



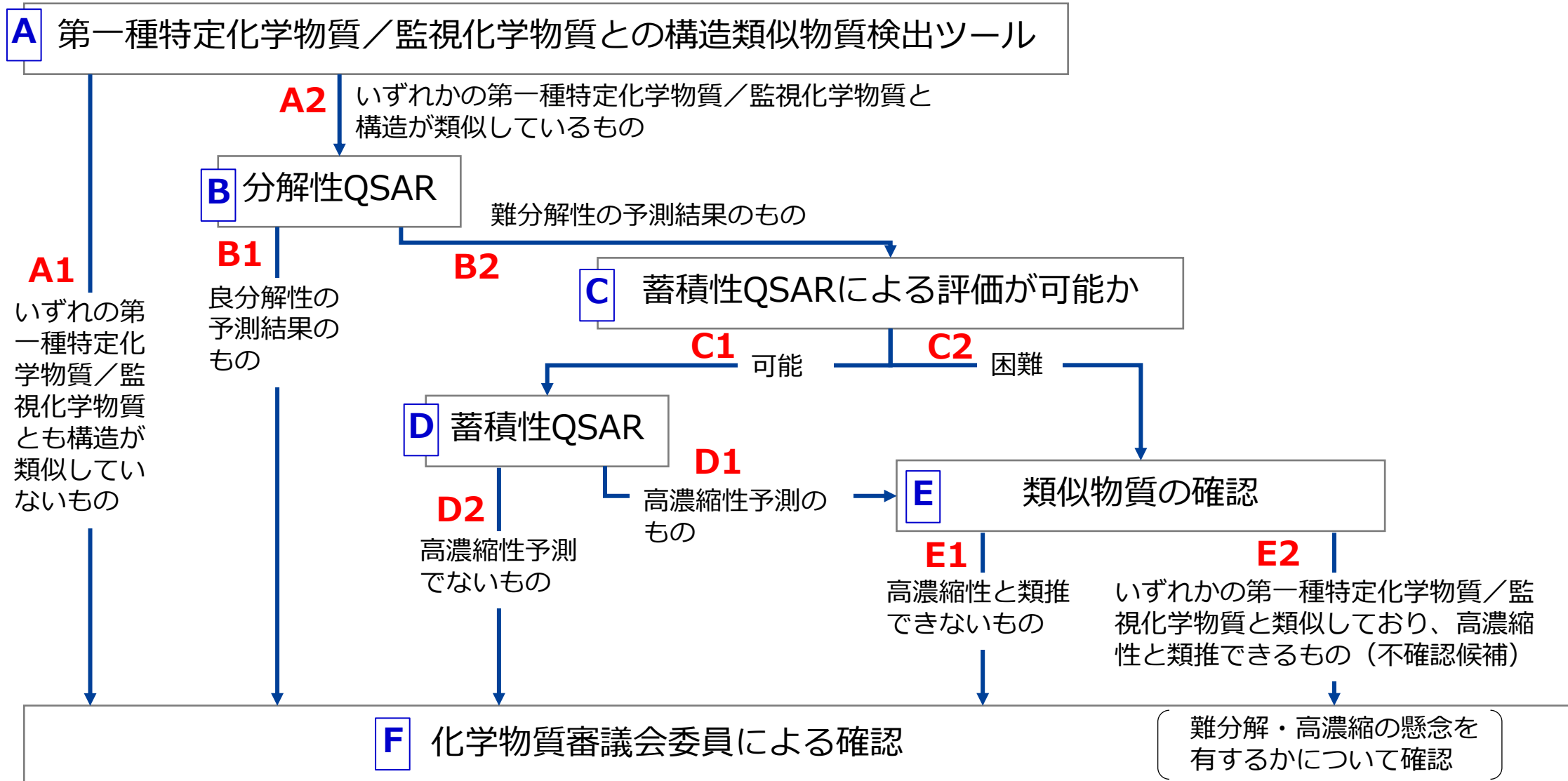
少量新規評価フローにおける QSAR Toolboxの使い方

令和6年度QSAR／リードアクロス講習会（令和6年7月24日）

独立行政法人製品評価技術基盤機構化学物質管理センター安全審査課

財津 由梨

評価フローの概要



QSAR Toolboxのインストール

少量新規評価フローを実施するには、QSAR Toolbox のインストールが必要です。

- 最新版のダウンロード、マニュアルやチュートリアル等
<https://qsartoolbox.org/>
- NITEが作成したマニュアルの仮訳 ※最新版ではないのでご注意ください
https://www.nite.go.jp/chem/kanren/kokusai_qsar.html#section3
- QSAR Toolbox のインストールに関するお問合せ
QSAR Toolbox ヘルプデスク
<https://qsartoolbox.org/support/#help>

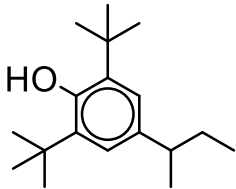
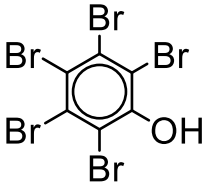
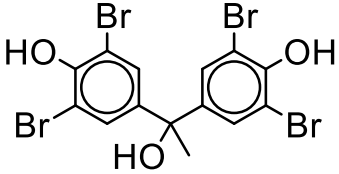
一特/監視類似物質検出ツールの設定

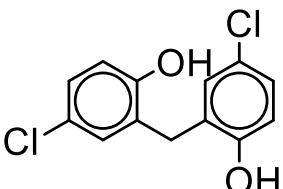
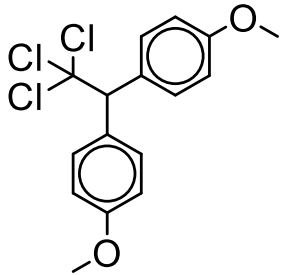
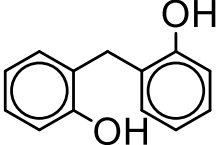
初回のみ、QSAR Toolbox に一特/監視類似物質検出ツールを登録します。

- 一特/監視類似物質検出ツール、マニュアル
https://www.nite.go.jp/chem/qsar/syouryou_QSAR.html#section3

評価フローの実践

今回は、これらの物質に対して評価フローによる評価を行います。

物質A	
物質B	
物質C	

物質D	
物質E	
物質F	

少量新規化学物質製造・輸入申出書の電算処理コード欄①「高分子化合物の記載」または③「原料の記載」が「1（＝有）」の申出については適用されません。

QSAR Toolboxにインポートできる形式のリストは講義資料と一緒にダウンロードできます。

対象構造の入力

構造を入力します。

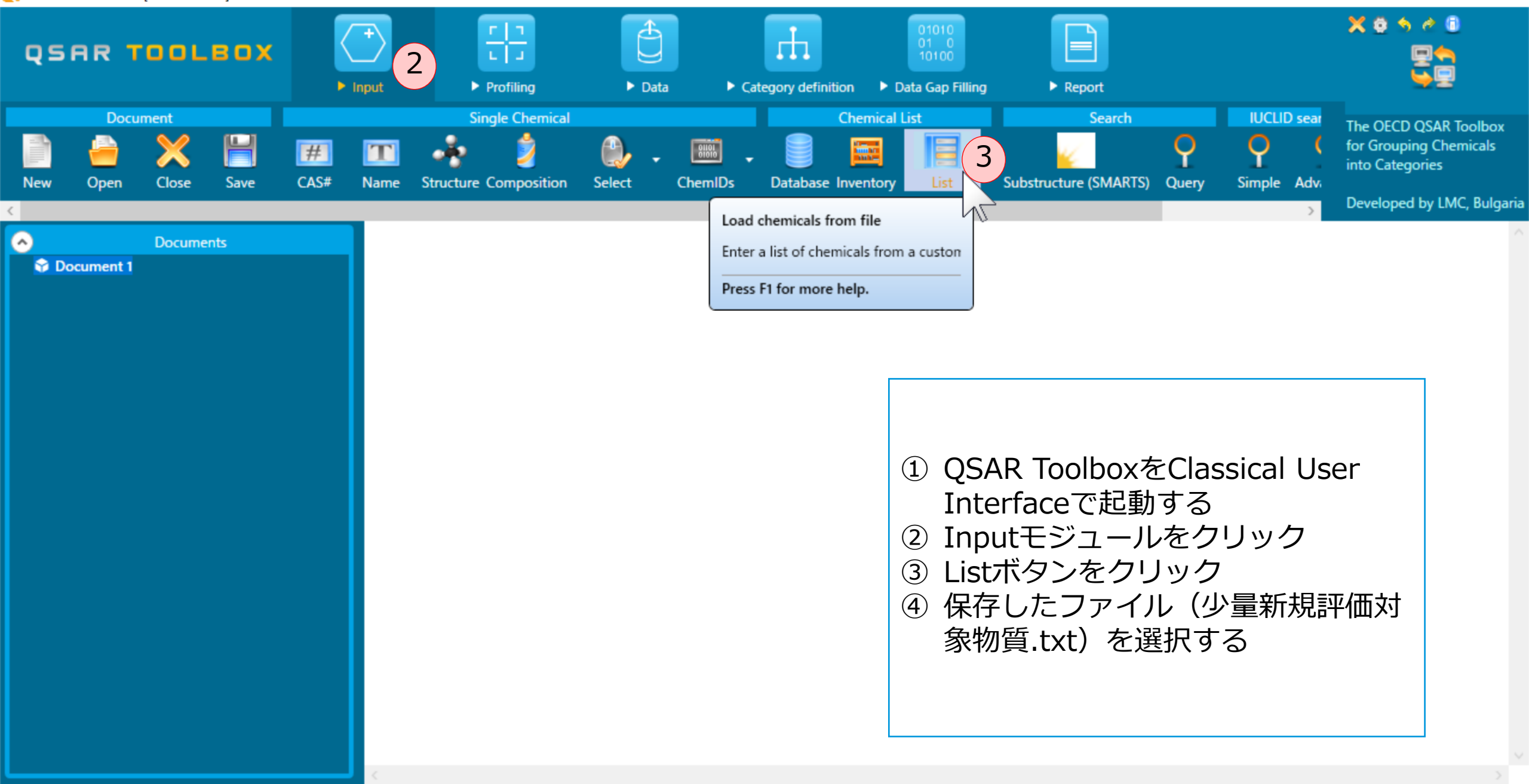
- チュートリアル動画（英語）

<https://www.youtube.com/watch?v=KbVvuxGMQ1k>

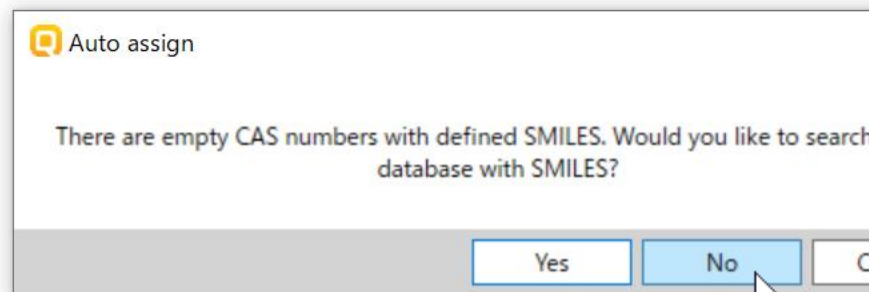
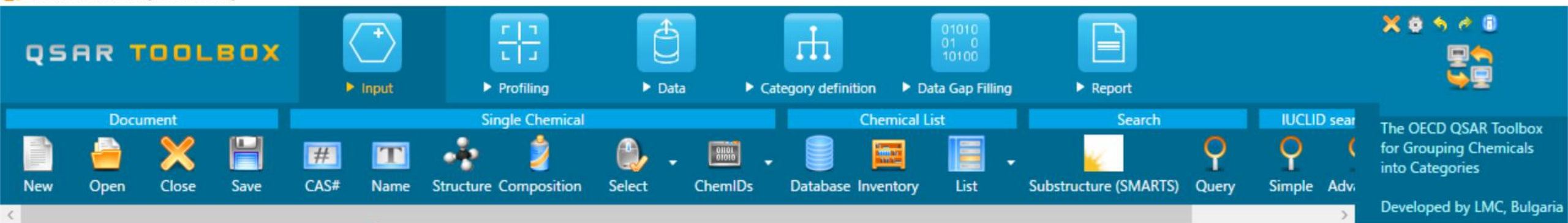
今回はこちらのファイルを使用します。

少量新規評価対象物質.txt

CAS	NAME	SMILES
	chemicalA	<chem>CCC(C)c1cc(c(O)c(c1)C(C)(C)C)C(C)(C)C</chem>
	chemicalB	<chem>Oc1c(Br)c(Br)c(Br)c(Br)c1Br</chem>
	chemicalC	<chem>CC(O)(c1cc(Br)c(O)c(Br)c1)c1cc(Br)c(O)c(Br)c1</chem>
	chemicalD	<chem>Oc1ccc(Cl)cc1Cc1cc(Cl)ccc1O</chem>
	chemicalE	<chem>COc1ccc(cc1)C(c2ccc(OC)cc2)C(Cl)(Cl)Cl</chem>
	chemicalF	<chem>Oc1ccccc1Cc1ccccc1O</chem>



- ① QSAR ToolboxをClassical User Interfaceで起動する
- ② Inputモジュールをクリック
- ③ Listボタンをクリック
- ④ 保存したファイル（少量新規評価対象物質.txt）を選択する



読み込ませたファイルにはCAS番号が入っていないので、検索するか確認される

- データベースから実測データを検索する場合はCAS番号が必要
- 実測データを検索しない場合は、CAS番号は不要（CAS番号の検索に時間がかかること、一つの構造に複数のCAS番号が紐付いていることがあることなどから、今回はCAS番号は検索しない）

QSAR TOOLBOX

Input

Profiling

Data

Category definition

Data Gap Filling

Report

Document

New
 Open
 Close
 Save

Single Chemical

CAS#
 Name
 Structure
 Composition
 Select
 ChemIDs

Chemical List

Database
 Inventory
 List

Search

Substructure (SMARTS)
 Query
 Simple
 Adv

IUCLID search

The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories

Developed by LMC, Bulgaria

Documents

Document 1

[C: 6;Md: 0;P: 0] 少量新規評価対象物質.txt

Filter endpoint tree...

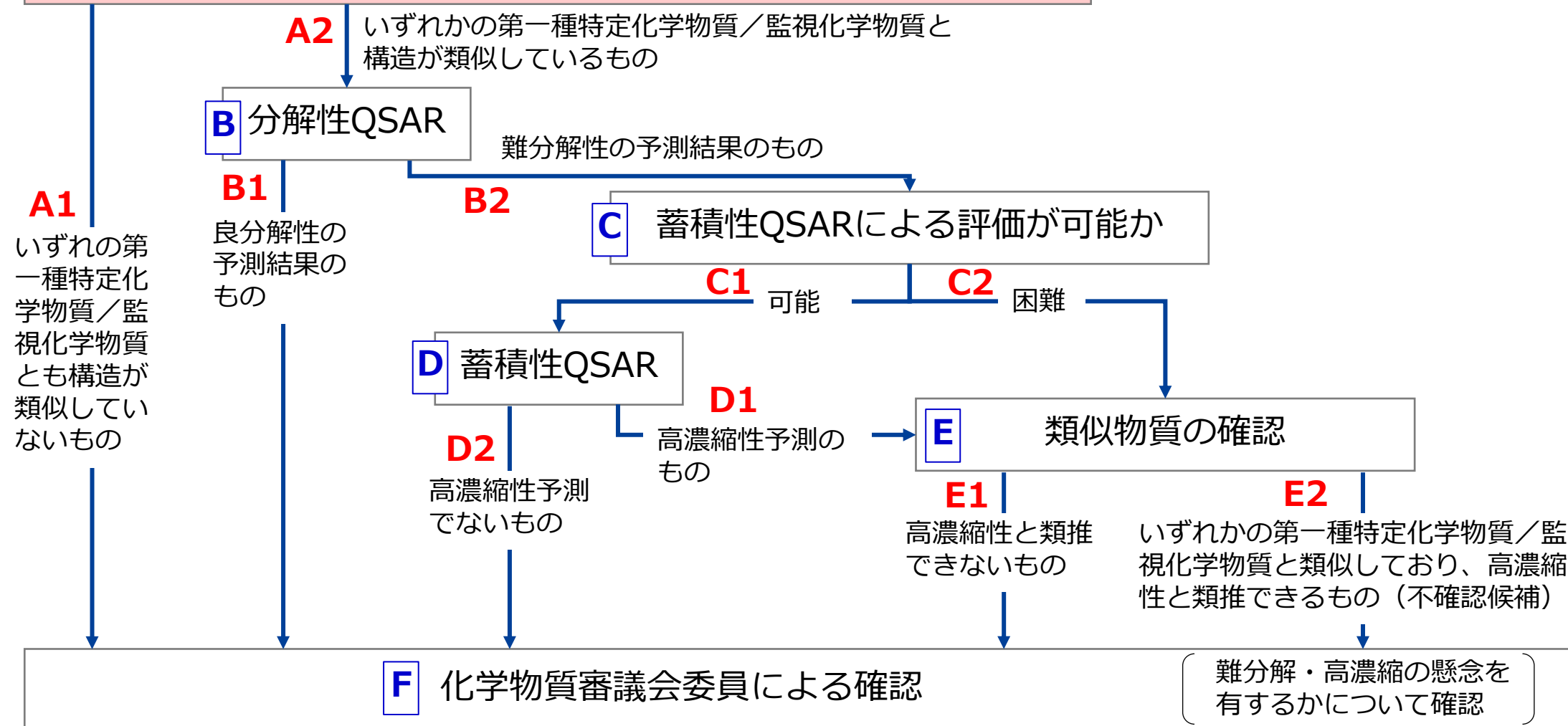
Structure

- Structure info
- Parameters
- Physical Chemical Properties
- Environmental Fate and Transport
- Ecotoxicological Information
- Human Health Hazards

	1	2	3	4	5	6
Structure						

A 一特／監視類似物質検出ツール

A 第一種特定化学物質／監視化学物質との構造類似物質検出ツール



A 一特／監視類似物質検出ツール

評価対象物質の構造情報を基に以下の4つの項目の判定を行う

Level 1：一特/監視物質との構造類似性がある（安全サイドの判定）

Level 2：一特/監視物質との構造類似性が高い

Level 3：一特/監視物質に該当する

POPs：POPs対象物質（一特/監視物質でないもの）へ該当する

ケース	検出ツールの判定結果				解釈	評価フローとの対応
	Level 1	Level 2	Level 3	POPs		
1	N/A	N/A	N/A	N/A	いずれの一特/監視物質とも 構造類似性がない 。 いずれのPOPs対象物質にも 該当しない 。	→ A1 （不確認となる可能性は低い）
2	番号	N/A	N/A	N/A	番号（L1）の一特/監視グループ※との 構造類似性がある 。	→ A2
3	番号	番号	N/A	N/A	番号（L2）の一特/監視物質との 構造類似性が高い 。	E に進んだ場合は、特に慎重な精査が必要。
4	番号	番号	番号	N/A	番号（L3）の一特/監視物質に 該当する 。	後続のフローによらず 不確認
5	（判定結果によらない）			略称	略称のPOPs対象物質に 該当する 。	

QSAR TOOLBOX

Input Profiling **1** Data Category definition Data Gap Filling Report

Profiling Custom profile

3 Apply New Delete

Profile chemicals (F9)
Applies selected profiling schemes on
Press F1 for more help.

対象物質.txt

Structure

Structure info
Parameters
Physical Chemical Properties
Environmental Fate and Transport
Ecotoxicological Information
Human Health Hazards

Profiling methods
Options 4 Selected
f Select All Unselect All Invert
Custom
Example Prioritization Scheme (PBT)
Level1
Level2
Level3
POPs **2**

Metabolism/Transformations
Options 0 Selected
f Select All Unselect All Invert
Documented
Observed Mammalian metabolism
Observed Microbial metabolism
Observed Rat In vivo metabolism
Observed rat liver metabolism with su

The OECD QSAR Toolbox
for Grouping Chemicals
into Categories
Developed by LMC, Bulgaria

2 3 4 5 6

Chemical structures are displayed in the main window.

Applyをクリックしたら少し待つ

- ① Profilingモジュールをクリック
- ② 使用するプロファイラにチェックを入れる
- ③ Applyボタンをクリックしたら少し待つ

Input

Profiling

Data

Category definition

Data Gap Filling

Report

Profiling

Custom profile

Apply

View

New

Delete

Documents

Document 1

[C: 6;Md: 0;P: 0] 少量新規評価対象物質.txt

Profiling methods

Options 4 Selected

f

Select All

Unselect All

Invert

☒ Custom

☐ Example Prioritization Scheme (PBT)

☒ Level1

☒ Level2

☒ Level3

☒ POPs

Metabolism/Transformations

Options 0 Selected

f

Select All

Unselect All

Invert

☐ Documented

☐ Observed Mammalian metabolism

☐ Observed Microbial metabolism

☐ Observed Rat In vivo metabolism

☐ Observed rat liver metabolism with au

Filter endpoint tree...

Structure

Structure info

Parameters

Physical Chemical Properties

Environmental Fate and Transport

Ecotoxicological Information

Human Health Hazards

Profiling

Custom

Level1

Level2

Level3

POPs

1	2	3	4	5	6
19A	10	07A	07A	(A)	(f)
Monitoring_37_4-sec...	(N/A)	(N/A)	(N/A)	(N/A)	(f)
Monitoring_37_4-sec...	(N/A)	(N/A)	(N/A)	(N/A)	(f)
(N/A)	(N/A)	(N/A)	(N/A)	Methoxychlor	(f)

The OECD QSAR Toolbox
for Grouping Chemicals
into Categories

Developed by LMC, Bulgaria

POPsに該当する
= POPs条約で指定が決まっている
= 少量新規化学物質として確認されない

Level3に該当する
= 一特/監視物質である
= 少量新規化学物質として確認されない

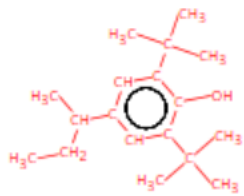
詳細を確認するためにはセルをダブルクリック

Categories

Filter:

- Monitoring_21_Hydrogenated terphenyl
- Monitoring_22_Dibenzyltoluene
- Monitoring_23_Triethylbiphenyl
- Monitoring_24_N,N-Dicyclohexyl-1,3-benzothiazole-
- Monitoring_25_2-(2H-1,2,3-Benzotriazol-2-yl)-6-sec-
- Monitoring_26_2,4-Di-tert-butyl-6-[(2-nitrophenyl)di
- Monitoring_27_Perfluoro(1,2-dimethylcyclohexane)
- Monitoring_28_2,2',6,6'-Tetra-tert-butyl-4,4'-methyle
- Monitoring_29_Perfluorododecanoic acid
- Monitoring_30_Perfluorotridecanoic acid
- Monitoring_31_Perfluorotetradecanoic acid
- Monitoring_32_Perfluoropentadecanoic acid
- Monitoring_33_Perfluorohexadecanoic acid
- Monitoring_34_Perfluoroheptane
- Monitoring_35_Perfluorooctane
- Monitoring_36_2,2,3,3,4,4,5-Heptafluoro-5-(perfluor
- Monitoring_37_4-sec-Butyl-2,6-di-tert-butylphenol

Explanation



Map 1

Definition Properties Training Set Literature MetaInfo Table Custom Captions Scheme

chemical substance name

Monitoring Specified Chemical Substance No.37

4-sec-Butyl-2,6-di-tert-butylphenol

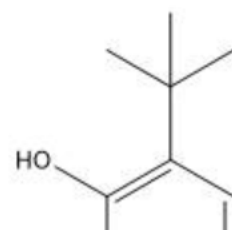
監視化学物質 政令番号 37

4-sec-ブチル-2,6-ジ-tert-
ブチルフェノール

Structural alert

Monitoring_37_4-sec-Butyl-2,6-di-tert-butylphenol

Structural definition



Input
 Profiling
 Data
 Category definition
 Data Gap Filling
 Report

Apply
 View
 New
 Delete

The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories

Developed by LMC, Bulgaria

Documents

Document 1

[C: 6;Md: 0;P: 0] 少量新規評価対象物質.txt

Profiling methods

Options 4 Selected

f Select All Unselect All Invert

☒ Custom

- ☐ Example Prioritization Scheme (PBT)
- ☒ Level1
- ☒ Level2
- ☒ Level3
- ☒ POPs

Metabolism/Transformations

Options 0 Selected

f Select All Unselect All Invert

☐ Documented

- ☐ Observed Mammalian metabolism
- ☐ Observed Microbial metabolism
- ☐ Observed Rat In vivo metabolism
- ☐ Observed rat liver metabolism with su

Filter endpoint tree...

Structure

Structure info

Parameters

Physical Chemical Properties

Environmental Fate and Transport

Ecotoxicological Information

Human Health Hazards

Profiling

Custom

Level1

Level2

Level3

POPs

2	3	4	5	6
10	07A	07A	(N/A)	(N/A)
(N/A)	(N/A)	(N/A)	(N/A)	(N/A)
(N/A)	(N/A)	(N/A)	(N/A)	(N/A)
(N/A)	(N/A)	(N/A)	Methoxychlor	(N/A)

いずれにも該当しない
= これ以降の評価は不要
(A1)

Input
 Profiling
 Data
 Category definition
 Data Gap Filling
 Report

Profiling

Custom profile

Apply
 View
 New
 Delete

The OECD QSAR Toolbox
for Grouping Chemicals
into Categories

Developed by LMC, Bulgaria

Documents

Document 1
 [C: 6;Md: 0;P: 0] 少量新規評価対象物質.txt

Profiling methods

Options 4 Selected
 f Select All Unselect All Invert
☒ Custom
☐ Example Prioritization Scheme (PBT)
☒ Level1
☒ Level2
☒ Level3
☒ POPs

Metabolism/Transformations

Options 0 Selected
 f Select All Unselect All Invert
☐ Documented
☐ Observed Mammalian metabolism
☐ Observed Microbial metabolism
☐ Observed Rat In vivo metabolism
☐ Observed rat liver metabolism with au

Filter endpoint tree...

Structure

Structure info

Parameters

Physical Chemical Properties

Environmental Fate and Transport

Ecotoxicological Information

Human Health Hazards

Profiling

Custom

Level1

Level2

Level3

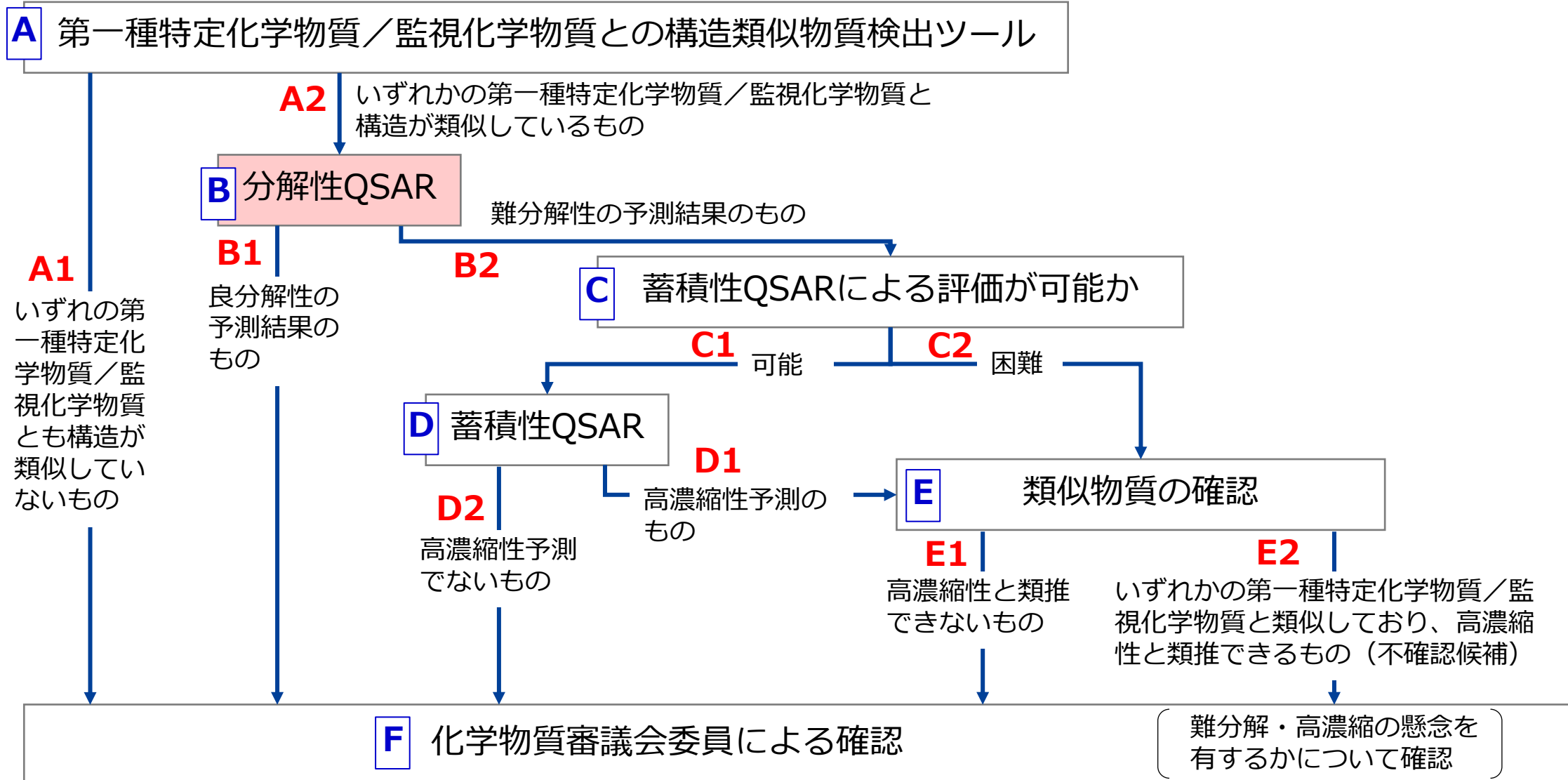
POPs

2	3	4	5	6
10	07A	07A	(N/A)	
(N/A)	(N/A)	(N/A)	(N/A)	
(N/A)	(N/A)	(N/A)	(N/A)	
(N/A)	(N/A)	(N/A)	(N/A)	Methoxychlor

Level1のみに該当した
3物質について、評価
フローを続ける

これ以降の評
価が不要な物
質は
右クリック
Delete
で削除する

B 分解性QSAR



Input
 Profiling
 Data
 Category definition
 Data Gap Filling
 Report

Apply
 View
 New
 Delete

Profiling
 Custom profile

The OECD QSAR Toolbox
for Grouping Chemicals
into Categories

Developed by LMC, Bulgaria

Documents

Document 1

- [C: 6;Md: 0;P: 0] 少量新規評価対象物質.txt
 - [C: 5;Md: 0;P: 0] Deleted chemical: 少量
 - [C: 4;Md: 0;P: 0] Deleted chemical: 少量
 - [C: 3;Md: 0;P: 0] Deleted chemical: 少量

Profiling methods

Options 4 Selected

f	Select All	Unselect All	Invert
---	------------	--------------	--------

☒ Custom

- ☐ Example Prioritization Scheme (PBT)
- ☒ Level1
- ☒ Level2
- ☒ Level3
- ☒ POPs

Metabolism/Transformations

Options 0 Selected

f	Select All	Unselect All	Invert
---	------------	--------------	--------

☐ Documented

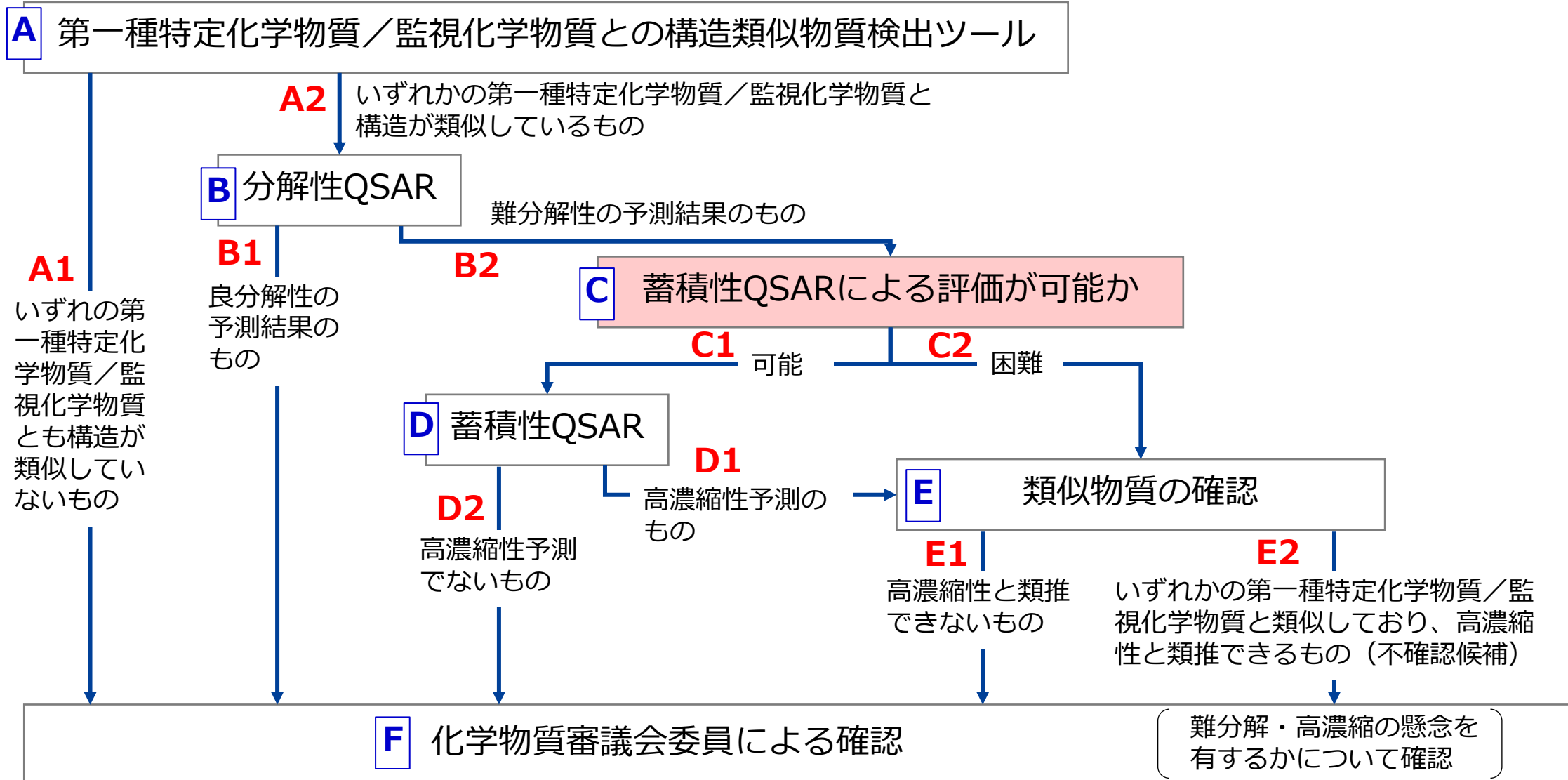
- ☐ Observed Mammalian metabolism
- ☐ Observed Microbial metabolism
- ☐ Observed Rat In vivo metabolism
- ☐ Observed rat liver metabolism with...

Filter endpoint tree...

Structure	1	2	3
BAF (upper trophic)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Basic pKa (OASIS Regression)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BCF	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BCF (lower trophic)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BCF (mid trophic)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BCF (upper trophic, biotransformation...)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BCF (upper trophic)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Bio Half-Life	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Biodeg probability (Biowin 1)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Biodeg probability (Biowin 2)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Biodeg probability (Biowin 5)	0.181	-0.0212	0.157
Biodeg probability (Biowin 6)	0.0302	0.0029	0.0218
Biodeg probability (Biowin 7)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BioHC Half-Life	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Biotransformation Half-Life	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Boiling point	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Exp Boiling Point	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Exp Henrys Law Constant	Not calculated	Not calculated	Not calculated

同様にBiowin6も計算
Biowin5, 6ともに、
0.5以上で良分解
= 3物質とも難分
解と予測した

C 蓄積性QSARによる評価が可能か



C 蓄積性QSARによる評価が可能か

一特/監視類似物質の一部については、蓄積性QSARによる評価が難しい傾向があることが確認されているため、蓄積性QSARによる評価（D）を行わずに類似物質の確認（E）を行う

- 蓄積性QSARによる評価を行わない物質（C2）
一特/監視類似物質検出ツールのLevel 1の判定で用いた物質のグループのうち、以下の番号のもの
3, 6, 8, 10, 11, 12, 13, 14B, 16, 19A, 19B, 20, 22, 23, 24, 25, 29, 30, 31
- 蓄積性QSARによる評価が可能な物質（C1）
上記の番号以外の物質のグループ

QSAR TOOLBOX



Input



Profiling



Data



Category definition



Data Gap Filling



Report



The OECD QSAR Toolbox
for Grouping Chemicals
into Categories

Developed by LMC, Bulgaria

Profiling

Custom profile



Apply



View



New



Delete

Documents

- Document 1
 - [C: 6;Md: 0;P: 0] 少量新規評価対象物質.txt
 - [C: 5;Md: 0;P: 0] Deleted chemical: 少量
 - [C: 4;Md: 0;P: 0] Deleted chemical: C
 - [C: 3;Md: 0;P: 0] Deleted chemi

Profiling methods

- Options 4 Selected
- f Select All Unselect All Invert
- ☒ Custom
 - ☐ Example Prioritization Scheme (PBT)
 - ☒ Level1
 - ☒ Level2
 - ☒ Level3
 - ☒ POPs

Metabolism/Transformations

- Options 0 Selected
- f Select All Unselect All Invert
- ☐ Documented
 - ☐ Observed Mammalian metabolism
 - ☐ Observed Microbial metabolism
 - ☐ Observed Rat In vivo metabolism
 - ☐ Observed rat liver metabolism with au

Filter endpoint tree...

Structure

- Ultimate biodeg (Biowin 3)
- Vapor Pressure (Antoine method)
- Vapor Pressure (Mackay method)
- Vapor Pressure (Modified Grain Method)
- Water Solubility
- Water Solubility (fragments)

3D

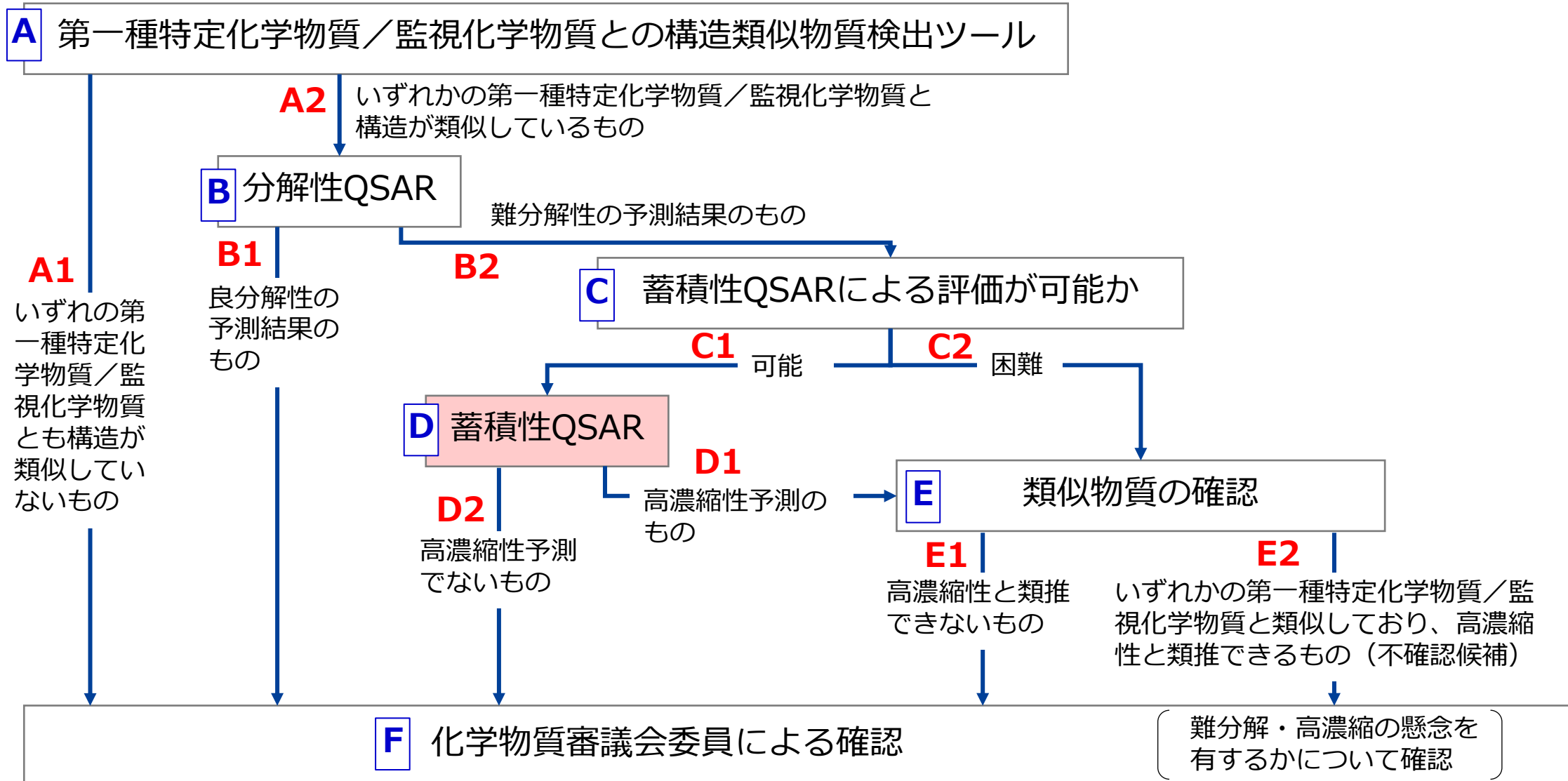
- Physical Chemical Properties
- Environmental Fate and Transport
- Ecotoxicological Information

蓄積性QSARによる
評価をしないで類推
評価をする(C2)

	1	2	3
Structure			
Ultimate biodeg (Biowin 3)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Vapor Pressure (Antoine method)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Vapor Pressure (Mackay method)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Vapor Pressure (Modified Grain Method)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Water Solubility	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Water Solubility (fragments)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
3D			
Physical Chemical Properties			
Environmental Fate and Transport			
Ecotoxicological Information			
H			
P			
10	(N/A)	07A	07A
Levels	(N/A)	(N/A)	(N/A)
POPs	(N/A)	(N/A)	(N/A)

蓄積性QSARによ
る評価をする(C1)

D 蓄積性QSAR



D 蓄積性QSAR

3つのQSARモデルのうち、2つ以上が「BCF1000以上」と予測した物質を高濃縮予測（D1）とする

QSAR予測結果の分類		
BCFBAF ^{*1}	Arnot-Gobas ^{*2}	Baseline model
BCF1000 以上 (logBCF3以上)		
BCF1000未満 (logBCF3未満)		

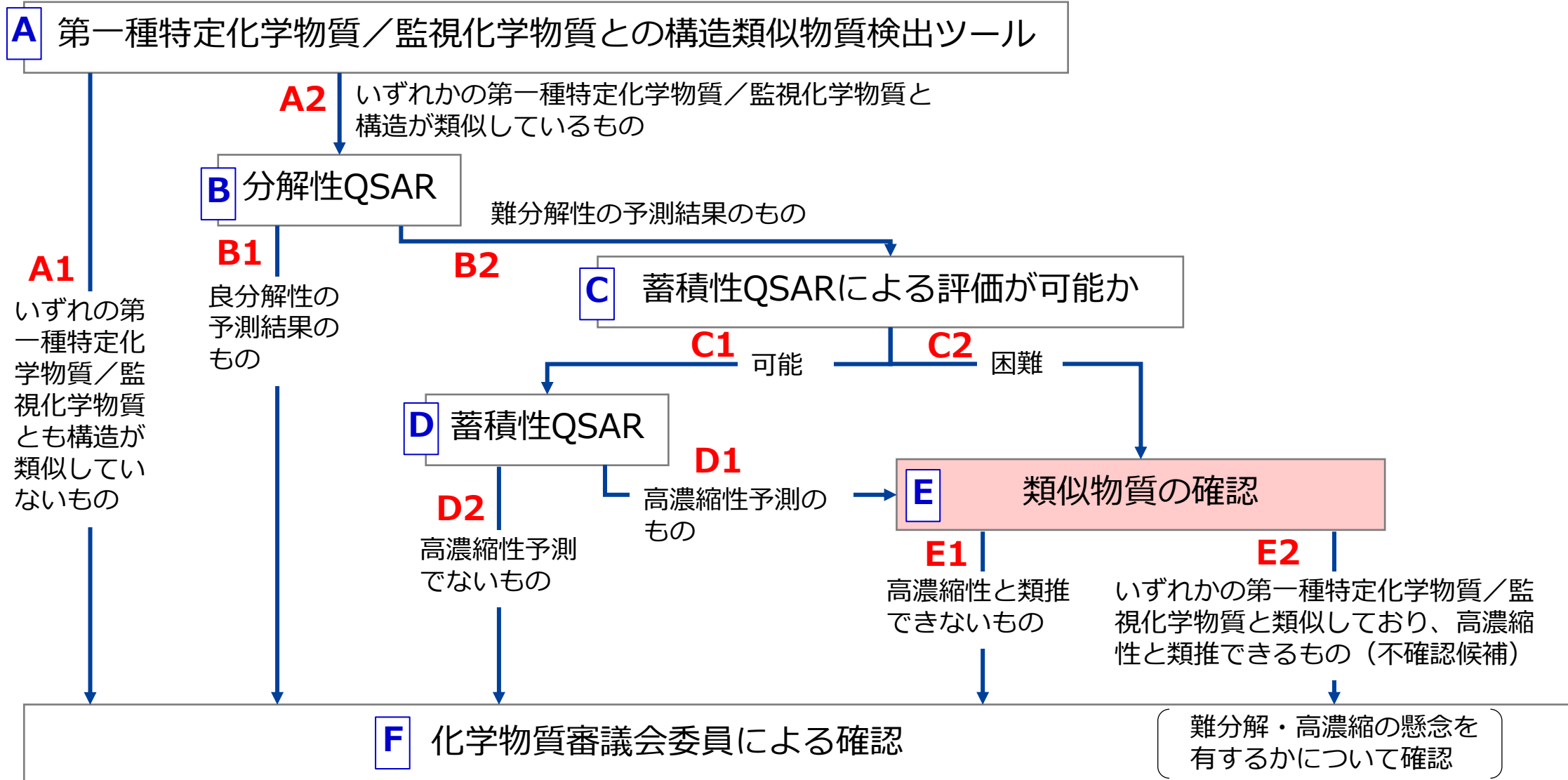
*1: regression-based estimate

*2: lower trophic



評価フローの分類	
QSAR予測結果	分類
BCF1000以上と予測したQSARが2つ以上	高濃縮性予測 (→ D1)
BCF1000以上と予測したQSARが2つ未満	高濃縮性予測でない (→ D2)

E 類似物質の確認



類似物質の検索方法

- 構造類似度から検索
 - 簡単
 - 検索された物質が同じような濃縮性を持つかの検討が必要
- 検索対象構造を指定して検索
 - 部分構造を指定して検索
 - 「基本骨格」「濃縮性に影響する官能基」を指定する
 - SMARTSを使用して検索
 - 「置換位置不特定」「炭素鎖長に範囲がある」等の複雑な検索が可能
 - https://qsartoolbox.org/wp-content/uploads/2020/04/Tutorial_24_SMARTS_structures-search.pdf
- 一特／監視類似物質検出ツールLevel1で同じ物質群になった物質を検索

複数の検索方法を使って類似物質を探すことが必要

類似物質の検索方法

- 構造類似度から検索
 - 簡単
 - 検索された物質が同じような濃縮性を持つかの検討が必要
- 検索対象構造を指定して検索
 - 部分構造を指定して検索
 - 「基本骨格」「濃縮性に影響する官能基」を指定する
 - SMARTSを使用して検索
 - 「置換位置不特定」「炭素鎖長に範囲がある」等の複雑な検索が可能
 - https://qsartoolbox.org/wp-content/uploads/2020/04/Tutorial_24_SMARTS_structures-search.pdf
- 一特／監視類似物質検出ツールLevel1で同じ物質群になった物質を検索

どのような物質にも最適な検索方法というものは無いため、複数の検索方法を使って類似物質を探すことが必要

類似物質の検索方法

- 構造類似度から検索
 - 類似物質を検索するデータベースを指定する
 - 類似度の計算方法、しきい値を指定する
 - 検索する
 - 検索された物質の実測値を集める
 - 実測値のある物質の中からどの物質を類似物質とするかを判断する

Developed by LMC, Bulgaria

評価したい物質を右クリック
Set as new targetを選択

QSAR TOOLBOX

Input Profiling Data **Category definition** Data Gap Filling Report

Categoryize Category consistency

Define with metabolism Subcategorize Combine Clustering Category elements

The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria

Create Category

Creates a category by collecting of an...
The target chemical and the selected...
Press F1 for more help.

対象物質.txt
chemical: 少量
d chemical: D
leted chemical

[C: 2;Md: 0;P: 0] Deleted chei
[C: 1;Md: 0;P: 0] Select fr

Structure similarity

Options 1 Selected

Select All Unselect All Invert About Option

Organic functional groups (nested)
Organic functional groups (US EPA)
Organic functional groups, Norbert Haider (
Structure similarity
Tautomers unstable

Toxicological
Repeated dose (HESS)

Custom
Example Prioritization Scheme (PBT)
Level1

Filter endpoint tree...

Structure

BAF (upper trophic, biotransformation...	Not calculated
BAF (upper trophic)	Not calculated
Basic pKa (OASIS Regression)	Not calculated
BCF	3.47 log(L/kg)
BCF (lower trophic)	2.39 log(L/kg)
BCF (mid trophic)	Not calculated
BCF (upper trophic, biotransformation...	Not calculated
BCF (upper trophic)	Not calculated
Bio Half-Life	Not calculated
Biodeg probability (Biowin 1)	Not calculated
Biodeg probability (Biowin 2)	Not calculated
Biodeg probability (Biowin 5)	-0.0212
Biodeg probability (Biowin 6)	0.0029
Biodeg probability (Biowin 7)	Not calculated
BioHC Half-Life	Not calculated
Biotransformation Half-Life	Not calculated
Boiling point	Not calculated
Exp Boiling Point	Not calculated

1 [target]

Oc1ccc(cc1)C2=CC(=C(C=C2)O)O

- ① Category definitionモジュールをクリック
- ② 使用するプロファイルを選択（今回はStructure similarity）
- ③ Defineボタンをクリックする

Documents

Document 1

- [C: 6;Md: 0;P: 0] 少量新規評価対象物質.txt
 - [C: 5;Md: 0;P: 0] Deleted chemical: 少量:
 - [C: 4;Md: 0;P: 0] Deleted chemical: D
 - [C: 3;Md: 0;P: 0] Deleted chemical:
 - [C: 2;Md: 0;P: 0] Deleted chemical:
 - [C: 1;Md: 0;P: 0] Select fr

Structure similarity

Options 1 Selected

Select All Unselect All Invert About Options

- Organic functional groups (nested)
- Organic functional groups (US EPA)
- Organic functional groups, Norbert Haider (
- Structure similarity**
- Tautomers unstable
- Toxicological**
 - Repeated dose (HESS)
- Custom**
 - Example Prioritization Scheme (PBT)
 - Level1

Grouping options (Structure similarity)

Target categories
[90%,100%]

Options

Down Up Reset Options

All categories

- [70%,80%]
- [80%,90%]
- ERROR!

Combine profiles

AND OR

Invert result

Strict

Sort results

OK Cancel

- ① 使用するカテゴリー（類似度）を選択
- ② Upボタンをクリックする
- ③ Combine profilesをORにする
- ④ OKボタンをクリックする

今回は60%以上
(ほどよい数の類似物質候補
が検索されるしきい値を試行
錯誤する)

Input

Profiling

Data

Category definition

Data Gap Filling

Report

Categorize

Category consistency

The OECD QSAR Toolbox
for Grouping Chemicals
into Categories

Developed by LMC, Bulgaria

Documents

Document 1

[C: 6;Md: 0;P: 0] 少量新規評価対象物質.txt

[C: 5;Md: 0;P: 0] Deleted chemical: 少量:

[C: 4;Md: 0;P: 0] Deleted chemical: D

[C: 3;Md: 0;P: 0] Deleted chemical: D

[C: 2;Md: 0;P: 0] Deleted chemical: D

[C: 1;Md: 0;P: 0] Select from

[C: 3;Md: 0;P: 0] [60%

Structure similarity

Options 1 Selected

f

Select All

Unselect All

Invert

About

Options

Organic functional groups (nested)

Organic functional groups (US EPA)

Organic functional groups, Norbert Haider (

Structure similarity

Tautomers unstable

Toxicological

Repeated dose (HESS)

Custom

Example Prioritization Scheme (PBT)

Level1

Filter endpoint tree...

1 [target] 2 3

Structure

BAF (	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BAF (	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Basic	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BCF	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BCF (	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BCF (mid trophic)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BCF (upper trophic, biotransformation...	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BCF (upper trophic)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Bio Half-Life	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Biodeg probability (Biowin 1)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Biodeg probability (Biowin 2)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Biodeg probability (Biowin 5)	-0.0212	Not calculated	Not calculated
Biodeg probability (Biowin 6)	0.0029	Not calculated	Not calculated
Biodeg probability (Biowin 7)	Not calculated	Not calculated	Not calculated
BioHC Half-Life	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Biotransformation Half-Life	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Boiling point	Not calculated	Not calculated	Not calculated
Exp Boiling Point	Not calculated	Not calculated	Not calculated

Read data?

☒ All endpoints
 ☐ Choose...

OK

Cancel

- 検索された物質の試験データを収集しない
- 全てのエンドポイントのデータを収集する
- 指定したエンドポイントのデータを収集するを選択する

34



Input



Profiling



Data



Category definition



Data Gap Filling



Report



Categorize

Category consistency

構造式をダブルクリックすると拡大表示される
構造を確認し、どの物質から類推するか検討する

The OECD QSAR Toolbox
for Grouping Chemicals
into Categories

Developed by LMC, Bulgaria

Documents

Filter endpoint tree...

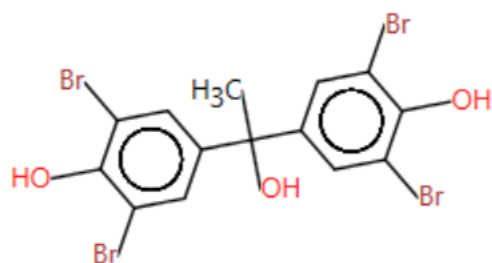
1 [target]

2

3

Depiction

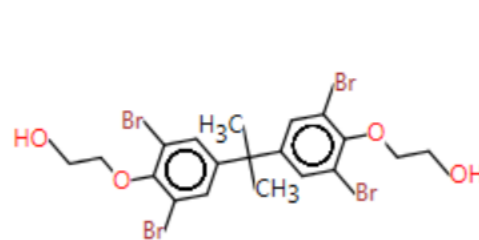
CAS # No CAS number
chemicalC



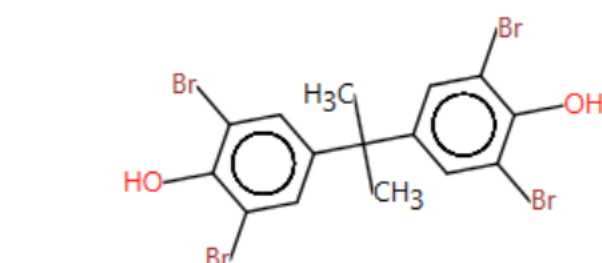
Depiction

CAS # 4162-45-2

"2,2'-[(1-methylethylidene)bis[(2,6-dibromo-4,1-phenylene)oxy]]bis
2,2'-[propane-2,2'-diylbis[(2,6-dibromophenyl)-4,1-diyl]oxy]diethanol"



Depiction



物質Cと基本骨格が同じ
よりOHが少ない = 濃縮性が高い
より分子サイズが大きい = 濃縮性が低い

物質Cと基本骨格が同じ
よりOHが少ない = 濃縮性が高い

この物質から類推

Categorize

Category consistency

Define	Define with metabolism	Subcategorize	Combine	Clustering	Category elements
Define Define with metabolism	Define with metabolism	Subcategorize	Combine	Clustering	Category elements

Documents

Document 1

[C: 6;Md: 0;P: 0] 少量新規評価対象物質.txt

Deleted chemical: 少量

📄 [C: 4;Md: 0;P: 0] Deleted chemical: C

📄 [C: 3;Md: 0;P: 0] Deleted chemical

▲ [C: 2;Md: 0;P: 0] Deleted chem

👤 [C: 1;Md: 0;P: 0] Select from

[C: 3;Md: 4;P: 0] [60%

Filter endpoint tree...

Structure

- Ultimate biodeg (Biowin 3)

- Vapor Pressure (Antoine method)

- Vapor Pressure (Mackay method)

- Vapor Pressure (Modified Grain Method)

Water Solubility

Water Solubility (fragments)

3D

Physical Chemical Properties

Environmental Fate and Transport

Ecotoxicological Information

⊕ Human Health Hazards

Profiling

Custom

- Level1

- Level2

- Level3

POP_s

1 [target]

2

3

07A

(N/A)

(N/A)

(N/A)

BCE 485 L/kgの類似物質よりも濃縮性が低いと
考えられる
= 物質Cは高濃縮性と類推できない(E1)

類推の注意

- 構造類似性が高いほど濃縮性の値が近いとは限らない
物質の構造やsimilarityの計算方法によっては蓄積の傾向が異なる物質の類似度が高くなることもあるため、複数の類似物質候補から選定する
- NITEでは非公開情報も活用して類推を行っているため、異なる類似物質の情報を使用することがある
- 類推結果について疑問がある場合は化審法連絡システムでお問い合わせください

<https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/kasinnrenraku/toiawase/informationForm.html>

(お問合せ分類：少量新規化学物質における分解性・蓄積性の評価フローに関するお問合せ)