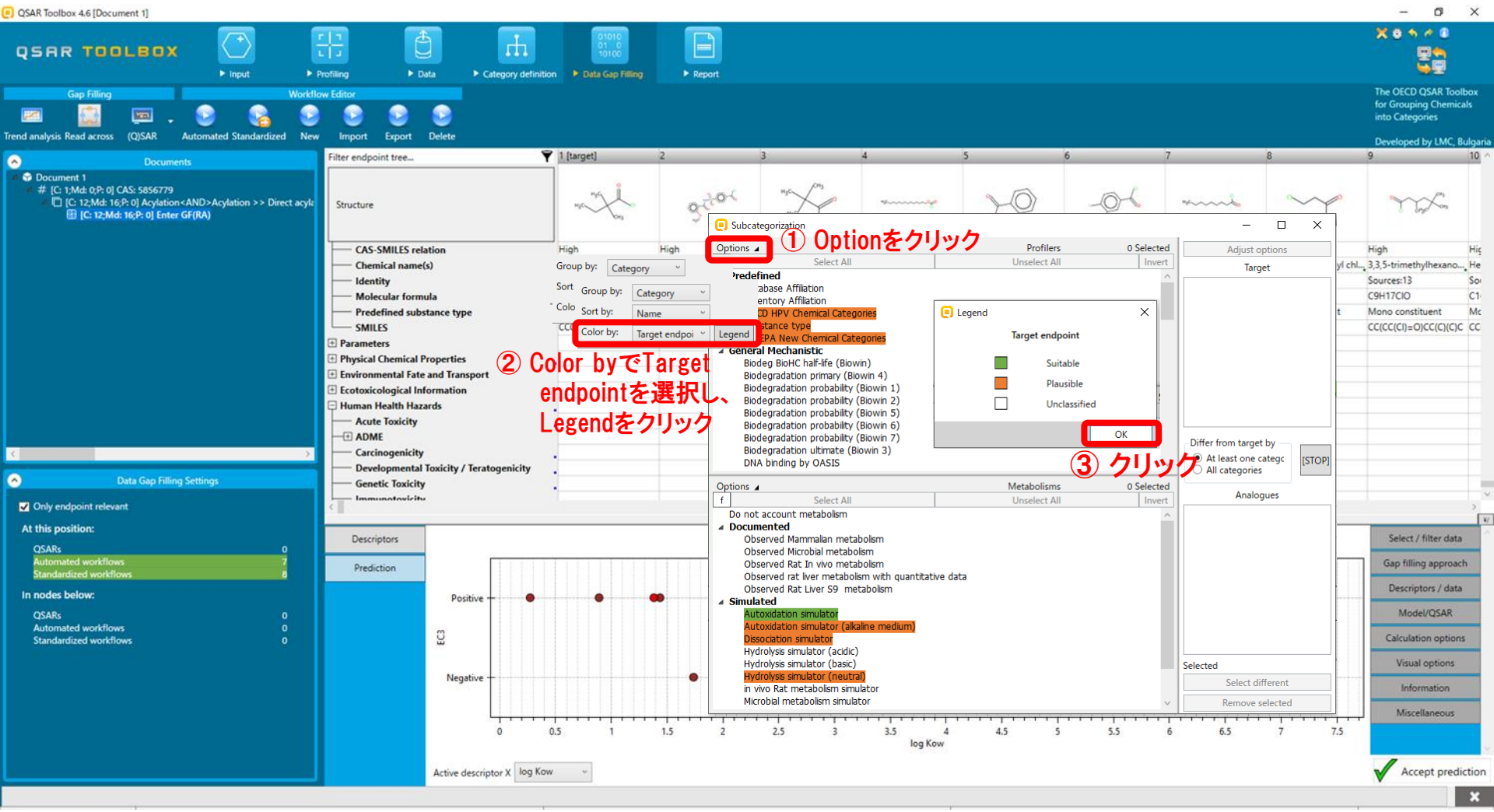


●：評価対象物質（予測）
●：類似物質（実測；Read-acrossに使用）
●：類似物質（実測；Read-acrossに未使用）
●：選択されているプロット

nite

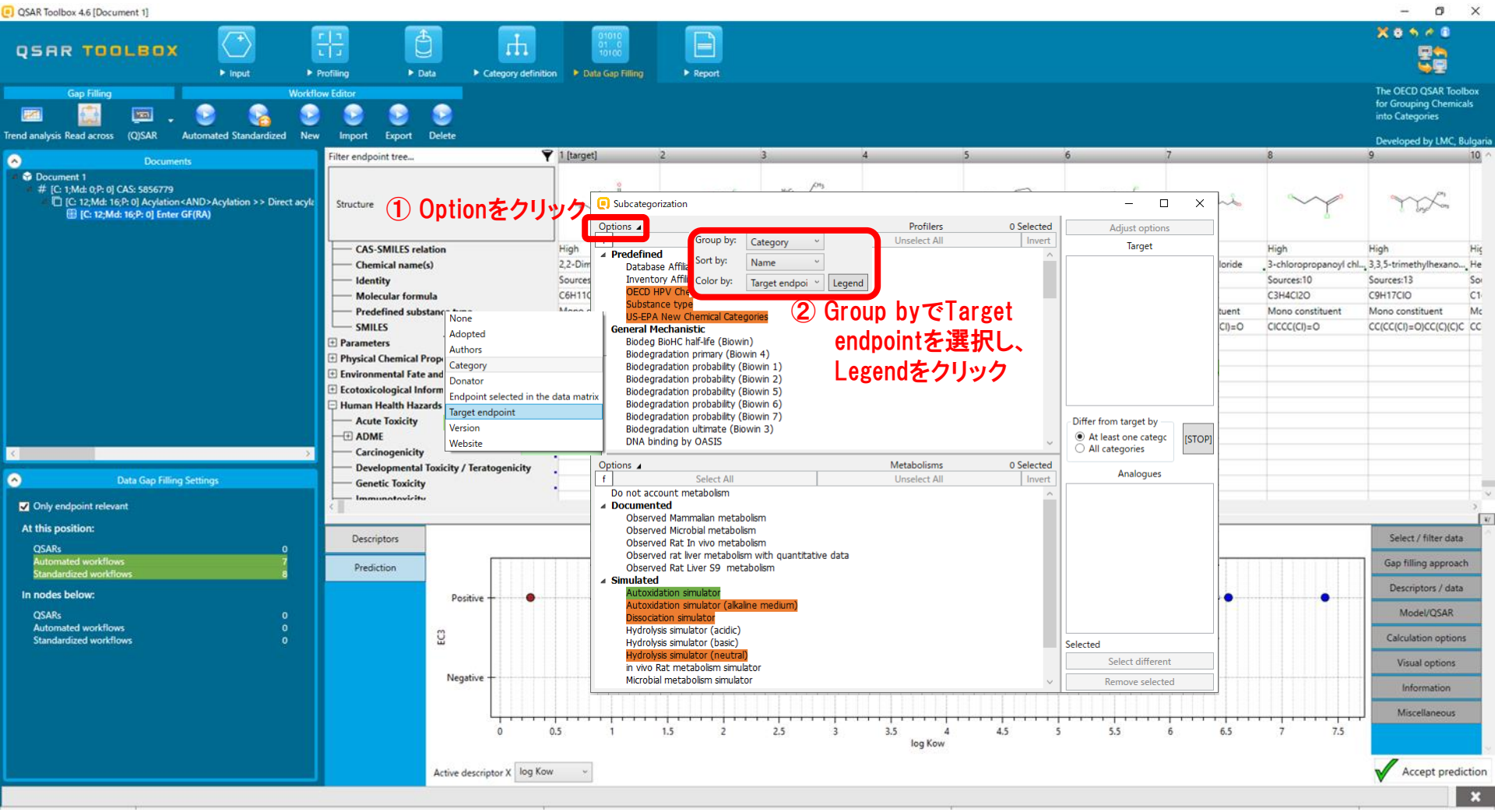
データギャップ補完

操作説明



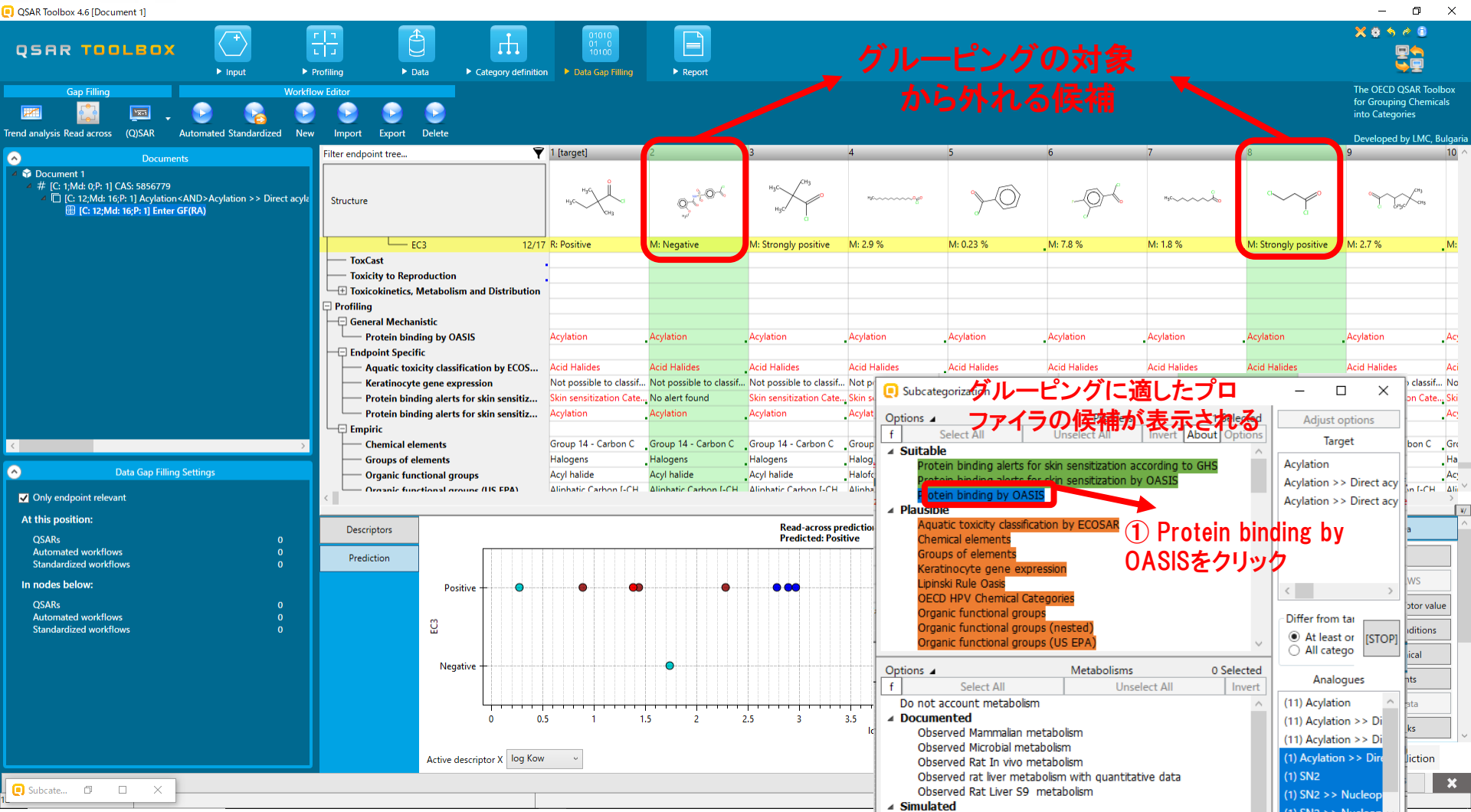
データギャップ補完

操作説明



データギャップ補完

操作説明

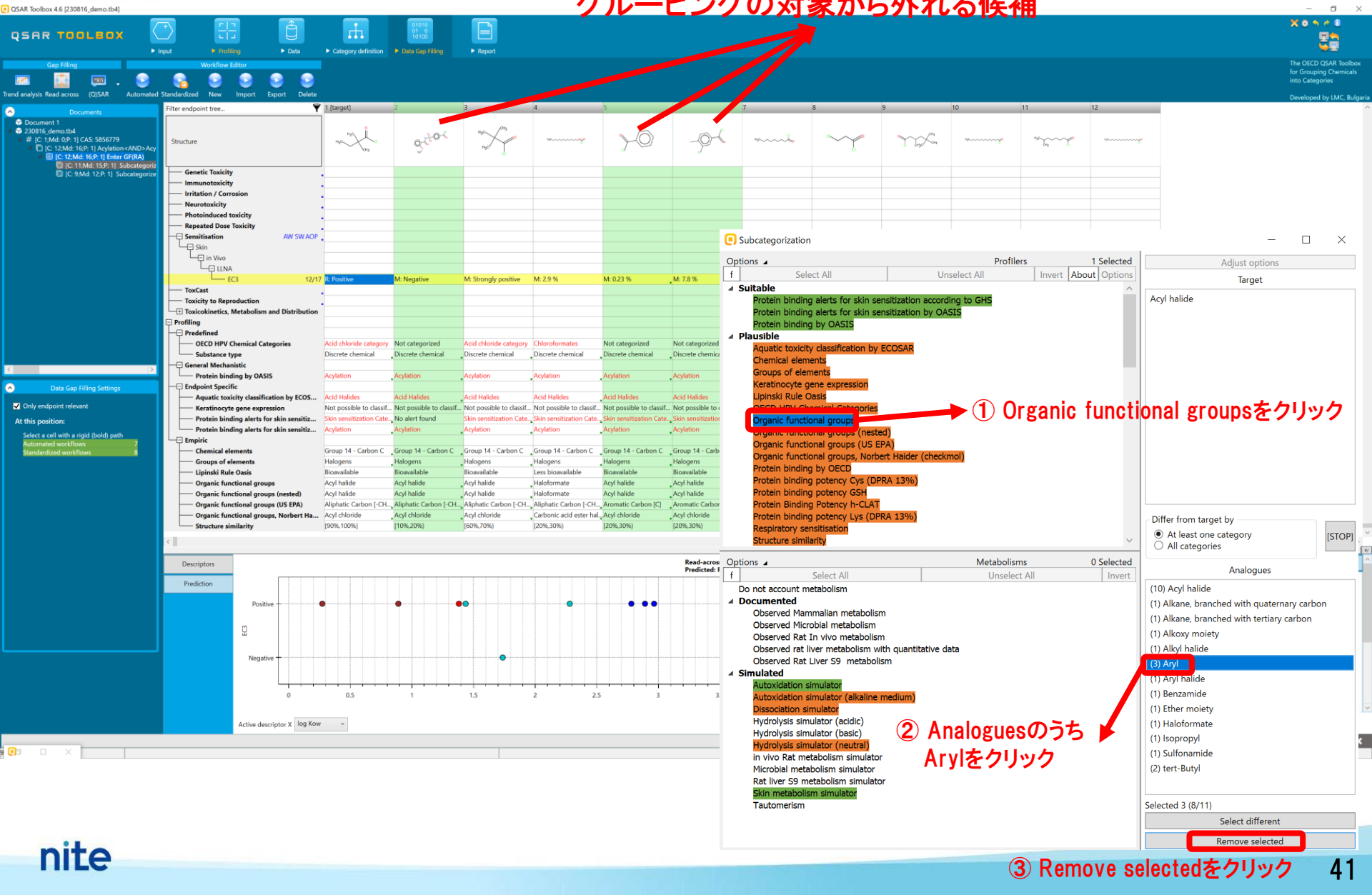


- :評価対象物質（予測）
- :類似物質（実測；Read-acrossに使用）
- :異なる作用機序を示すと予想された類似物質
- :削除対象とされた物質

データギャップ補完

操作説明

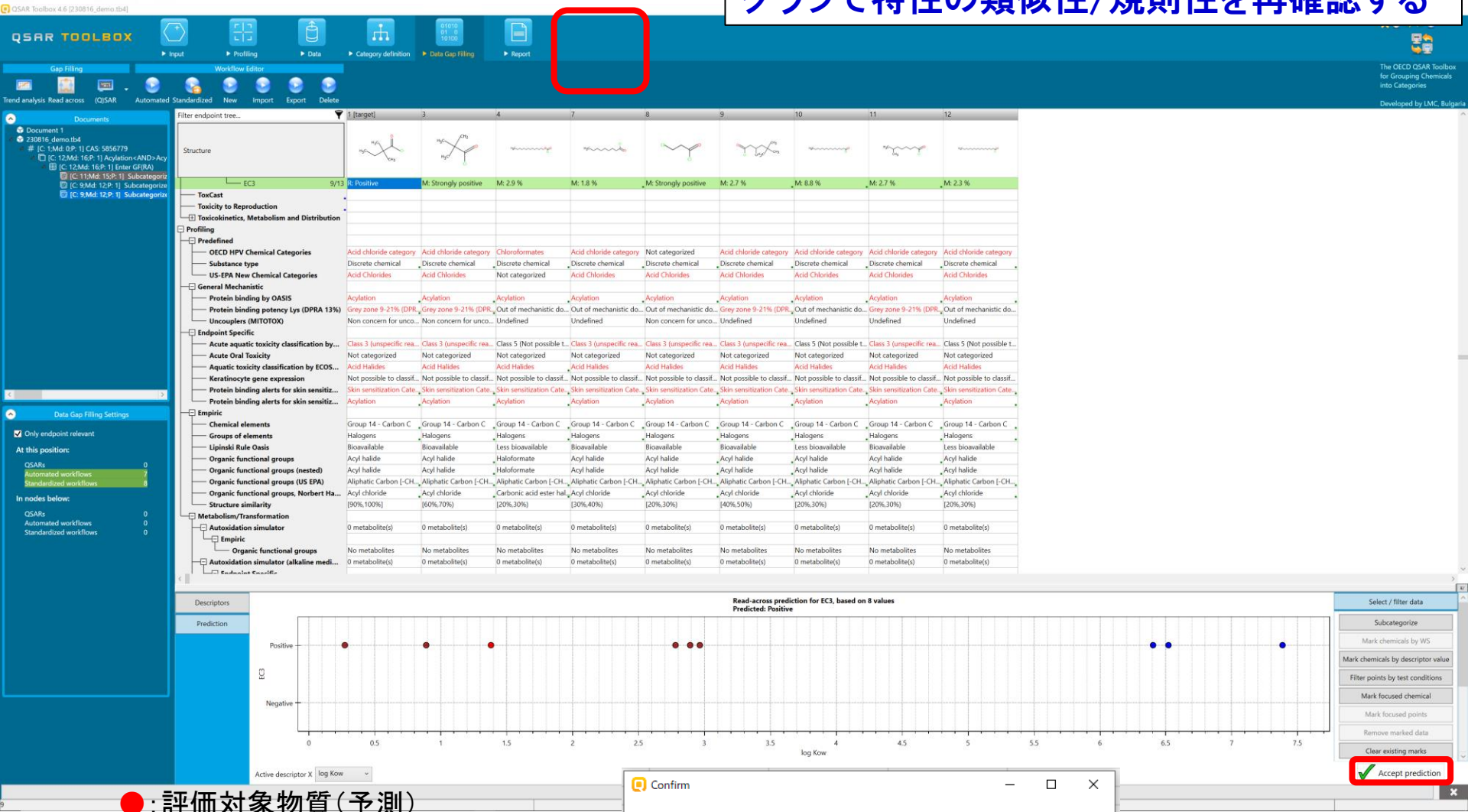
グルーピングの対象から外れる候補



データギャップ補完

操作説明

グラフで特性の類似性/規則性を再確認する



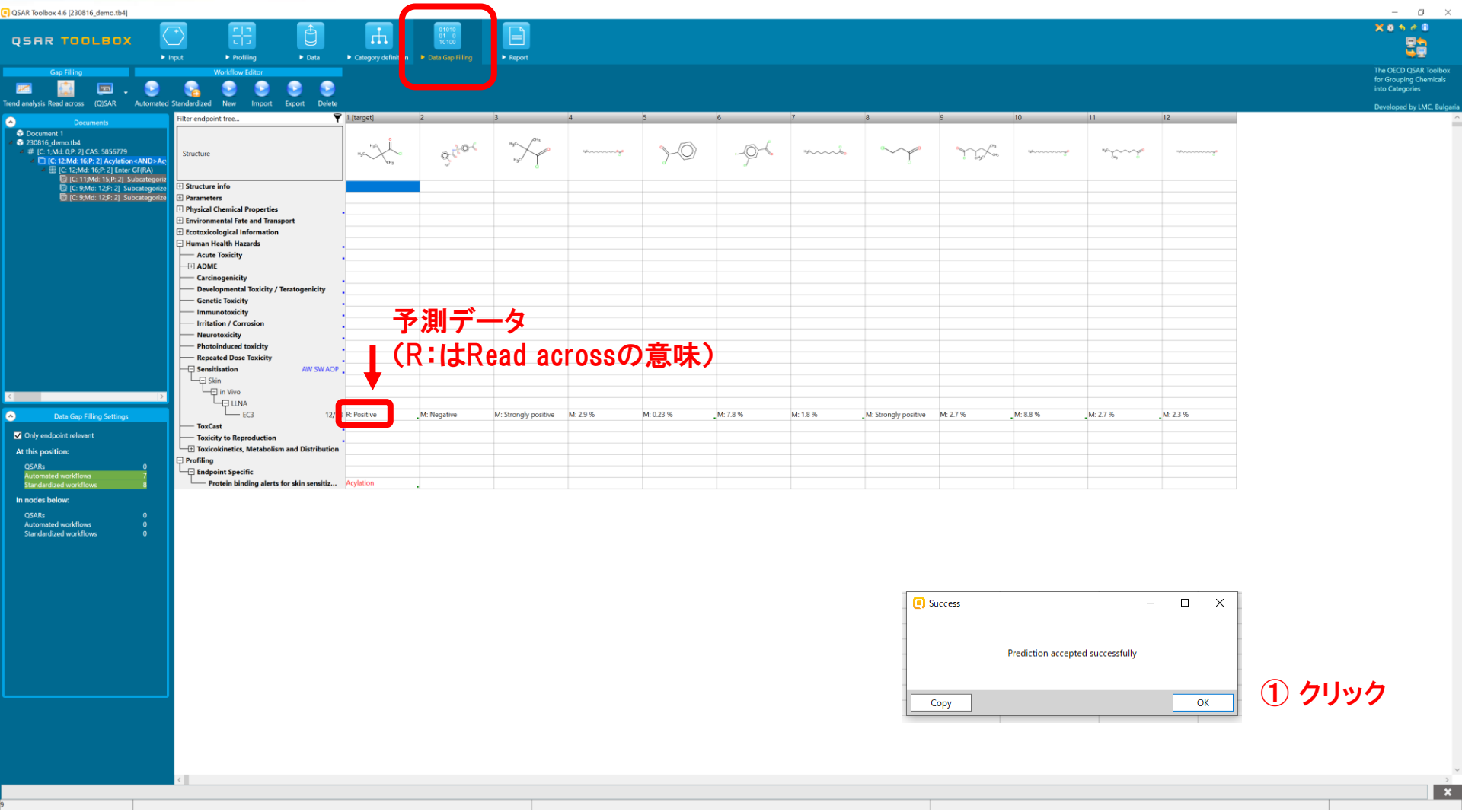
- ●：評価対象物質（予測）
- ●：類似物質（実測；Read-acrossに使用）
- ●：類似物質（実測；Read-acrossに未使用）
- ●：選択されているプロット

① Accept predictionクリック（予測結果の承認）

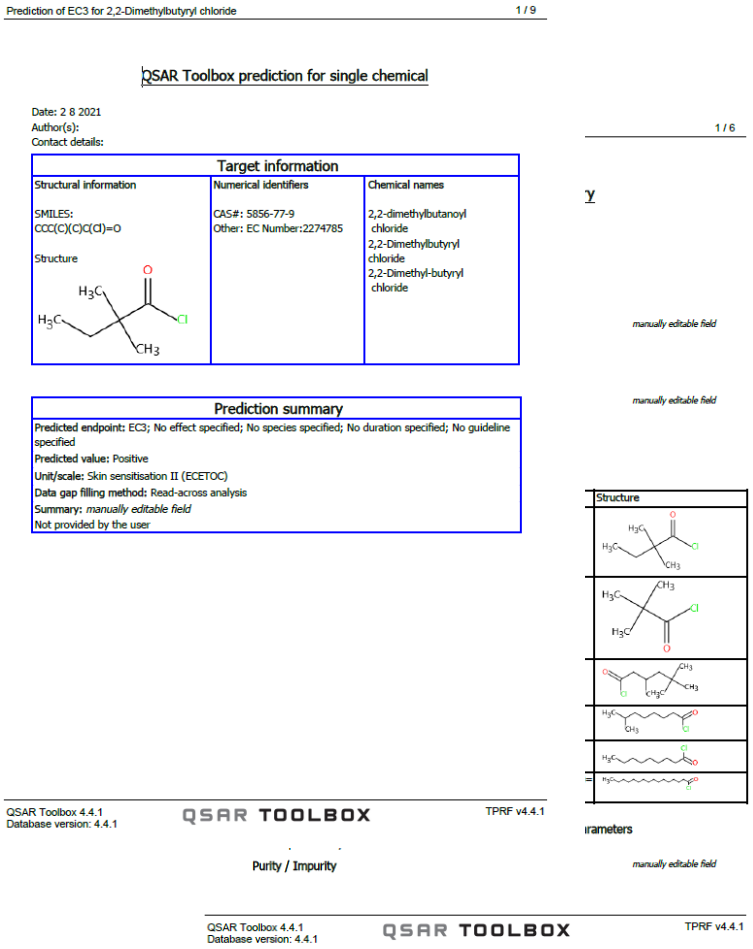
② クリック（承認の確認）

データギャップ補完（結果）

操作説明



Reportモジュール　出力イメージ



Prediction of EC3 for 2,2-Dimethylbutyryl chloride 1 / 9

QSAR Toolbox prediction for single chemical

Date: 2 8 2021
Author(s):
Contact details:

Target information		
Structural information	**Numerical identifiers**	**Chemical names**
SMILES: CCC(C)(C)C(Cl)=O Structure	CAS#: 5856-77-9 Other: EC Number:2274785	2,2-dimethylbutanoyl chloride 2,2-Dimethylbutyryl chloride 2,2-Dimethyl-butyryl chloride

Prediction summary
Predicted endpoint: EC3; No effect specified; No species specified; No duration specified; No guideline specified
Predicted value: Positive
Unit/scale: Skin sensitisation II (ECETOC)
Data gap filling method: Read-across analysis
Summary: *manually editable field*
Not provided by the user

1 / 6

manually editable field

manually editable field

Structure

manually editable field

QSAR Toolbox 4.4.1
Database version: 4.4.1

QSAR TOOLBOX

TPRF v4.4.1

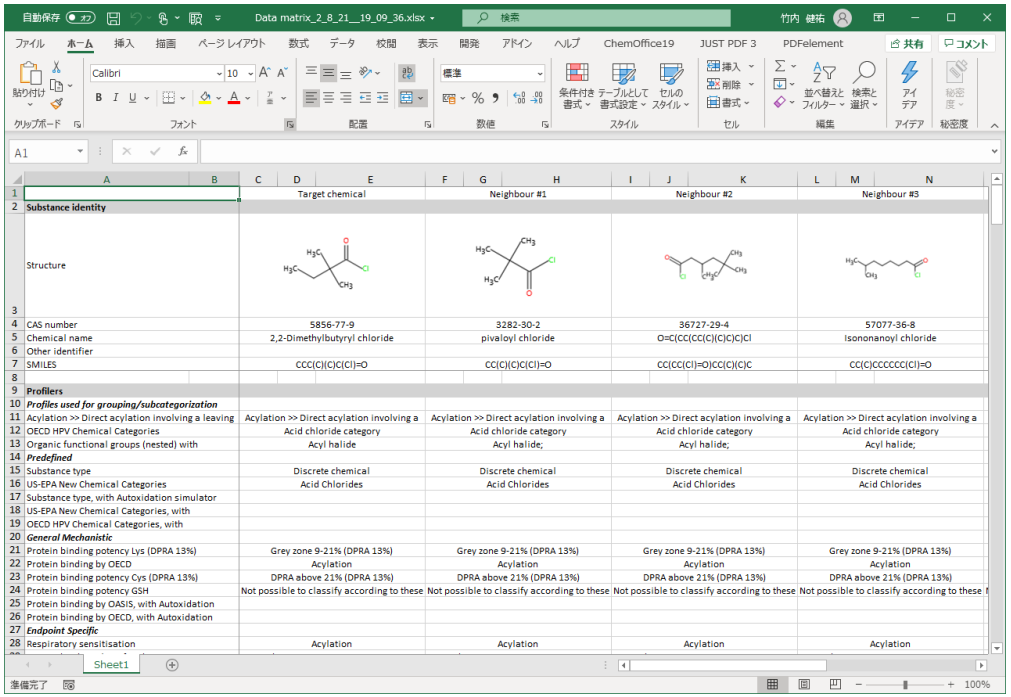
Purity / Impurity

QSAR Toolbox 4.4.1
Database version: 4.4.1

QSAR TOOLBOX

TPRF v4.4.1

評価結果をPDFのレポートやデータマトリックス形式で出力可



Data matrix_2_8_21__19_09_36.xlsx

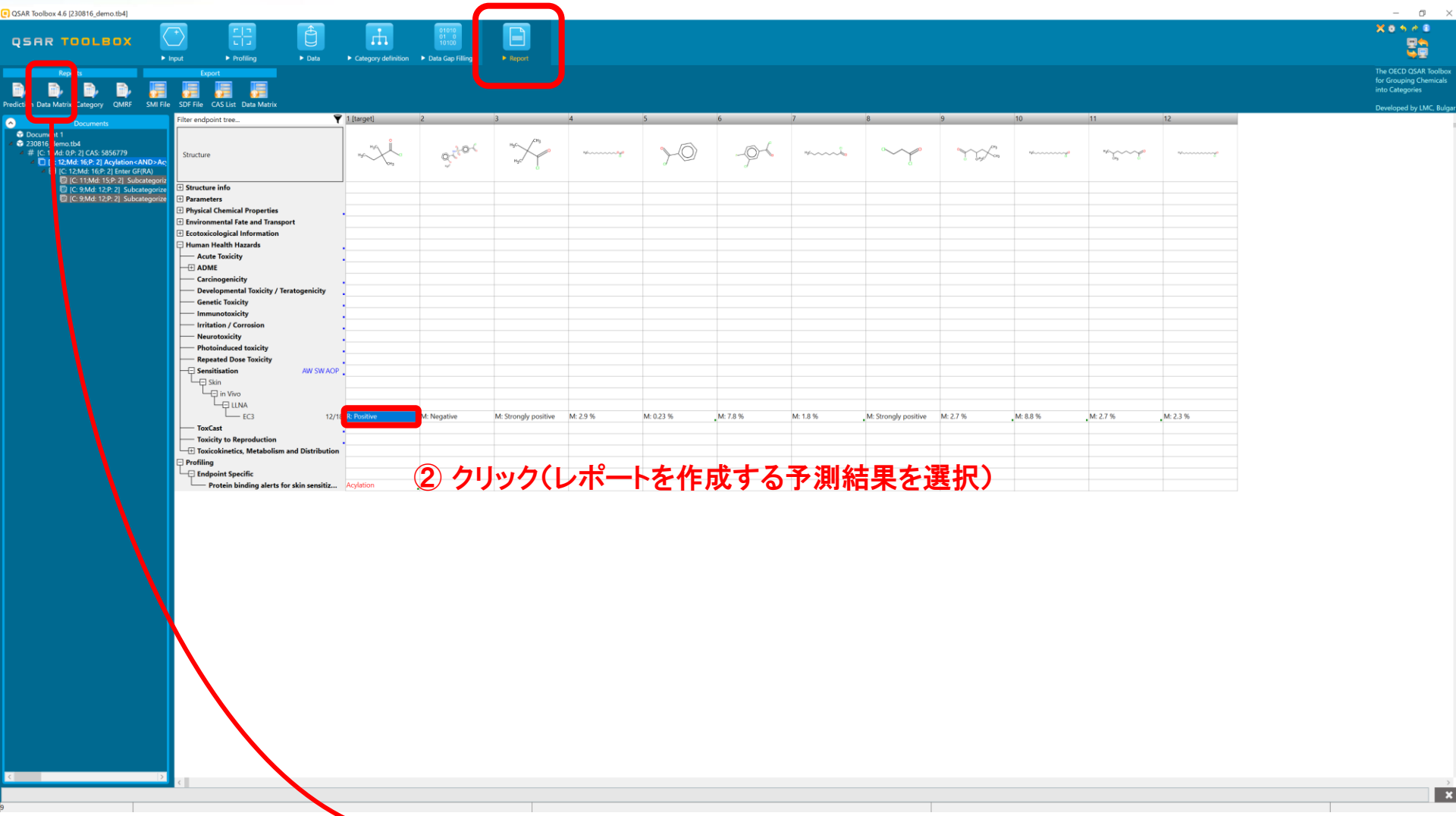
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1			Target chemical			Neighbour #1			Neighbour #2			Neighbour #3		
2	**Substance identity**													
3	Structure													
4	CAS number		5856-77-9			3282-30-2			36727-29-4			57077-36-8		
5	Chemical name		2,2-Dimethylbutyryl chloride			pivaloyl chloride			O=C(CC(CC)(C)C)C)Cl			Isononanoyl chloride		
6	Other identifier													
7	SMILES		CCC(C)(C)C(Cl)=O			CC(C)(C)C(Cl)=O			CC(CC(Cl)=O)CC(C)(C)C			CC(C)CCCCCC(Cl)=O		
8														
9	**Profilers**													
10	***Profiles used for grouping/subcategorization***													
11	Acylation >> Direct acylation involving a leaving		Acylation >> Direct acylation involving a			Acylation >> Direct acylation involving a			Acylation >> Direct acylation involving a			Acylation >> Direct acylation involving a		
12	OECD HPV Chemical Categories		Acid chloride category			Acid chloride category			Acid chloride category			Acid chloride category		
13	Organic functional groups (nested) with		Acyl halide			Acyl halide;			Acyl halide;			Acyl halide;		
14	***Predefined***													
15	Substance type		Discrete chemical			Discrete chemical			Discrete chemical			Discrete chemical		
16	US-EPA New Chemical Categories		Acid Chlorides			Acid Chlorides			Acid Chlorides			Acid Chlorides		
17	Substance type, with Autoxidation simulator													
18	US-EPA New Chemical Categories, with													
19	OECD HPV Chemical Categories, with													
20	***General Mechanistic***													
21	Protein binding potency Lys (DPRA 13%)		Grey zone 9-21% (DPRA 13%)			Grey zone 9-21% (DPRA 13%)			Grey zone 9-21% (DPRA 13%)			Grey zone 9-21% (DPRA 13%)		
22	Protein binding by OECD		Acylation			Acylation			Acylation			Acylation		
23	Protein binding potency Cys (DPRA 13%)		DPRA above 21% (DPRA 13%)			DPRA above 21% (DPRA 13%)			DPRA above 21% (DPRA 13%)			DPRA above 21% (DPRA 13%)		
24	Protein binding potency GSH		Not possible to classify according to these			Not possible to classify according to these			Not possible to classify according to these			Not possible to classify according to these		
25	Protein binding by OASIS, with Autoxidation													
26	Protein binding by OECD, with Autoxidation													
27	***Endpoint Specific***													
28	Respiratory sensitisation		Acylation			Acylation			Acylation			Acylation		

Sheet1

レポート作成

操作説明

① Reportクリック

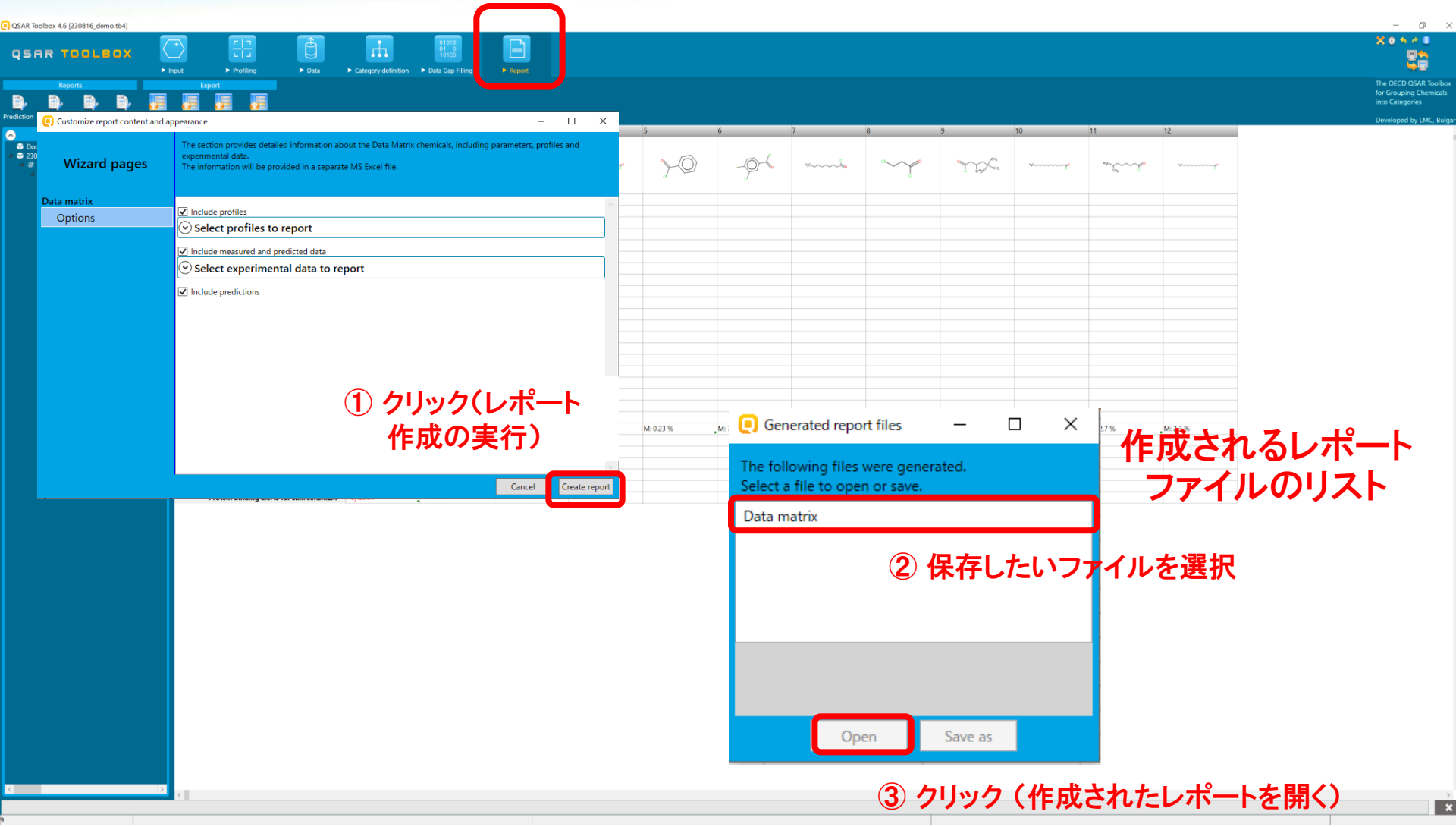


② クリック(レポートを作成する予測結果を選択)

③クリック(レポートの形式を選択:Data Matrix)

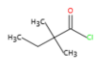
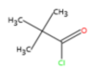
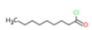
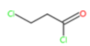
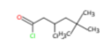
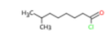
レポート作成

操作説明


Report
Customize report content and appearance
Wizard pages
Data matrix
Options
The section provides detailed information about the Data Matrix chemicals, including parameters, profiles and experimental data.
The information will be provided in a separate MS Excel file.
Include profiles
Select profiles to report
Include measured and predicted data
Select experimental data to report
Include predictions
Cancel
Create report
① クリック（レポート作成の実行）
Generated report files
The following files were generated.
Select a file to open or save.
Data matrix
② 保存したいファイルを選択
Open
Save as
作成されるレポートファイルのリスト
③ クリック（作成されたレポートを開く）

レポート作成(結果)

操作説明

		Chemical #1	Chemical #2	Chemical #3	Chemical #4	Chemical #5	Chemical #6	Chemical #7	Chemical #8	Chemical #9
2	**Substance identity**									
3	Structure									
4	CAS number	5856-77-9	3282-30-2	56677-60-2	764-85-2	625-36-5	36727-29-4	112-67-4	57077-36-8	112-76-5
5	Chemical name	2,2-Dimethylbutyryl chloride	pivaloyl chloride	Tetradecyl chloroformate	Nonanoyl chloride	3-chloropropanoyl chloride	3,3,5-trimethylhexanoyl chloride	palmitoyl chloride	Isononanoyl chloride	stearoyl chloride
6	Other identifier									
7	SMILES	CCC(C)(C)C(Cl)=O	CC(C)(C)C(Cl)=O	CCCCCCCCCCCCCCOC(Cl)=O	CCCCCCCCC(Cl)=O	ClCCC(Cl)=O	CC(CC(Cl)=O)CC(C)(C)C	CCCCCCCCCCCCCCCC(Cl)=O	CC(C)CCCCCC(Cl)=O	CCCCCCCCCCCCCCCCCC(Cl)=O
8										
9	**Profilers**									
10	***Predefined***									
11	OECD HPV Chemical Categories	Acid chloride category	Acid chloride category	Chloroformates	Acid chloride category	Not categorized	Acid chloride category	Acid chloride category	Acid chloride category	Acid chloride category
12	US-EPA New Chemical Categories	Acid Chlorides	Acid Chlorides	Not categorized	Acid Chlorides	Acid Chlorides	Acid Chlorides	Acid Chlorides	Acid Chlorides	Acid Chlorides
13	Substance type	Discrete chemical	Discrete chemical	Discrete chemical	Discrete chemical	Discrete chemical	Discrete chemical	Discrete chemical	Discrete chemical	Discrete chemical
14	***General Mechanistic***									
15	Protein binding by OASIS	Acylation	Acylation	Acylation	Acylation	Acylation	Acylation	Acylation	Acylation	Acylation
16	Uncouplers (MITOTOX)	Non concern for uncoupling of OxPhos	Non concern for uncoupling of OxPhos	Undefined	Undefined	Non concern for uncoupling of OxPhos	Undefined	Undefined	Undefined	Undefined
17	Protein binding potency Lys (DPRA 13%)	Grey zone 9-21% (DPRA 13%)	Grey zone 9-21% (DPRA 13%)	Out of mechanistic domain	Out of mechanistic domain	Out of mechanistic domain	Grey zone 9-21% (DPRA 13%)	Out of mechanistic domain	Grey zone 9-21% (DPRA 13%)	Out of mechanistic domain
18	Protein binding by OASIS, with Hydrolysis	2 x No alert found	2 x No alert found	4 x No alert found	2 x No alert found	1 x Acylation	2 x No alert found	2 x No alert found	2 x No alert found	2 x No alert found
19	***Endpoint Specific***									
20	Aquatic toxicity classification by ECOSAR	Acid Halides	Acid Halides	Acid Halides	Acid Halides	Acid Halides	Acid Halides	Acid Halides	Acid Halides	Acid Halides
21	Acute aquatic toxicity classification by Verhaar	Class 3 (unspecific reactivity)	Class 3 (unspecific reactivity)	Class 5 (Not possible to classify according	Class 3 (unspecific reactivity)	Class 3 (unspecific reactivity)	Class 3 (unspecific reactivity)	Class 5 (Not possible to classify according	Class 3 (unspecific reactivity)	Class 5 (Not possible to classify accordir
22	Protein binding alerts for skin sensitization by	Acylation	Acylation	Acylation	Acylation	Acylation	Acylation	Acylation	Acylation	Acylation
23	Keratinocyte gene expression	Not possible to classify according to these	Not possible to classify according to these	Not possible to classify according to these	Not possible to classify according to these	Not possible to classify according to these	Not possible to classify according to these	Not possible to classify according to these	Not possible to classify according to these	Not possible to classify according to the
24	Protein binding alerts for skin sensitization	Skin sensitization Category 1B	Skin sensitization Category 1B	Skin sensitization Category 1B	Skin sensitization Category 1B	Skin sensitization Category 1B	Skin sensitization Category 1B	Skin sensitization Category 1B	Skin sensitization Category 1B	Skin sensitization Category 1B
25	Acute Oral Toxicity	Not categorized	Not categorized	Not categorized	Not categorized	Not categorized	Not categorized	Not categorized	Not categorized	Not categorized
26	Protein binding alerts for skin sensitization by	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites
27	Protein binding alerts for skin sensitization by	6 x No alert found	5 x No alert found	2 x Schiff base formation	14 x No alert found	1 x SN2	2 x Nucleophilic addition	29 x No alert found	1 x Nucleophilic addition	33 x No alert found
28	Protein binding alerts for skin sensitization by	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites
29	Protein binding alerts for skin sensitization by	2 x No alert found	2 x No alert found	4 x No alert found	2 x No alert found	1 x Acylation	2 x No alert found	2 x No alert found	2 x No alert found	2 x No alert found
30	***Empiric***									
31	Structure similarity	[90%,100%]	[60%,70%)	[20%,30%)	[30%,40%)	[20%,30%)	[40%,50%)	[20%,30%)	[20%,30%)	[20%,30%)
32	Organic functional groups	Acyl halide	Acyl halide	Haloformate	Acyl halide	Acyl halide	Acyl halide	Acyl halide	Acyl halide	Acyl halide
33	Groups of elements	Halogens	Halogens	Halogens	Halogens	Halogens	Halogens	Halogens	Halogens	Halogens
34	Chemical elements	Group 14 - Carbon C	Group 14 - Carbon C	Group 14 - Carbon C	Group 14 - Carbon C	Group 14 - Carbon C	Group 14 - Carbon C	Group 14 - Carbon C	Group 14 - Carbon C	Group 14 - Carbon C
35	Lipinski Rule Oasis	Bioavailable	Bioavailable	Less bioavailable	Bioavailable	Bioavailable	Bioavailable	Less bioavailable	Bioavailable	Less bioavailable
36	Organic functional groups (nested)	Acyl halide	Acyl halide	Haloformate	Acyl halide	Acyl halide	Acyl halide	Acyl halide	Acyl halide	Acyl halide
37	Organic functional groups (US EPA)	Aliphatic Carbon [-CH2-]	Aliphatic Carbon [-CH2-]	Aliphatic Carbon [-CH2-]	Aliphatic Carbon [-CH2-]	Aliphatic Carbon [-CH2-]	Aliphatic Carbon [-CH2-]	Aliphatic Carbon [-CH2-]	Aliphatic Carbon [-CH2-]	Aliphatic Carbon [-CH2-]
38	Organic functional groups, Norbert Haider	Acyl chloride	Acyl chloride	Carbonic acid ester halide	Acyl chloride	Acyl chloride	Acyl chloride	Acyl chloride	Acyl chloride	Acyl chloride
39	Organic functional groups, with Autoxidation	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites
40	Organic functional groups, with Dissociation	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites
41	Organic functional groups, with Hydrolysis	1 x Carboxylic acid	1 x Carboxylic acid	1 x Alcohol	1 x Carboxylic acid	1 x Acyl halide	1 x Alkane, branched with quaternary	1 x Carboxylic acid	1 x Alkane, branched with tertiary carbon	1 x Carboxylic acid
42	Organic functional groups, with Autoxidation	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites	No metabolites
43										
44	**Measured and predicted data**									
45	***Human Health Hazards#Sensitisation***									

	sublevel	endpoint	value	unit	species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database	value	unit	species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database	value	unit	species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database	value	unit	species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database	value	unit	species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database	value	unit	species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database	value	unit	species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database	value	unit	species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database	value	unit	species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database
47								Test organisms (species): mouse Endpoint: EC3 Type of method: in Vivo Assay: LLNA Year: 2007 Reference source: Regulatory Toxicology			Test organisms (species):			Test organisms (species): mouse Endpoint: EC3 Type of method: in Vivo Assay: LLNA Test guideline: OECD			Test organisms (species): mouse Endpoint: EC3 Type of method: in Vivo Assay: LLNA Year: 2007 Reference source: Regulatory Toxicology			Test organisms (species): mouse Endpoint: EC3 Type of method: in Vivo Assay: LLNA Test guideline: OECD			Test organisms (species): mouse Endpoint: EC3 Type of method: in Vivo Assay: LLNA Test guideline: OECD			Test organisms (species): mouse Endpoint: EC3 Type of method: in Vivo Assay: LLNA Test guideline: OECD			

参考情報

QSAR Toolbox Website

https://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-assessment/oecd-qsar-toolbox.htm

- QSAR Toolboxのダウンロード
- Guidance Documents and Training Materials
- Webinar
- Help Desk
- Public Discussion Forum

etc.

The OECD QSAR Toolbox

To increase the regulatory acceptance of (Q)SAR methods, the OECD is developing a QSAR Toolbox to make (Q)SAR technology readily accessible, transparent, and less demanding in terms of infrastructure costs.

Download the Toolbox Guidance Documents and Training Materials Webinar Help Desk Public Discussion Forum

WHAT'S NEW?

16 May 2023 – A new version of the OECD QSAR Toolbox is now available: New Toolbox offers extended connectivity with IUCLID, better docking capacity for external models and explicit references to the test material identity for REACH database.

The **OECD QSAR Toolbox 4.6** is now available for download.

This update includes, among others, an extended IUCLID connectivity and searches, optimised execution of external QSARs, and an update to the Web Client and report functionalities. Furthermore, it offers a new perspective on the REACH database, where experimental results can now be consulted according to the material that was tested.

15 years of work on the OECD QSAR Toolbox have led to the development of a freely available software that supports and transparent chemical hazard assessment without new tests on animals. Co-developed by ECHA and OECD also with great support from member countries and QSAR community, the QSAR Toolbox has now over 30 000 users from private and public sector across the world and it is widely used under REACH and beyond.

The release of the Toolbox 4.6 is yet another step forward for the reduction of animal testing in chemical hazard assessment.

For the complete list of changes, please see the release notes, Download the QSAR Toolbox and find more information on the QSAR Toolbox website, and access the new repository.

ユーザーマニュアル(和訳)

当機構HPにおいてユーザマニュアル・インストールマニュアル等の和訳を公開
(https://www.nite.go.jp/chem/qsar/toolbox.html)

QSAR Toolboxマニュアル類

<NITEの仮訳>
OECDのQSAR Toolboxページに公開されている一部のマニュアルをNITEで仮訳いたしました。ぜひご活用ください。

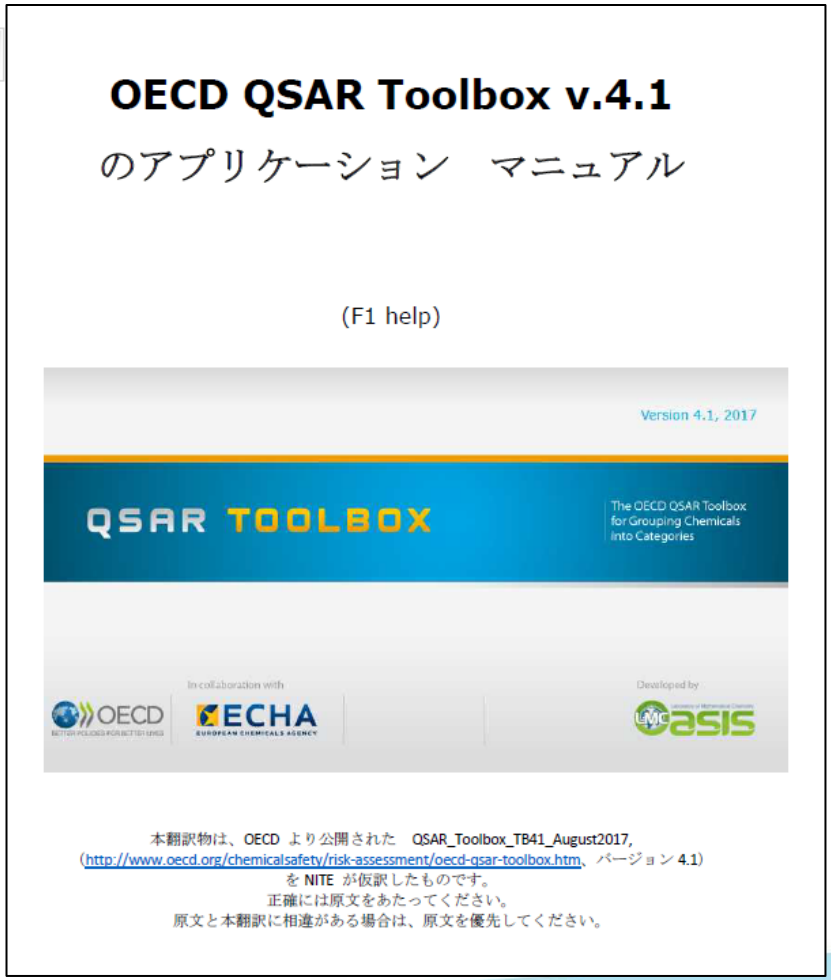
OECD QSAR Toolbox v.4の操作マニュアル　【ZIP：33MB】
(QSAR Toolbox v4.1に基づいたマニュアル)
(原文) OECD QSAR Toolbox v.4の操作マニュアル

OECD QSAR Toolboxユーザーマニュアルスタートガイド　【PDF：4MB】
(QSAR Toolbox v3.0に基づいた使い方マニュアル)
(原文) OECD QSAR Toolboxユーザーマニュアルスタートガイド

OECD QSAR Toolbox4.4のインストールマニュアル　【PDF：2MB】
(QSAR Toolbox v4.4に基づいたインストールマニュアル)
OECD QSAR Toolbox4.6のインストールマニュアル

<NITEのマニュアル>
QSAR Toolboxの使用方法について、NITE独自でマニュアルを作成しております。こちらもご覧ください。

OECD QSAR Toolbox version 3.2を用いた公開データの活用方法に関するマニュアル　【PDF：3MB】



QSAR Toolbox のHelp Desk

次のようなトラブルについては、下記URLのヘルプデスクに照会して下さい。

- ユーザー登録
- ソフトウェアのダウンロード及びインストール
- ソフトウェアの基本的な使い方
- バグなどの情報

OECDのHP:
http://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-assessment/oecd-qsar-toolbox.htm#Helpdesk

動画講習/学習教材サイト

リードアクロス講習の動画等の
学習教材を公開しています。

1. リードアクロス講習
2. リードアクロス関連ガイダンスとサイトのご案内

NITEのHP:
https://www.nite.go.jp/chem/qsar/ReadAcrossTraining.html

ご清聴ありがとうございました

安全とあなたの未来を支えます

nite National Institute of Technology and Evaluation
独立行政法人 製品評価技術基盤機構

お問い合わせ先　hess@nite.go.jp