QSAR Toolboxのよくある質問

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

本講義の内容

- QSAR Toolboxを使って独自データを扱えませんか？
  - 独自データベースをインポートする
- 検索したデータをエクセルで扱うにはどうすればよいですか？
  - データをエクスポートする
- どのプロファイラを選択すればよいですか？
  - プロファイラの詳細を確認する
- グラフの軸を変えられませんか？

QSAR Toolboxを使って独自データを扱えませんか？

- QSAR Toolboxは、エクセルやIUCLID6で整理されたデータをデータベースとしてインポートできます

- IUCLID6形式のデータをインポートする方法の公式チュートリアル動画
  https://qsartoolbox.org/support/
  VIDEO TUTORIALS 13. Import IU database

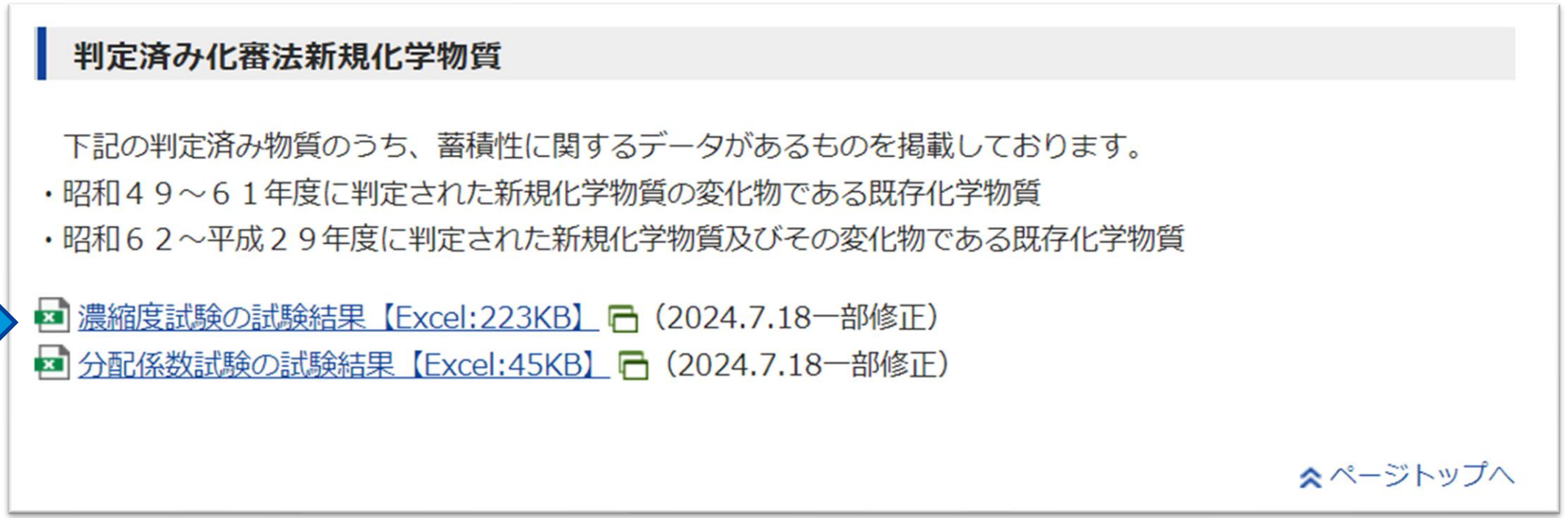
- 今回はエクセルで整理されたデータをインポートします

目標

データベース一覧の中に独自データが登録されていて検索やデータギャップ補間に利用できる

データを用意する

- 今回はNITEホームページで公開している、判定済化審法新規化学物質の濃縮度試験結果を使用します
  https://www.nite.go.jp/chem/qsar/toolbox.html



判定済み化審法新規化学物質

下記の判定済み物質のうち、蓄積性に関するデータがあるものを掲載しております。

・昭和４９～６１年度に判定された新規化学物質の変化物である既存化学物質

・昭和６２～平成２９年度に判定された新規化学物質及びその変化物である既存化学物質

濃縮度試験の試験結果【Excel:223KB】（2024.7.18一部修正）

分配係数試験の試験結果【Excel:45KB】（2024.7.18一部修正）

ページトップへ

A1　昭和４９～６１年度に判定された新規化学物質の変化物である既存化学物質並びに昭和６２～平成２９年度に判定された新規化学物

	A	B	C	D	E	F	
1	昭和49～61年度に	判定された新規化学物質の変化物である既存化学物質並びに昭和62～平成29年度に判定された新規化学物質及びその変化物が既存化学物質であるもののうち、蓄積性に関するデータが					
2		※1:試験結果(Data.MeanValue)については、濃縮度試験における定常状態のBCF、それがない場合はBCFの最大値。					
3		※2:特段の記載がない場合は、試験に用いた物質は官報公示名称と同一の物質。					
4		※3:今回追加した平成29年度に判定された新規化学物質及びその変化物である既存化学物質はオレンジ色のセルで示した。					
5	Chemical IDs	CAS	Chemical names	SMILES	SMILES(主成分等記載)	Test guidel	Er
6	2－4094		ナトリウム＝2，2，4，4，5，5，7，7，8，8，8－ウン	FC(F)(C(F)(OC(F)(C(O[Na])=O)F)F)OC(F)(F)C(F)(F)F	FC(F)(C(F)(OC(F)(C(O[Na])=O)F)F)OC(F)(F)C(F)(F)F	TG305	En
7	5－6891	35554-44-0	1－[2－(アリルオキシ)－2－(2，4－ジクロロフェニ	C=CCOC(CN1C=NC=C1)C2=CC=C(Cl)C=C2Cl	C=CCOC(CN1C=NC=C1)C2=CC=C(Cl)C=C2Cl	TG305	En
8	4－1934		4，4′－(4－イソプロピル－1－メチルシクロヘキサ	CC1(CC(C(CC1)C(C)C)C2=CC=C(O)C=C2)C3=CC=C(	CC1(CC(C(CC1)C(C)C)C2=CC=C(O)C=C2)C3=CC=C(	TG305	En
9	3－4597	3848-51-9	ジフェニル＝(フェニルアミド)ホスファートを主成分	O=P(OC4=CC=CC=C4)(OC5=CC=CC=C5)NC6=CC=	O=P(OC4=CC=CC=C4)(OC5=CC=CC=C5)NC6=CC=	TG305	En
10	4－1933	16611-67-9	(2，5－ジクロロフェニル)(フェニル)メタノン	O=C(C1=CC=CC=C1)C2=C(Cl)C=CC(Cl)=C2	O=C(C1=CC=CC=C1)C2=C(Cl)C=CC(Cl)=C2	TG305	En
11	5－6893	875-35-4	2，6－ジクロロ－4－メチルニコチノニトリル	CC1=CC(Cl)=NC(Cl)=C1C#N	CC1=CC(Cl)=NC(Cl)=C1C#N	TG305	En
12	5－6924		ジメチル＝イミダゾール－4，5－ジカルボキシラート	O=C(OC)C1=C(C(OC)=O)NC=N1	O=C(OC)C1=C(C(OC)=O)NC=N1	TG305	En
13	5－6894	250736-57-3	ジアゾ[ビス(1，4－ジオキサスピロ[4．5]デカン－7	O=S(C1CC2(OCCO2)CCC1)(C(S(C3CC4(OCCO4)CC	O=S(C1CC2(OCCO2)CCC1)(C(S(C3CC4(OCCO4)CC	TG305	En
14	4－1948		ヘプタナトリウム＝2－{[1－アミノ－8－ヒドロキシ－	OC1=C2C(C=C(C=C2)/N=N¥C3=C(C=C(C4=CC=C(O)C=C	OC1=C2C(C=C(C=C2)/N=N¥C3=C(C=C(C4=CC=C(O)C=C	TG305	En
15	4－1949		オクタナトリウム＝2－{[2－アニリノ－5－ヒドロキ	OC1=C(/N=N/C2=C(C=CC=C2)S(=O)(O[Na])=O)C(S	OC1=C(/N=N/C2=C(C=CC=C2)S(=O)(O[Na])=O)C(S	TG305	En
16	2－4055	132182-92-4	1，1，1，2，3，4，4，5，5，5－デカフルオロ－3－	COC(F)(C(F)(F)C(F)(F)F)C(F)(C(F)(F)F)C(F)(F)F	COC(F)(C(F)(F)C(F)(F)F)C(F)(C(F)(F)F)C(F)(F)F	TG305	En
17	5－6931		テトラナトリウム＝4－(5－スルホナト－2*H*－ナフト	O=S(C1=CC2=NN(C3=CC(S(=O)(O[Na])=O)=C(C=CC	O=S(C1=CC2=NN(C3=CC(S(=O)(O[Na])=O)=C(C=CC	TG305	En
18	3－4598	731-27-1	*N*－{[ジクロロ(フルオロ)メチル]スルファニル}－*N*	CC1=CC=C(C=C1)N(S(=O)(N(C)C)=O)SC(F)(Cl)Cl	CC1=CC=C(C=C1)N(S(=O)(N(C)C)=O)SC(F)(Cl)Cl	U.S.EPA Pesti	En
19	3－4620		4－(メトキシカルボニル)フェニル＝2，4，5－トリメト	COC1=C(C(OC2=CC=C(C(OC)=O)C=C2)=O)C=C(OC	COC1=C(C(OC2=CC=C(C(OC)=O)C=C2)=O)C=C(OC	TG305	En
20	5－6950		2－{3－[3－(6－*tert*－ブチル－7－クロロ－1*H*－	CC(C)(C1=NN2C(NC(C3=CC(NC(NC(C(N(CC(CCCC)	CC(C)(C1=NN2C(NC(C3=CC(NC(NC(C(N(CC(CCCC)	TG305	En
21	3－4600	3279-07-0	4－*tert*－ブチル－2－ニトロフェノール	OC1=C(C=C(C=C1)C(C)(C)C)[N+]([O-])=O	OC1=C(C=C(C=C1)C(C)(C)C)[N+]([O-])=O	TG305	En
22	2－4106		1－[3－(*N*，*N*－ジメチルアミノ)プロパン－1－イ	NC(NCCCN(C)C)=O.CN(C)CCCNC(NCCCN(C)C)=O	NC(NCCCN(C)C)=O (主成分)	TG305	En
23	2－4056	52591-27-2	3，3，4，4，5，5，6，6，6－ノナフルオロヘキサン－	C=C(C(OCCC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F)=O)[H]	C=C(C(OCCC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F)=O)[H]	TG305	En
24	2－2402	2043-47-2	2－パーフルオロアルキル(C＝4～16)エタノール	OCCC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F	OCCC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F	TG305	En
25	2－4057	701909-41-3	3，3，4，4，5，5，6，6，6－ノナフルオロヘキサン－	C=C(C(OCCC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F)=O)Cl	C=C(C(OCCC(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)C(F)(F)F)=O)Cl	TG305	En
26	5－6897	307492-75-7	1－エチル－2，3－ジメチルイミダゾリウム＝テトラフ	CC1=[N+](C=CN1C)CC.F[B-](F)(F)F	CC1=[N+](C=CN1C)CC.F[B-](F)(F)F	TG305	En
27	5－6899	79983-71-4	(*R*，*S*)－2－(2，4－ジクロロフェニル)－1－(1*H*	ClC1=CC=C(C(CCCC)(CN2C=NC=N2)O)C(Cl)=C1	ClC1=CC=C(C(CCCC)(CN2C=NC=N2)O)C(Cl)=C1	TG305	En
28	5－6898		1，1′－ジデシル－3，3′－[ブタン－1，4－ジイル	CCCCCCCCCC[N+]1=CC(CCCCCCCCCC)=CC=C1	CCCCCCCCCC[N+]1=CC(CCCCCCCCCC)=CC=C1	TG305	En
29	5－6956		2，2，4，4，6，6－ヘキサフェノキシ－1，3，5，2λ	C1(OP2(OC3=CC=CC=C3)=NP(OC4=CC=CC=C4)(O	C1(OP2(OC3=CC=CC=C3)=NP(OC4=CC=CC=C4)(O	TG305	En
30	2－4059		アンモニウム＝2，2，4，4，5，5，7，7，8，8，8－ウ	[NH4]OC(C(OC(C(OC(C(F)(F)F)(F)F)(F)F)(F)F)(F)F)=O	[NH4]OC(C(OC(C(OC(C(F)(F)F)(F)F)(F)F)(F)F)=O	TG305	En

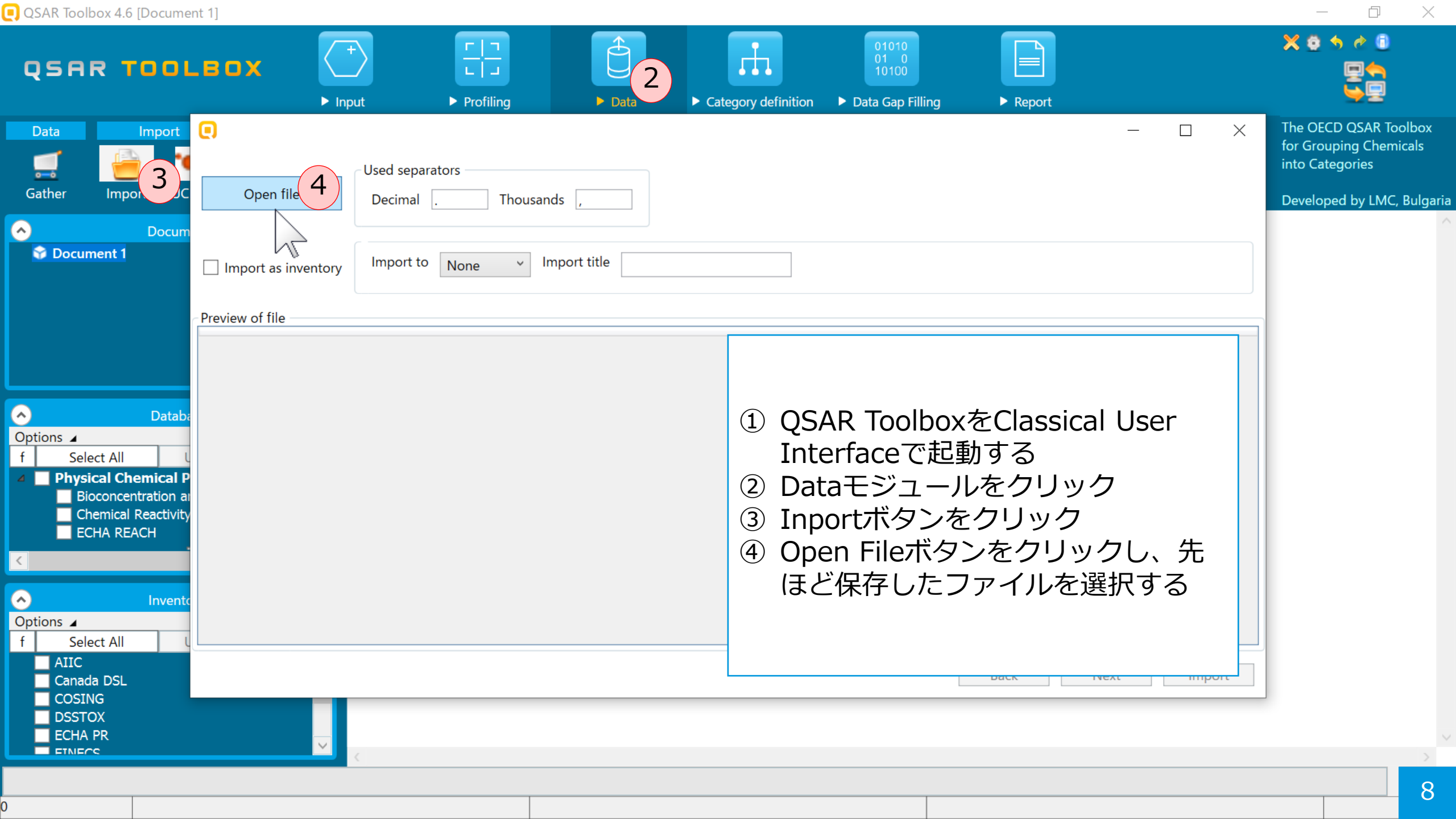
R4_BCF

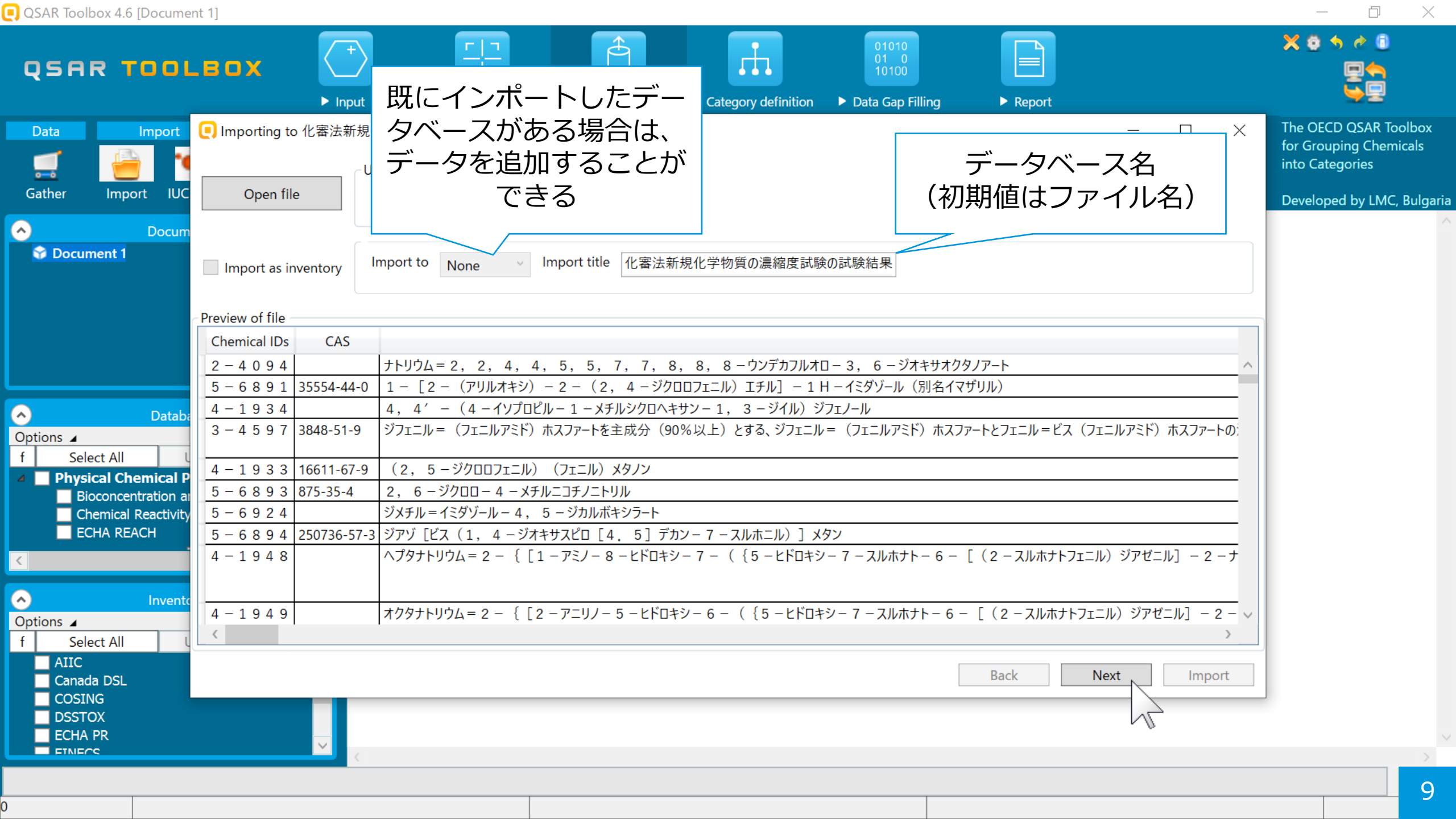
準備完了

データの整形

- データ以外の行を削除する、又は1行目をタイトル、2行目以降をデータにする
- CAS、SMILES、平均値、エンドポイントパスの列は必須

- 必須項目が揃っていることを確認する
- 説明が記載されている上部4行を削除する
- ファイル名を付けて保存する
- ファイルを閉じる


QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Profiling
Data
2
Category definition
Data Gap Filling
Report
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
Data
Import
Gather
3
Open file
4
Used separators
Decimal
Thousands
Import as inventory
Import to
None
Import title
Preview of file
Document 1
Options
Select All
Physical Chemical P
Bioconcentration a
Chemical Reactivity
ECHA REACH
AIIC
Canada DSL
COSING
DSSTOX
ECHA PR
① QSAR ToolboxをClassical User Interfaceで起動する
② Dataモジュールをクリック
③ Inportボタンをクリック
④ Open Fileボタンをクリックし、先ほど保存したファイルを選択する
8


QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Category definition
Data Gap Filling
Report
既にインポートしたデータベースがある場合は、データを追加することができる
データベース名
（初期値はファイル名）
Importing to 化審法新規
Open file
Import as inventory
Import to
None
Import title
化審法新規化学物質の濃縮度試験の試験結果
Preview of file
Chemical IDs
CAS
2－4094
ナトリウム＝2，2，4，4，5，5，7，7，8，8，8－ウンデカフルオロ－3，6－ジオキサオクタノアート
5－6891
35554-44-0
1－［2－（アリルオキシ）－2－（2，4－ジクロロフェニル）エチル］－1H－イミダゾール（別名イマザリル）
4－1934
4，4′－（4－イソプロピル－1－メチルシクロヘキサン－1，3－ジイル）ジフェノール
3－4597
3848-51-9
ジフェニル＝（フェニルアミド）ホスファートを主成分（90%以上）とする、ジフェニル＝（フェニルアミド）ホスファートとフェニル＝ビス（フェニルアミド）ホスファートの
4－1933
16611-67-9
（2，5－ジクロロフェニル）（フェニル）メタノン
5－6893
875-35-4
2，6－ジクロロ－4－メチルニコチノニトリル
5－6924
ジメチル＝イミダゾール－4，5－ジカルボキシラート
5－6894
250736-57-3
ジアゾ［ビス（1，4－ジオキサスピロ［4，5］デカン－7－スルホニル）］メタン
4－1948
ヘプタナトリウム＝2－｛［1－アミノ－8－ヒドロキシ－7－（｛5－ヒドロキシ－7－スルホナト－6－［（2－スルホナトフェニル）ジアゼニル］－2－ナ
4－1949
オクタナトリウム＝2－｛［2－アニリノ－5－ヒドロキシ－6－（｛5－ヒドロキシ－7－スルホナト－6－［（2－スルホナトフェニル）ジアゼニル］－2－
Back
Next
Import
Data
Import
Gather
Import
Document 1
Options
Select All
Physical Chemical P
Bioconcentration a
Chemical Reactivity
ECHA REACH
Options
Select All
AIIC
Canada DSL
COSING
DSSTOX
ECHA PR
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
9


QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Category definition
Data Gap Filling
Report
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
Data
Import
Gather
Import
Importing to 化審法新規
Import mode
Vertical
Horizonta
① 項目名が自動的に読み取られているので、正しく認識されているか確認する
Preview of file
Chemical IDs
CAS
2－4094
5－6891 35554-44-0 1－［2－（アリルオキシ）－2－（2，4－ジクロロフェニル）エチル］－1Ｈ－イミダゾール（別名イマザリル）
4－1934 4，4′－（4－イソプロピル－1－メチルシクロヘキサン－1，3－ジイル）ジフェノール
3－4597 3848-51-9 ジフェニル＝（フェニルアミド）ホスファートを主成分（90％以上）とする、ジフェニル＝（フェニルアミド）ホスファートとフェニル＝ビス（フェニルアミド）ホスファ
4－1933 16611-67-9 （2，5－ジクロロフェニル）（フェニル）メタノン
5－6893 875-35-4 2，6－ジクロロ－4－メチルニコチノニトリル
5－6924 ジメチル＝イミダゾール－4，5－ジカルボキシラート
5－6894 250736-57-3 ジアゾ［ビス（1，4－ジオキサスピロ［4，5］デカン－7－スルホニル）］メタン
4－1948 ヘプタナトリウム＝2－｛［1－アミノ－8－ヒドロキシ－7－（｛5－ヒドロキシ－7－スルホナト－6－［（2－スルホナトフェニル）ジアゼニル］－2
4－1949 オクタナトリウム＝2－｛［2－アニリノ－5－ヒドロキシ－6－（｛5－ヒドロキシ－7－スルホナト－6－［（2－スルホナトフェニル）ジアゼニル］－
2－4055 132182-92-4 1，1，1，2，3，4，4，5，5，5－デカフルオロ－3－メトキシ－2－（トリフルオロメチル）ペンタン
Back
Next
Import
Document 1
Options
Select All
Physical Chemical P
Bioconcentration a
Chemical Reactivity
ECHA REACH
Options
Select All
AIIC
Canada DSL
COSING
DSSTOX
ECHA PR
② Importをクリックしてしばらく待つ
10

QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]

QSAR TOOLBOX

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

The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories

Developed by LMC, Bulgaria

Data | Import

Gather | Import | IUC

Docum

Document 1

Databa

Options | Select All

Physical Chemical P

Bioconcentration a

Chemical Reactivity

ECHA REACH

Invento

Options | Select All

AIIC

Canada DSL

COSING

DSSTOX

ECHA PR

FINECS

Importing to 化審法新規化学物質の濃縮度試験の試験結果

Import mode

Vertical | Horizontal | I have a header row

Preview of file

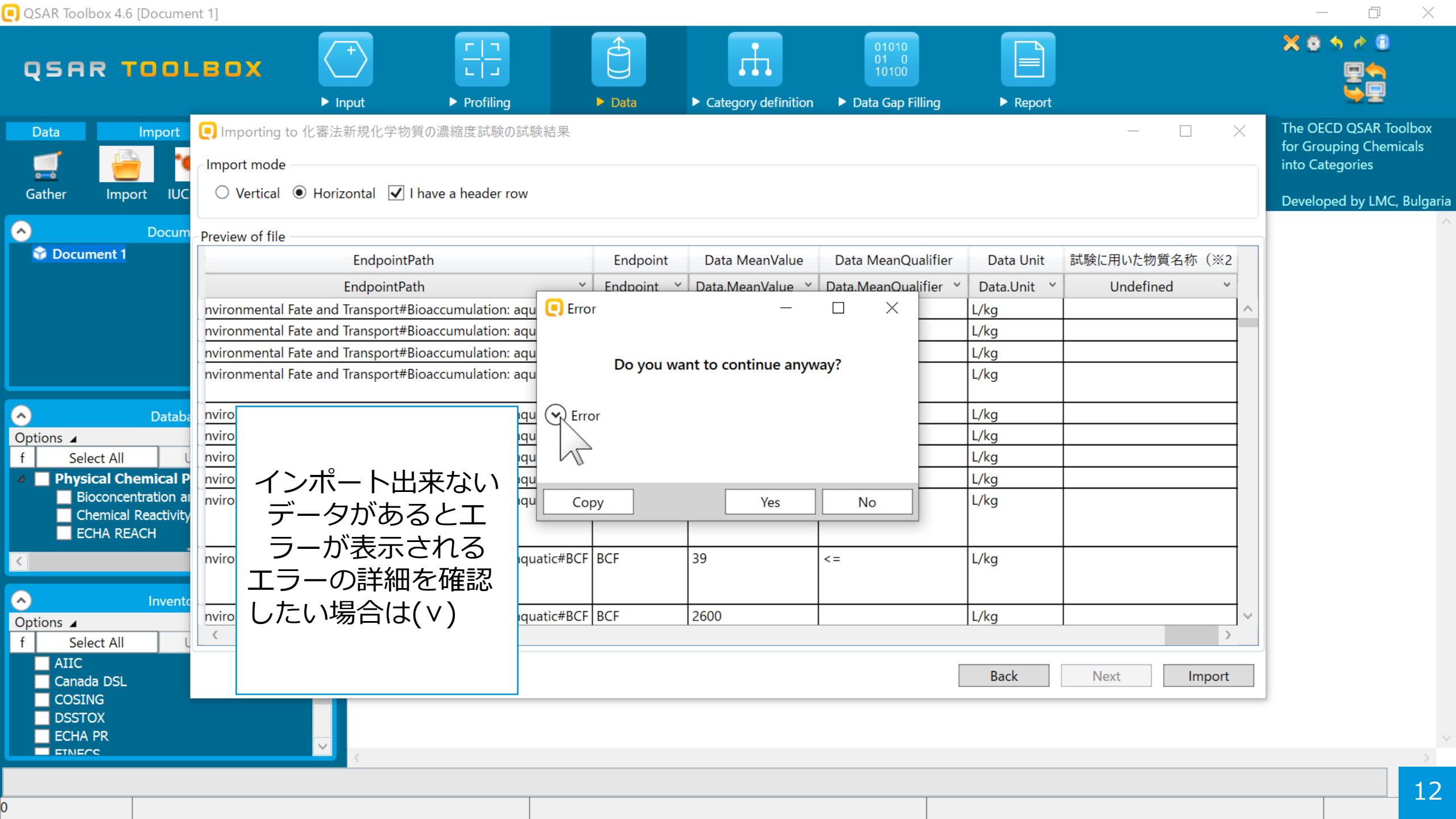
EndpointPath	Endpoint	Data MeanValue	Data MeanQualifier	Data Unit	試験に用いた物質名称（※2
EndpointPath	Endpoint	Data.MeanValue	Data.MeanQualifier	Data.Unit	Undefined
nvironmental Fate and Transport#Bioaccumulation: aquatic#BCF	BCF	5.8	<=	L/kg	
nvironmental Fate and Transport#Bioaccumula				/kg	
nvironmental Fate and Transport#Bioaccumula				/kg	
nvironmental Fate and Transport#Bioaccumula				/kg	
nvironmental Fate and Transport#Bioaccumula				/kg	
nvironmental Fate and Transport#Bioaccumula				/kg	
nvironmental Fate and Transport#Bioaccumula				/kg	
nvironmental Fate and Transport#Bioaccumula				/kg	
nvironmental Fate and Transport#Bioaccumulation: aquatic#BCF	BCF	3	<	/kg	
nvironmental Fate and Transport#Bioaccumulation: aquatic#BCF	BCF	39	<=	L/kg	
nvironmental Fate and Transport#Bioaccumulation: aquatic#BCF	BCF	2600		L/kg	

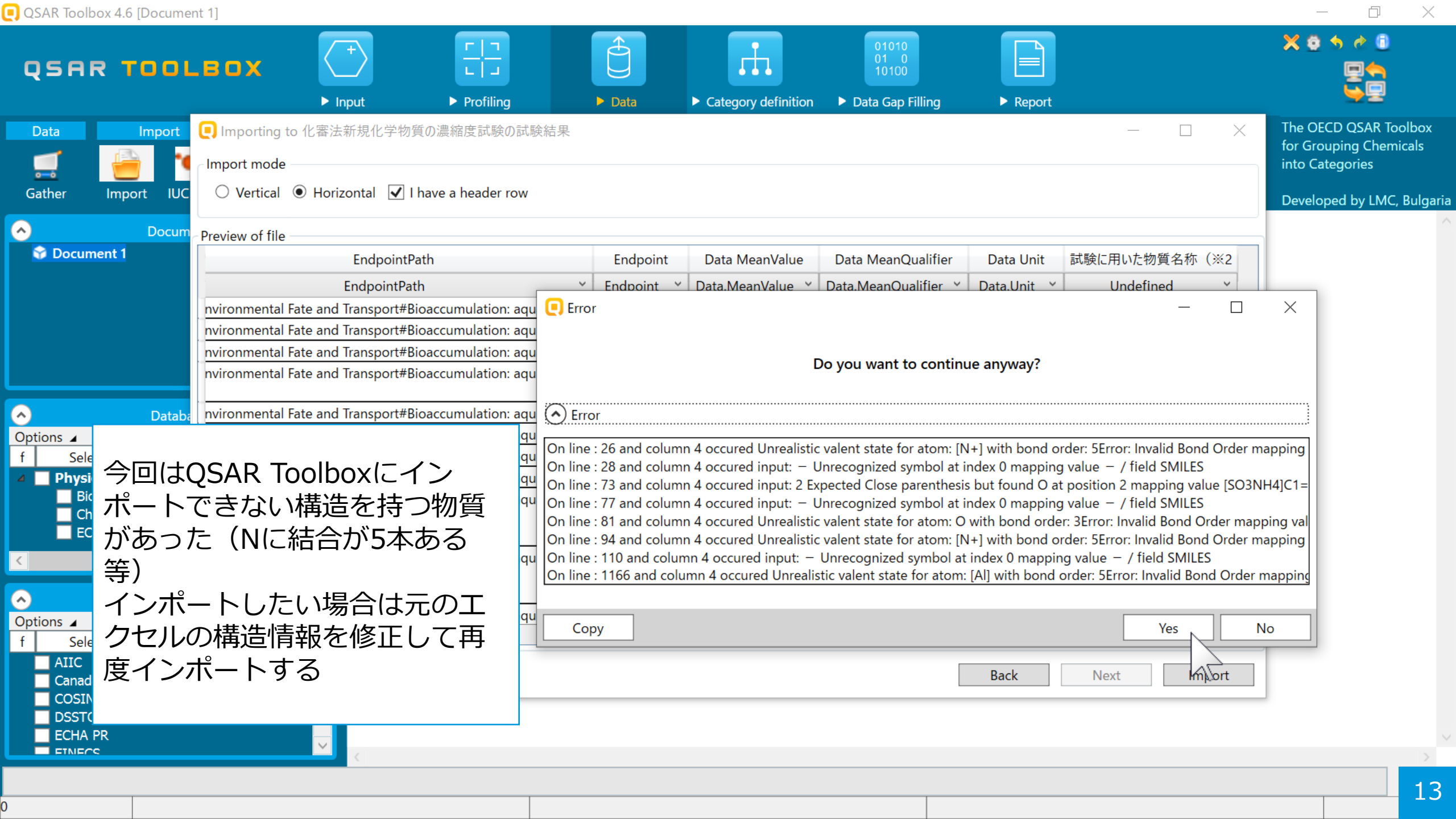
Import finished

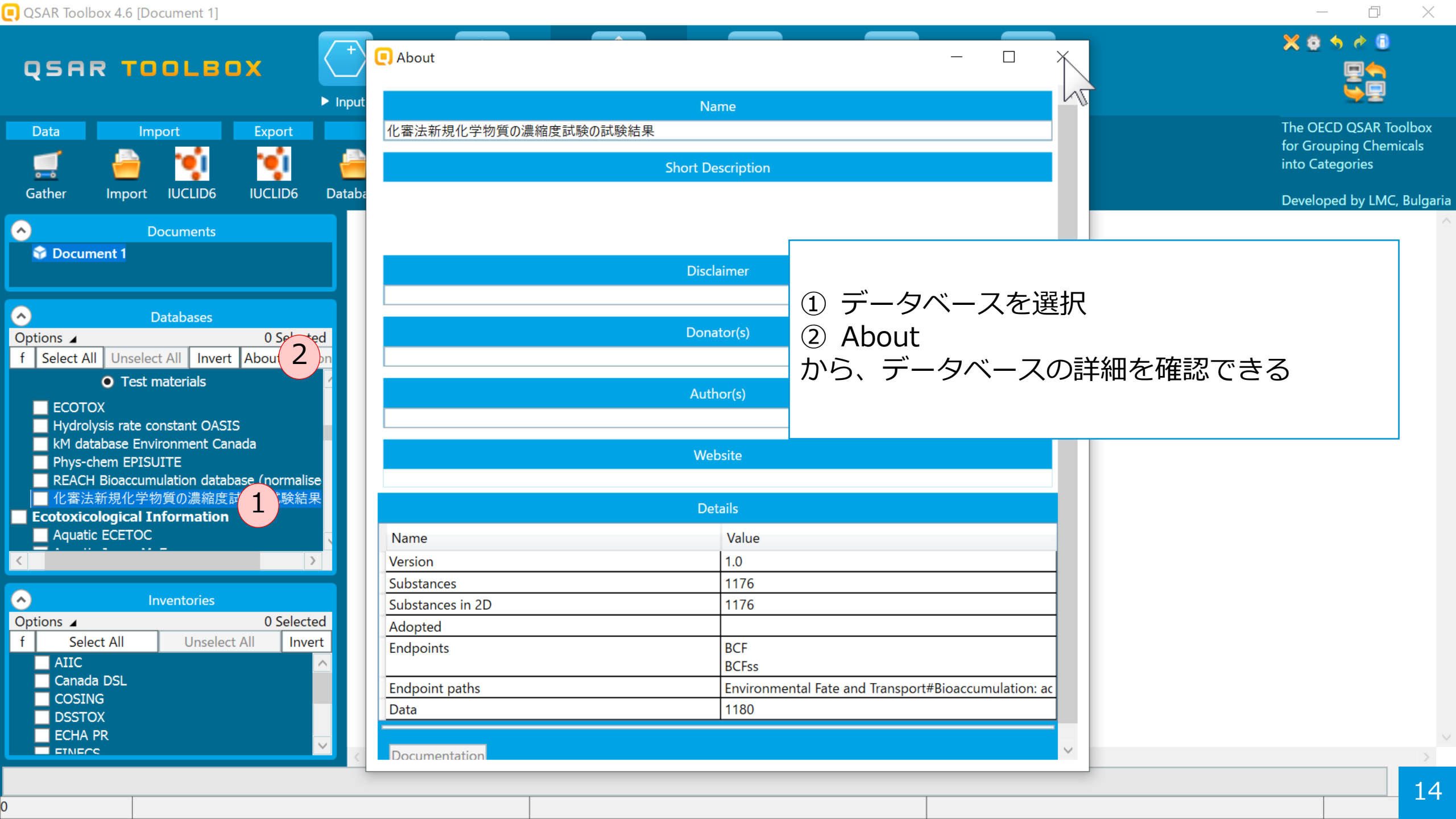
Import finished with 1180 data points across 1176 chemicals and 8 error rows

Copy | OK

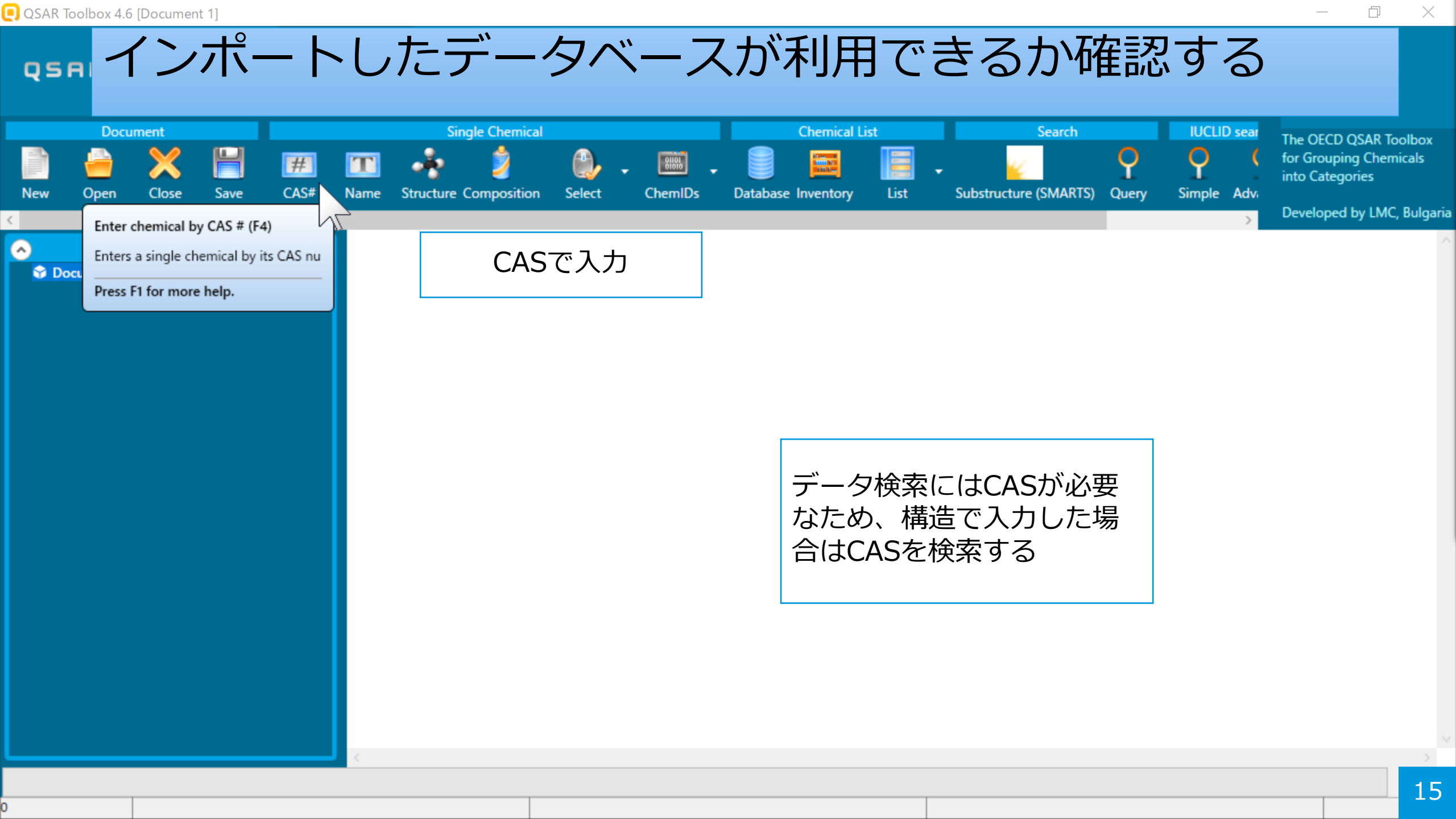
Back | Next | Import


QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Profiling
Data
Category definition
Data Gap Filling
Report
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
Importing to 化審法新規化学物質の濃縮度試験の試験結果
Import mode
Vertical
Horizontal
I have a header row
Preview of file
EndpointPath
Endpoint
Data MeanValue
Data MeanQualifier
Data Unit
試験に用いた物質名称（※2
Undefined
L/kg
BCF
39
<=
2600
Error
Do you want to continue anyway?
Copy
Yes
No
インポート出来ないデータがあるとエラーが表示されるエラーの詳細を確認したい場合は(∨)
Back
Next
Import
Gather
Import
Document 1
Options
Select All
Physical Chemical P
Bioconcentration a
Chemical Reactivity
ECHA REACH
AIIC
Canada DSL
COSING
DSSTOX
ECHA PR


QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Profiling
Data
Category definition
Data Gap Filling
Report
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
Importing to 化審法新規化学物質の濃縮度試験の試験結果
Import mode
Vertical
Horizontal
I have a header row
Preview of file
EndpointPath
Endpoint
Data MeanValue
Data MeanQualifier
Data Unit
試験に用いた物質名称（※2
Undefined
Error
Do you want to continue anyway?
On line : 26 and column 4 occured Unrealistic valent state for atom: [N+] with bond order: 5Error: Invalid Bond Order mapping
On line : 28 and column 4 occured input: − Unrecognized symbol at index 0 mapping value − / field SMILES
On line : 73 and column 4 occured input: 2 Expected Close parenthesis but found O at position 2 mapping value [SO3NH4]C1=
On line : 77 and column 4 occured input: − Unrecognized symbol at index 0 mapping value − / field SMILES
On line : 81 and column 4 occured Unrealistic valent state for atom: O with bond order: 3Error: Invalid Bond Order mapping val
On line : 94 and column 4 occured Unrealistic valent state for atom: [N+] with bond order: 5Error: Invalid Bond Order mapping
On line : 110 and column 4 occured input: − Unrecognized symbol at index 0 mapping value − / field SMILES
On line : 1166 and column 4 occured Unrealistic valent state for atom: [Al] with bond order: 5Error: Invalid Bond Order mapping
Copy
Yes
No
Back
Next
Import
Document 1
Gather
Import
今回はQSAR Toolboxにインポートできない構造を持つ物質があった（Nに結合が5本ある等）
インポートしたい場合は元のエクセルの構造情報を修正して再度インポートする


QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Data
Import
Export
Gather
Import
IUCLID6
IUCLID6
Databa
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
Documents
Document 1
Databases
Options
0 Selected
Select All
Unselect All
Invert
About
2
Test materials
ECOTOX
Hydrolysis rate constant OASIS
kM database Environment Canada
Phys-chem EPISUITE
REACH Bioaccumulation database (normalise
化審法新規化学物質の濃縮度試験結果
1
Ecotoxicological Information
Aquatic ECETOC
Inventories
Options
0 Selected
Select All
Unselect All
Invert
AIIC
Canada DSL
COSING
DSSTOX
ECHA PR
About
Name
化審法新規化学物質の濃縮度試験の試験結果
Short Description
Disclaimer
Donator(s)
Author(s)
Website
Details
Name
Value
Version
1.0
Substances
1176
Substances in 2D
1176
Adopted
Endpoints
BCF
BCFss
Endpoint paths
Environmental Fate and Transport#Bioaccumulation: ac
Data
1180
Documentation
① データベースを選択
② About
から、データベースの詳細を確認できる
14

インポートしたデータベースが利用できるか確認する



QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]

QSAR TOOLBOX

Input

Document

New Open Close Save CAS# Name

Documents

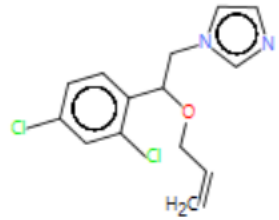
Document 1

Search by CAS #

35554-44-0 Search OK Cancel

Select All Unselect All Invert Selection Selected 1 of 1

1		
	CAS	35554-44-0
	SMILES	Clc1ccc(C(Cn2ccnc2)OCC=C)c(…
	CS Relation	High
	Substance	Mono constituent
	Identity	Sources:19
	Name	(±)-1-(β-allyloxy-2,4-dichloro-phenyl
	Sources	DSSTOX ECHA PR



インポートしたエクセルに記載されている物質を入力（今回は35554-44-0）

IUCLID sear

Query Simple Adv

The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories

Developed by LMC, Bulgaria

QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]

QSAR TOOLBOX

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

Data | Import | Export | Delete

Ga 2 | Import | IUCLID6 | IUCLID6 | Database | Inventory

The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories

Developed by LMC, Bulgaria

Documents

Document 1

[C: 1;Md: 0;P: 0] CAS: 35554440

Databases

Options | 1 Selected

f | Select All | Unselect All | Invert | About | Option

Phys-chem EPISUITE

REACH Bioaccumulation database (normalised)

1 法新規化学物質の濃縮度試験の試験結果

icological Information

化審法新規化学物質の濃縮度試験の試験結果

Options

f | Select All

AIIC

Canada DSL

COSING

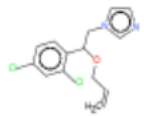
DSSTOX

ECHA PR

Filter endpoint tree...

1 [target]

Structure



Structure info

Parameters

Physical Chemical Properties

Environmental Fate and Transport

Ecotoxicological Information

Human Health Hazards

① インポートしたデータベースにチェックを入れる

② Gather

QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]

QSAR TOOLBOX

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

Data | Import | Export | Delete

Gather | Import | IUCLID6 | IUCLID6 | Database | Inventory

The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories

Developed by LMC, Bulgaria

Documents

Document 1

[C: 1;Md: 1;P: 0] CAS: 35554440

Databases

Options 1 Selected

f | Select All | Unselect All | Invert | About | Option

Phys-chem EPISUITE

REACH Bioaccumulation database (normalised)

化審法新規化学物質の濃縮度試験の試験結果

Ecotoxicological Information

Inventories

Options 0 Selected

f | Select All | Unselect All | Invert

AIIC

Canada DSL

COSING

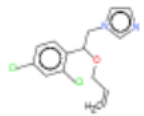
DSSTOX

ECHA PR

Filter endpoint tree...

1 [target]

Structure



Structure info

Parameters

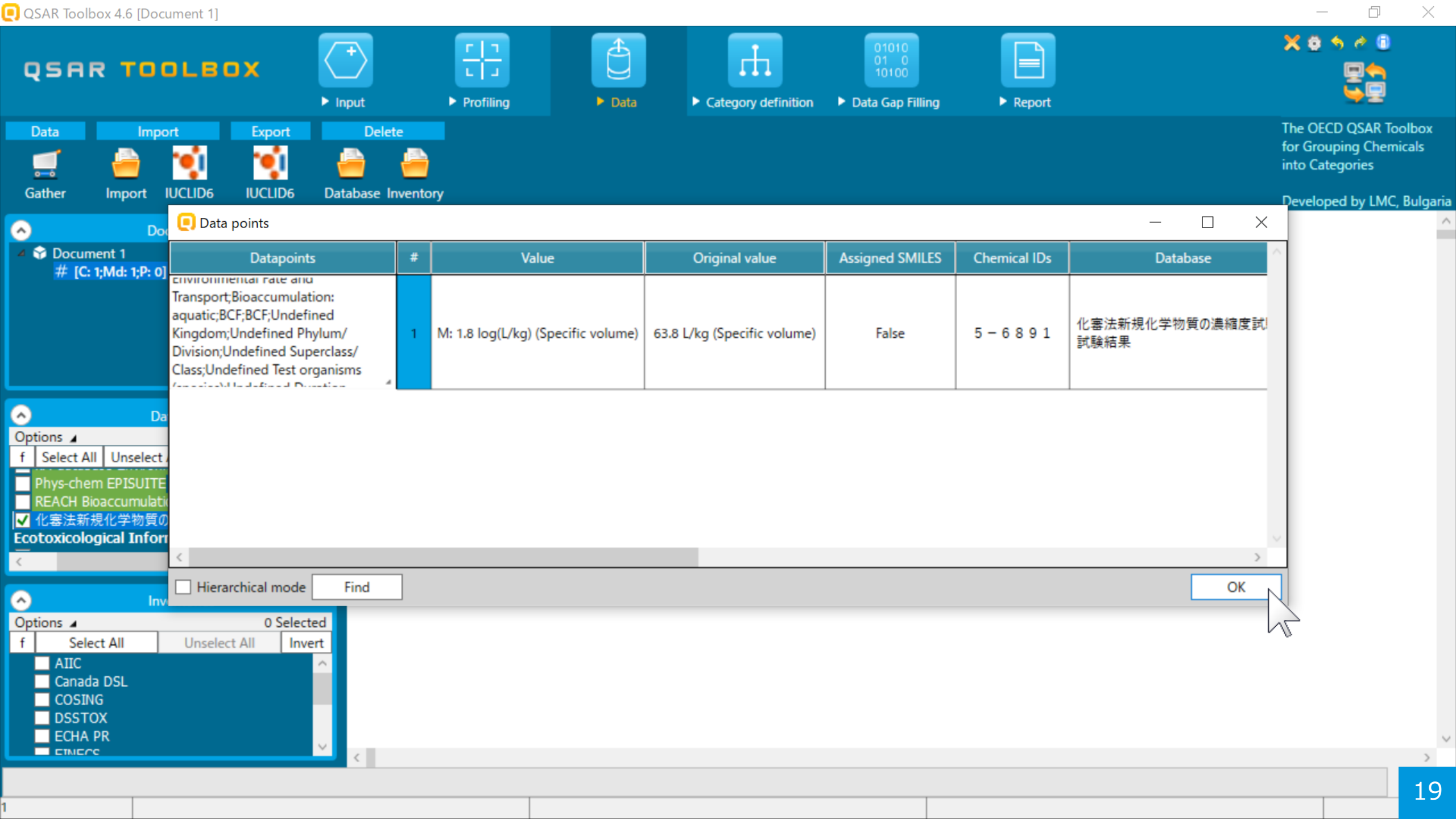
Physical Chemical Properties

Environmental Fate and Transport 1/1 M: 1.8 log(L/kg)

Ecotoxicological Information

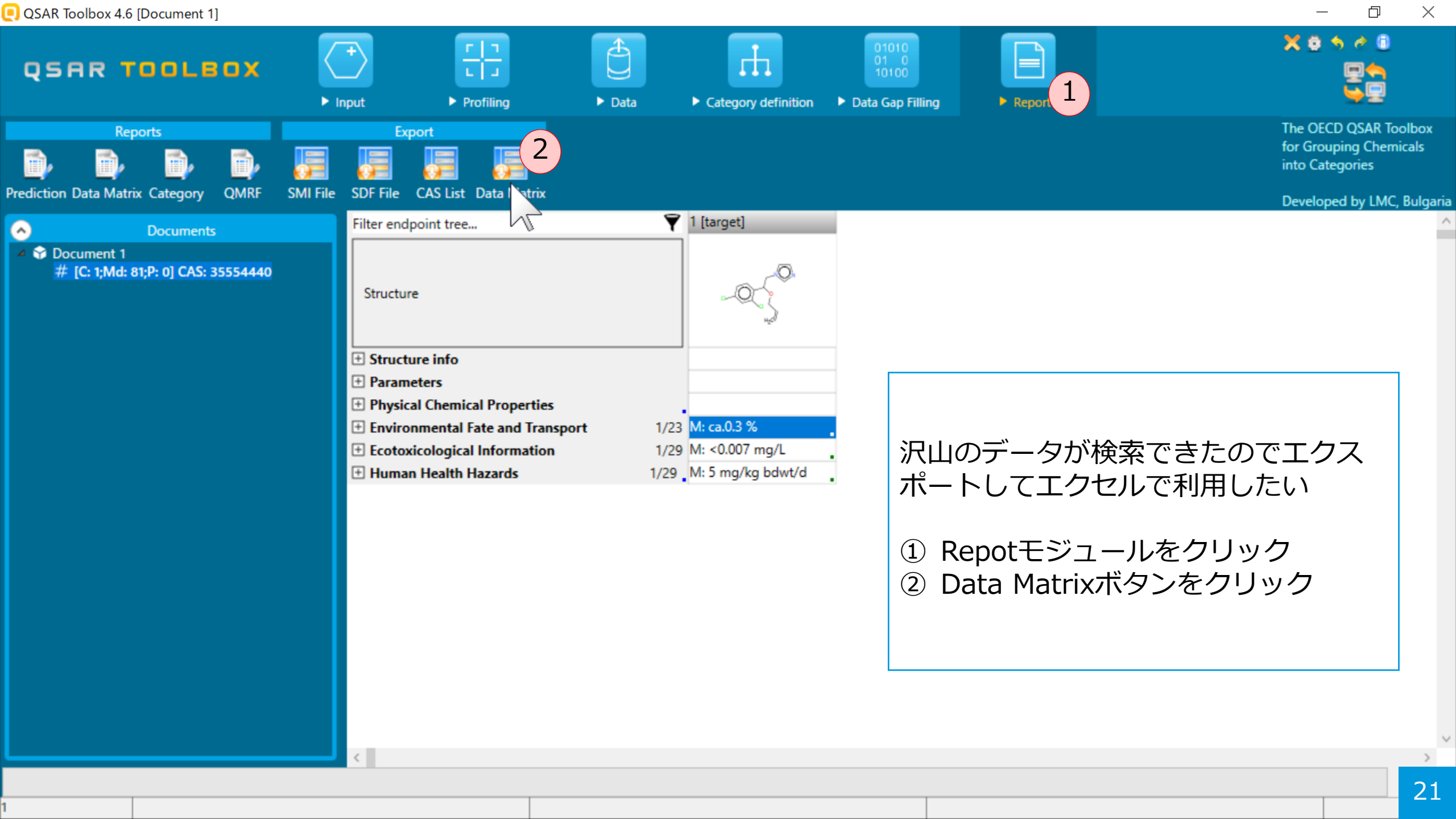
Human Health Hazards

ダブルクリックして
詳細を確認


QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Profiling
Data
Category definition
Data Gap Filling
Report
Data
Import
Export
Delete
Gather
Import
IUCLID6
IUCLID6
Database
Inventory
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
Data points
Datapoints
#
Value
Original value
Assigned SMILES
Chemical IDs
Database
Transport;Bioaccumulation: aquatic;BCF;BCF;Undefined Kingdom;Undefined Phylum/ Division;Undefined Superclass/ Class;Undefined Test organisms
1
M: 1.8 log(L/kg) (Specific volume)
63.8 L/kg (Specific volume)
False
5 − 6 8 9 1
化審法新規化学物質の濃縮度試
試験結果
Document 1
[C: 1;Md: 1;P: 0]
Options
Select All
Unselect
Phys-chem EPISUITE
REACH Bioaccumulati
化審法新規化学物質の
Ecotoxicological Inform
Options
0 Selected
Select All
Unselect All
Invert
AIIC
Canada DSL
COSING
DSSTOX
ECHA PR
Hierarchical mode
Find
OK
19

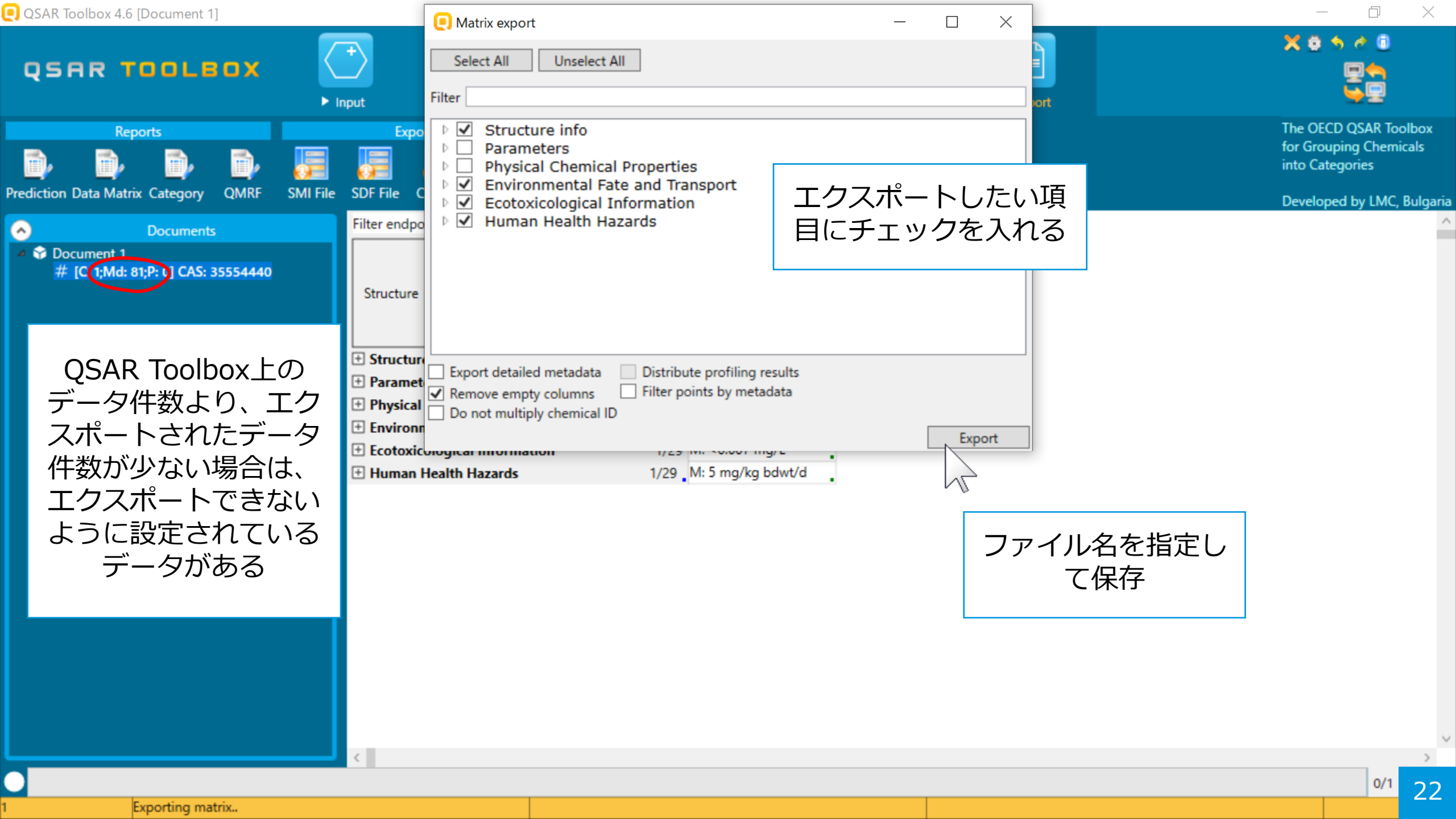
検索したデータをエクセルで扱うにはどうすればよいですか？

- データマトリックスのデータをエクスポートすることができます
- 一部のデータベースのデータはエクスポートできないように設定されています



沢山のデータが検索できたのでエクスポートしてエクセルで利用したい

① Repotモジュールをクリック
② Data Matrixボタンをクリック

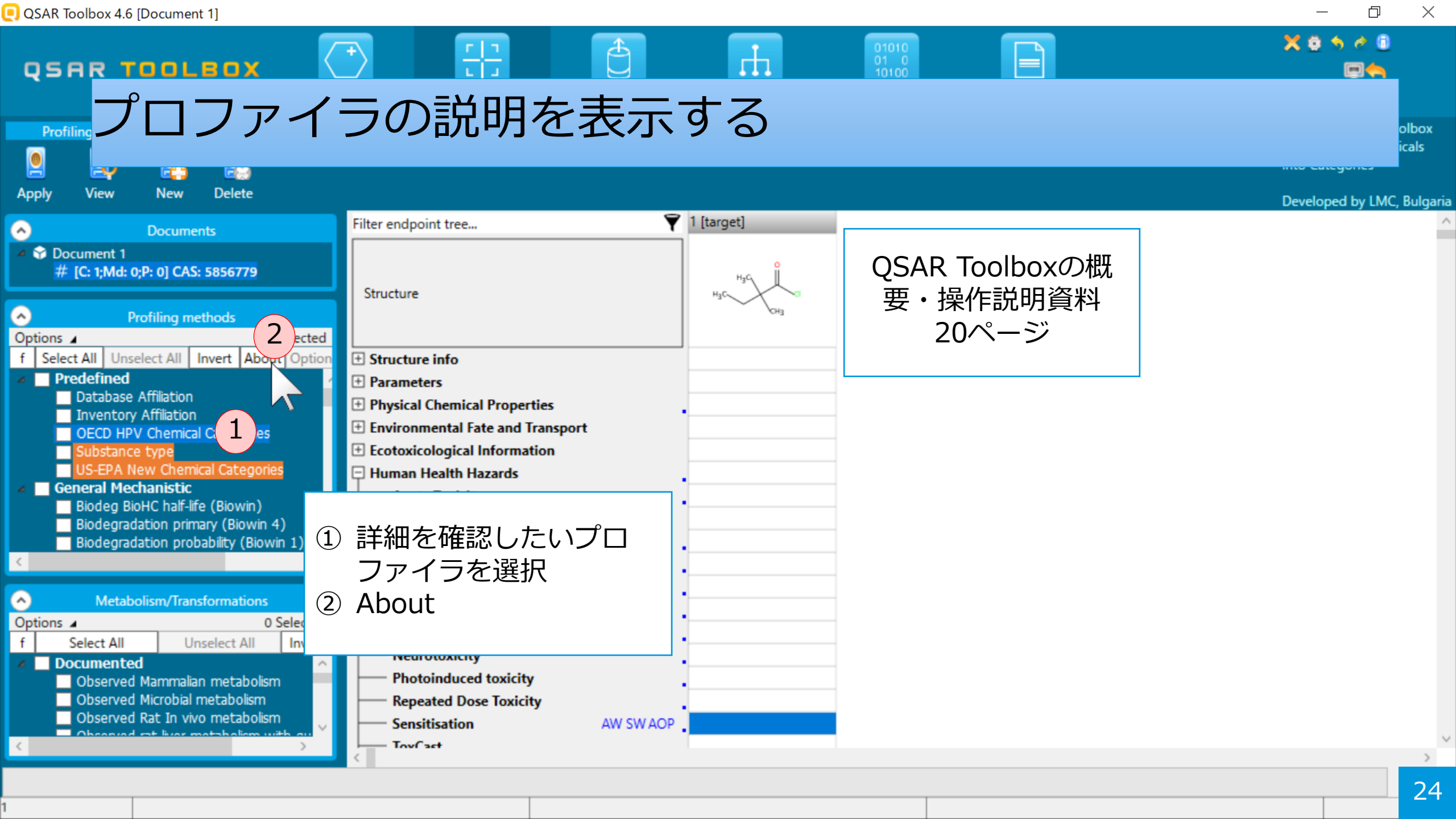

QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Reports
Prediction
Data Matrix
Category
QMRF
SMI File
SDF File
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
Documents
Document 1
Matrix export
Select All
Unselect All
Filter
Structure info
Parameters
Physical Chemical Properties
Environmental Fate and Transport
Ecotoxicological Information
Human Health Hazards
Export detailed metadata
Remove empty columns
Do not multiply chemical ID
Distribute profiling results
Filter points by metadata
Export
Structure
Human Health Hazards
1/29
M: 5 mg/kg bdwt/d
エクスポートしたい項目にチェックを入れる
QSAR Toolbox上のデータ件数より、エクスポートされたデータ件数が少ない場合は、エクスポートできないように設定されているデータがある
ファイル名を指定して保存
0/1
Exporting matrix..
22

どのプロファイラを選択すればよいですか？

- エンドポイントを指定することで、そのエンドポイントのために開発されたプロファイラや、関係性のあるプロファイラ目印を付けることができます
- 目印の付けられたプロファイラの詳細を確認して、目的に合ったプロファイラを選択します

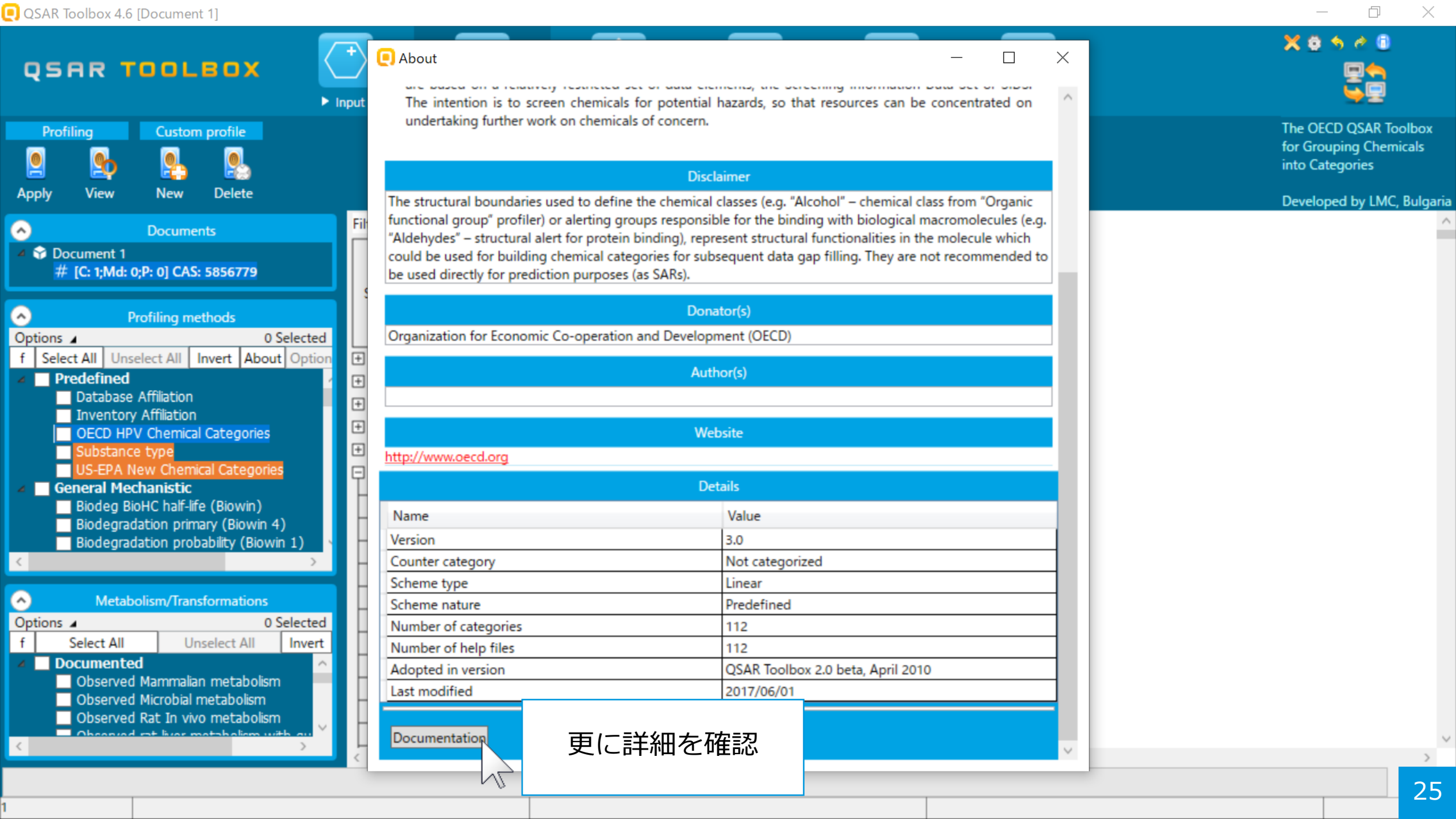
- 使用したいアラートの構造等の情報があり、既存のプロファイラに含まれていない場合は、新規プロファイラを作成することができます

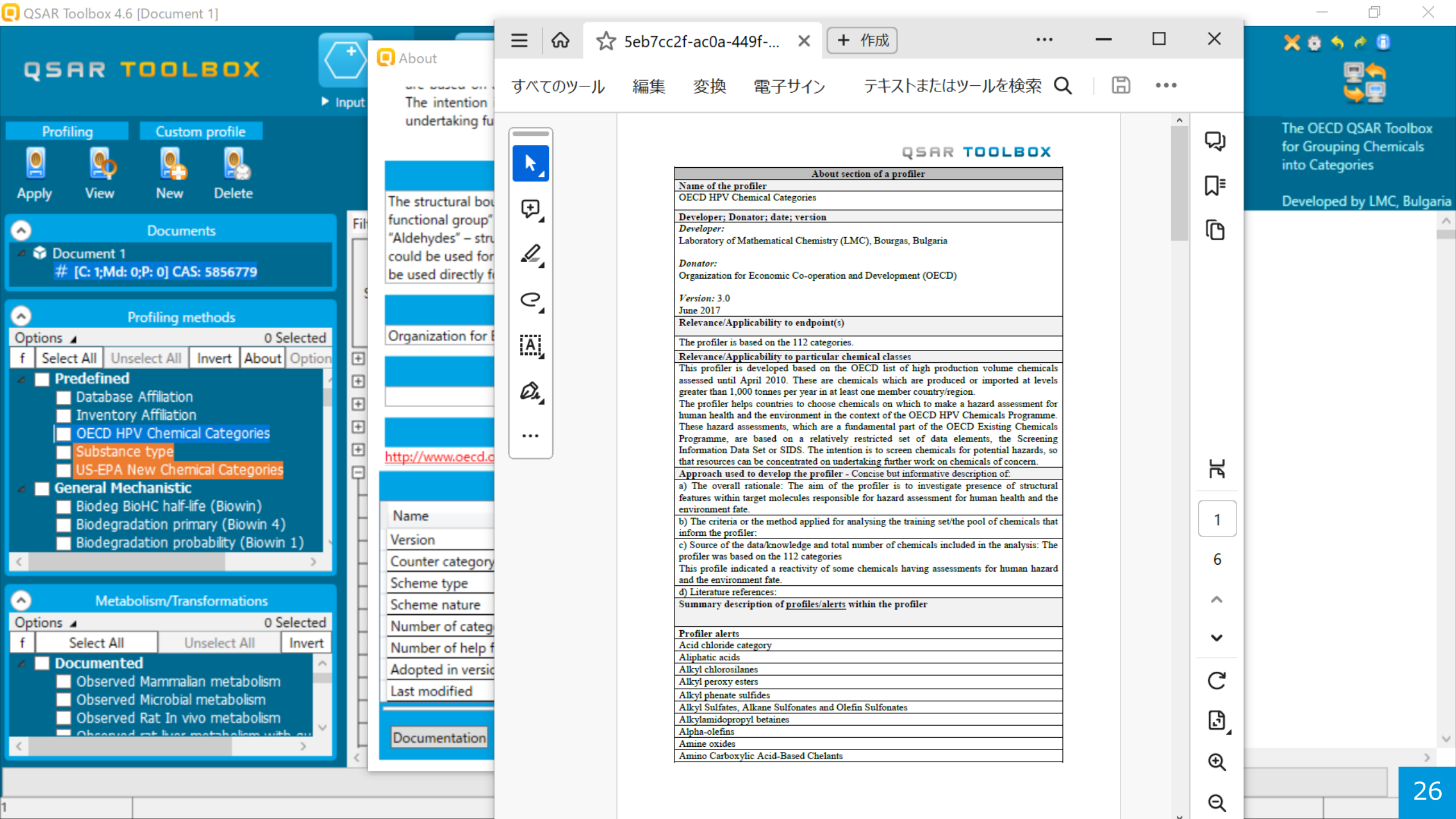
プロファイラの説明を表示する



① 詳細を確認したいプロファイラを選択
② About

QSAR Toolboxの概要・操作説明資料
20ページ

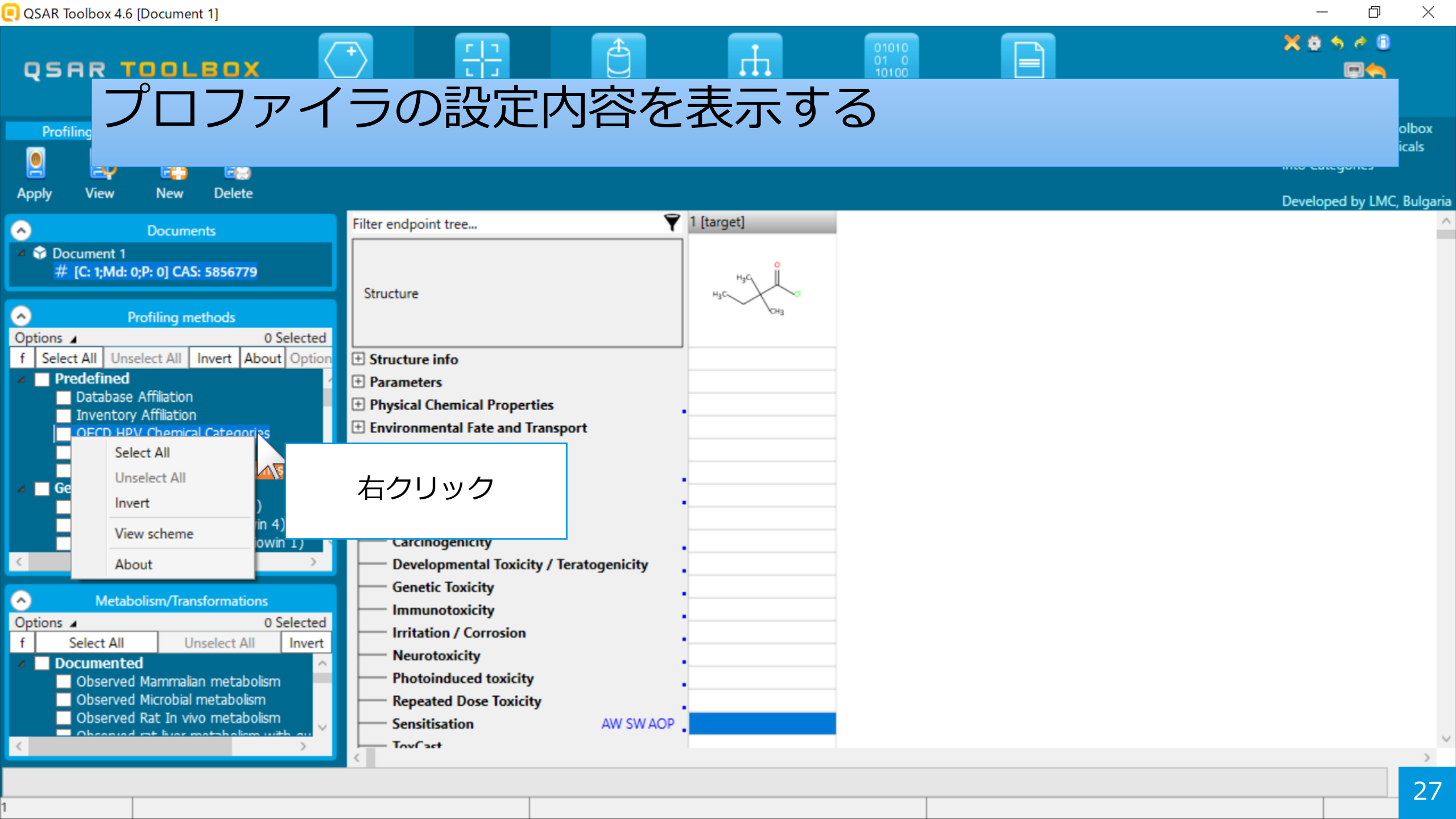

QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Profiling
Custom profile
Apply
View
New
Delete
Documents
Document 1
[C: 1;Md: 0;P: 0] CAS: 5856779
Profiling methods
Options
0 Selected
Select All
Unselect All
Invert
About
Predefined
Database Affiliation
Inventory Affiliation
OECD HPV Chemical Categories
Substance type
US-EPA New Chemical Categories
General Mechanistic
Biodeg BioHC half-life (Biowin)
Biodegradation primary (Biowin 4)
Biodegradation probability (Biowin 1)
Metabolism/Transformations
Documented
Observed Mammalian metabolism
Observed Microbial metabolism
Observed Rat In vivo metabolism
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
About
The intention is to screen chemicals for potential hazards, so that resources can be concentrated on undertaking further work on chemicals of concern.
Disclaimer
The structural boundaries used to define the chemical classes (e.g. "Alcohol" – chemical class from "Organic functional group" profiler) or alerting groups responsible for the binding with biological macromolecules (e.g. "Aldehydes" – structural alert for protein binding), represent structural functionalities in the molecule which could be used for building chemical categories for subsequent data gap filling. They are not recommended to be used directly for prediction purposes (as SARs).
Donator(s)
Organization for Economic Co-operation and Development (OECD)
Author(s)
Website
http://www.oecd.org
Details
Name
Value
Version
3.0
Counter category
Not categorized
Scheme type
Linear
Scheme nature
Predefined
Number of categories
112
Number of help files
112
Adopted in version
QSAR Toolbox 2.0 beta, April 2010
Last modified
2017/06/01
Documentation
更に詳細を確認
25

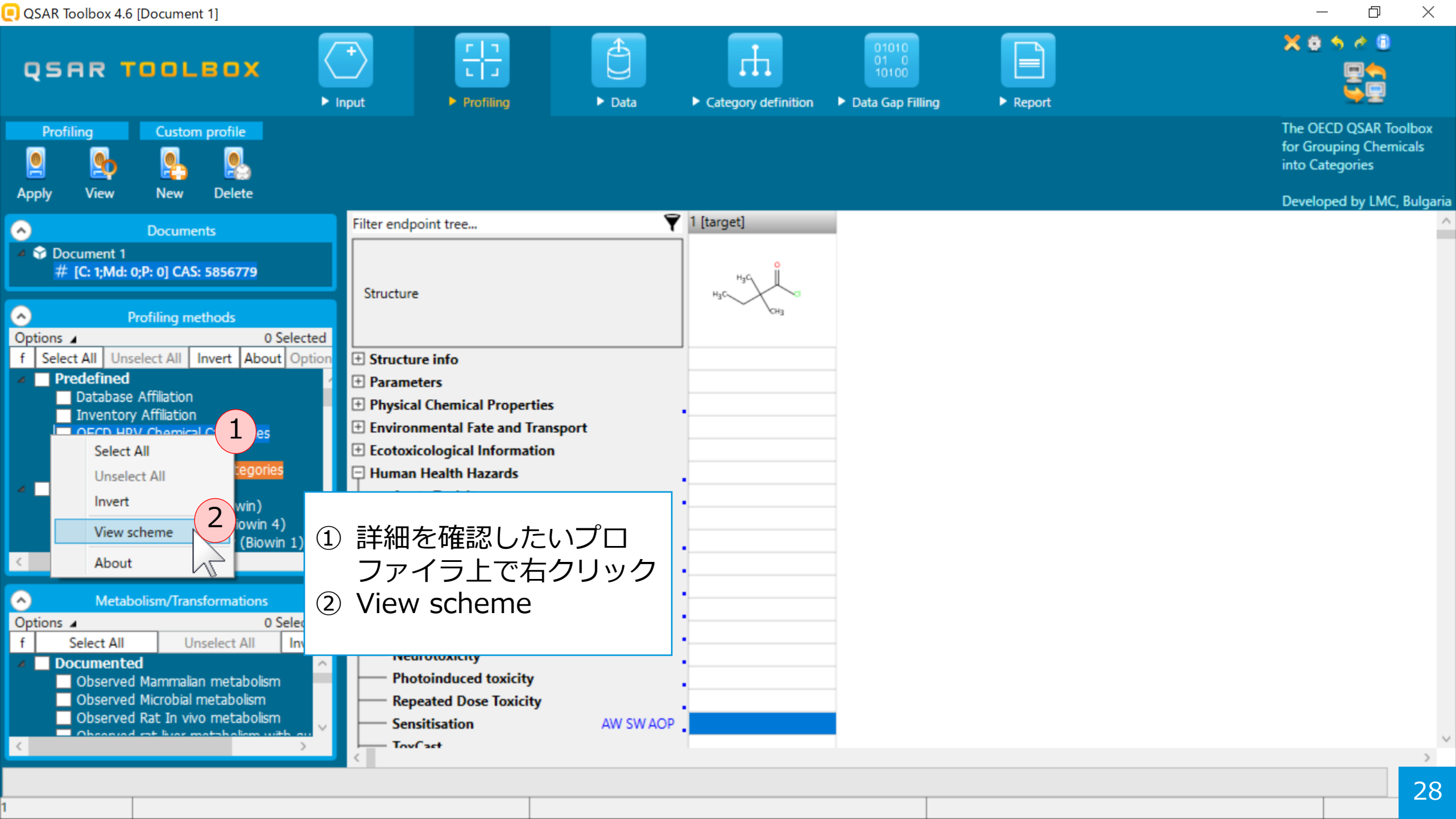


QSAR TOOLBOX

About section of a profiler
Name of the profiler
OECD HPV Chemical Categories
Developer; Donator; date; version
Developer:
Laboratory of Mathematical Chemistry (LMC), Bourgas, Bulgaria
Donator:
Organization for Economic Co-operation and Development (OECD)
Version: 3.0
June 2017
Relevance/Applicability to endpoint(s)
The profiler is based on the 112 categories.
Relevance/Applicability to particular chemical classes
This profiler is developed based on the OECD list of high production volume chemicals assessed until April 2010. These are chemicals which are produced or imported at levels greater than 1,000 tonnes per year in at least one member country/region. The profiler helps countries to choose chemicals on which to make a hazard assessment for human health and the environment in the context of the OECD HPV Chemicals Programme. These hazard assessments, which are a fundamental part of the OECD Existing Chemicals Programme, are based on a relatively restricted set of data elements, the Screening Information Data Set or SIDS. The intention is to screen chemicals for potential hazards, so that resources can be concentrated on undertaking further work on chemicals of concern.
Approach used to develop the profiler - Concise but informative description of:
a) The overall rationale: The aim of the profiler is to investigate presence of structural features within target molecules responsible for hazard assessment for human health and the environment fate.
b) The criteria or the method applied for analysing the training set/the pool of chemicals that inform the profiler:
c) Source of the data/knowledge and total number of chemicals included in the analysis: The profiler was based on the 112 categories This profile indicated a reactivity of some chemicals having assessments for human hazard and the environment fate.
d) Literature references:
Summary description of profiles/alerts within the profiler
Profiler alerts
Acid chloride category
Aliphatic acids
Alkyl chlorosilanes
Alkyl peroxy esters
Alkyl phenate sulfides
Alkyl Sulfates, Alkane Sulfonates and Olefin Sulfonates
Alkylamidopropyl betaines
Alpha-olefins
Amine oxides
Amino Carboxylic Acid-Based Chelants

プロファイラの設定内容を表示する




QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
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: 1;Md: 0;P: 0] CAS: 5856779
Profiling methods
Options
0 Selected
Select All
Unselect All
Invert
About
Predefined
Database Affiliation
Inventory Affiliation
1
Select All
Unselect All
Invert
2
View scheme
About
① 詳細を確認したいプロファイラ上で右クリック
② View scheme
Metabolism/Transformations
Documented
Observed Mammalian metabolism
Observed Microbial metabolism
Observed Rat In vivo metabolism
Filter endpoint tree...
1 [target]
Structure
Structure info
Parameters
Physical Chemical Properties
Environmental Fate and Transport
Ecotoxicological Information
Human Health Hazards
Photoinduced toxicity
Repeated Dose Toxicity
Sensitisation
AW SW AOP
28

OECD HPV Chemical Categories (Predefined) - Profiling Scheme Browser

Save Scheme | Export Scheme | Save Tests | View Tests | Run All

どのような構造アラートが登録されているか確認できる

Categories

Filter:

- OECD HPV Chemical Categories
  - Acid chloride category
  - Aliphatic acids
  - Alkyl chlorosilanes
  - Alkyl peroxy esters
  - Alkyl phenate sulfides
  - Alkyl Sulfates, Alkane Sulfonates and Olefin Sul
  - Alkylamidopropyl betaines
  - Alpha-olefins
  - Amine oxides
  - Amino Carboxylic Acid-Based Chelants
  - Ammonia
  - Amorphous silica silicates
  - Aryl substituted peroxy esters
  - Benzene, C10-C16 alkyl derivatives
  - Benzoates
  - Butanedioic acid
  - Butenes
  - Butyl Series Metabolic
  - C.I. Fluorescent Brightener 28 113
  - C1 -13 Primary amines
  - C10-C13 Aromatics hydrocarbon solvents cate
  - C14+Aliphatics hydrocarbon solvents (less thar
  - C2-C4 Aliphatic thiols
  - C5 Aliphatic hydrocarbon solvents
  - C6 Aliphatics hydrocarbon solvents
  - C7-9 Aliphatics hydrocarbon solvents
  - C8-C12 Aliphatic thiols
  - C9 Aromatics hydrocarbon solvents
  - C9-14 Aliphatics hydrocarbon solvents (less tha
  - Cadmium (oxide)
  - Carbonate/Hydrogencarbonate
  - Chloroalkyl chlorosilanes
  - Chloroformates
  - Chromates
  - Copper and copper compounds

Definition | Proper | Custom Captions | Scheme

Category tree

[89] Acid chloride

1

ADD | DEL | AND | OR

Query details

[1] Structure Query | Metabolism

Contents

Queries

Add Query | Add Mask | Remove

Complex search options

- [x] Exact connectivity
- [ ] Ignore stereo information
- [ ] Exact match

Queries execution mode: All

Mapping

- [x] Unique mappings

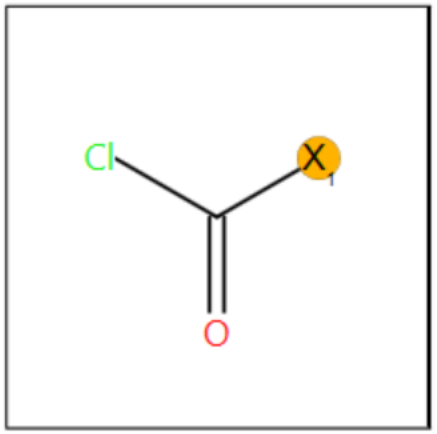
Max maps: 1000

SMARTS

C(=O)(Cl)$[[CX4]]{.,xs}

Edit

View mode: Facade | Navigation mode: Cascade



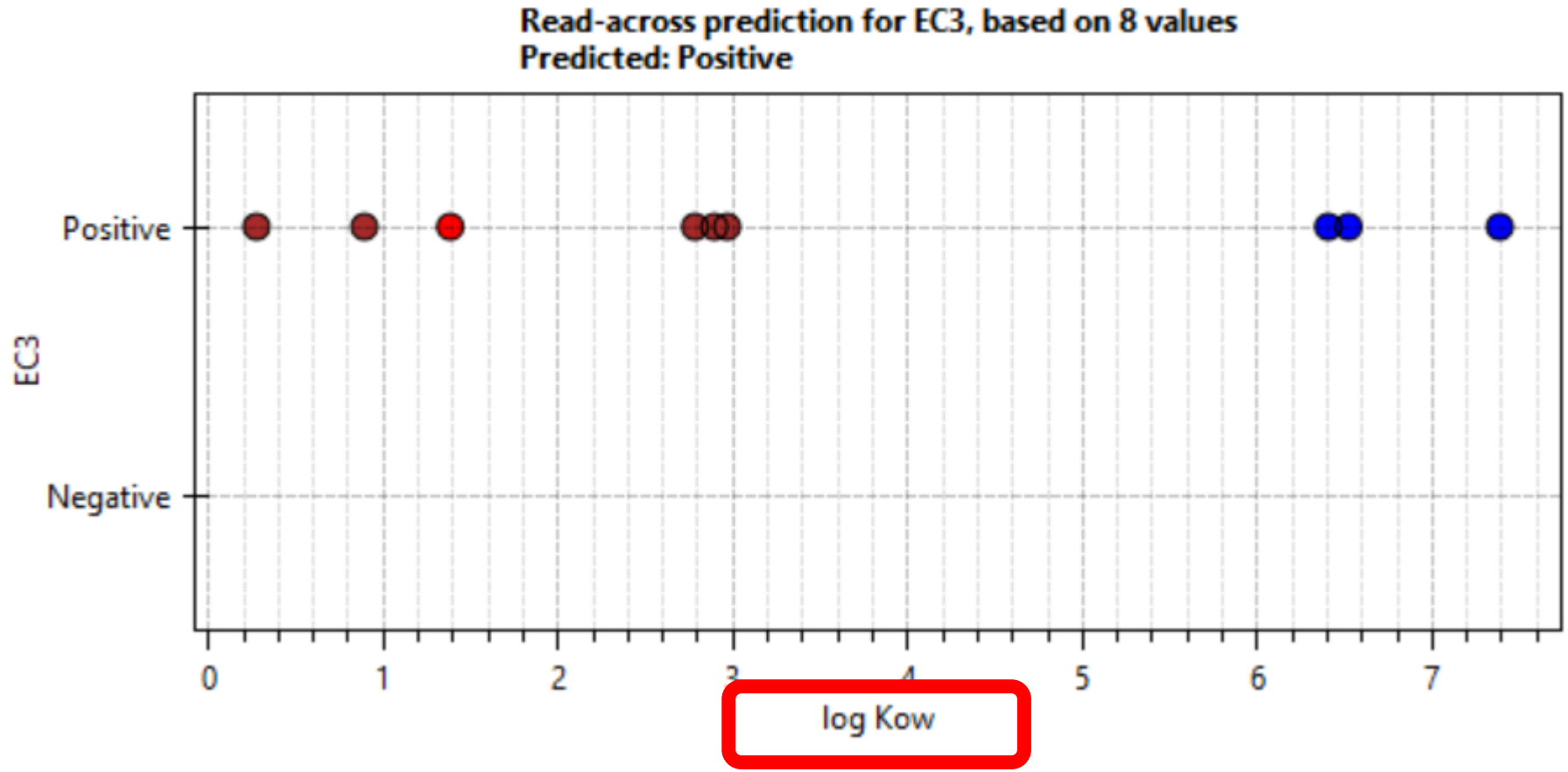
Left click on any marked atom to explore

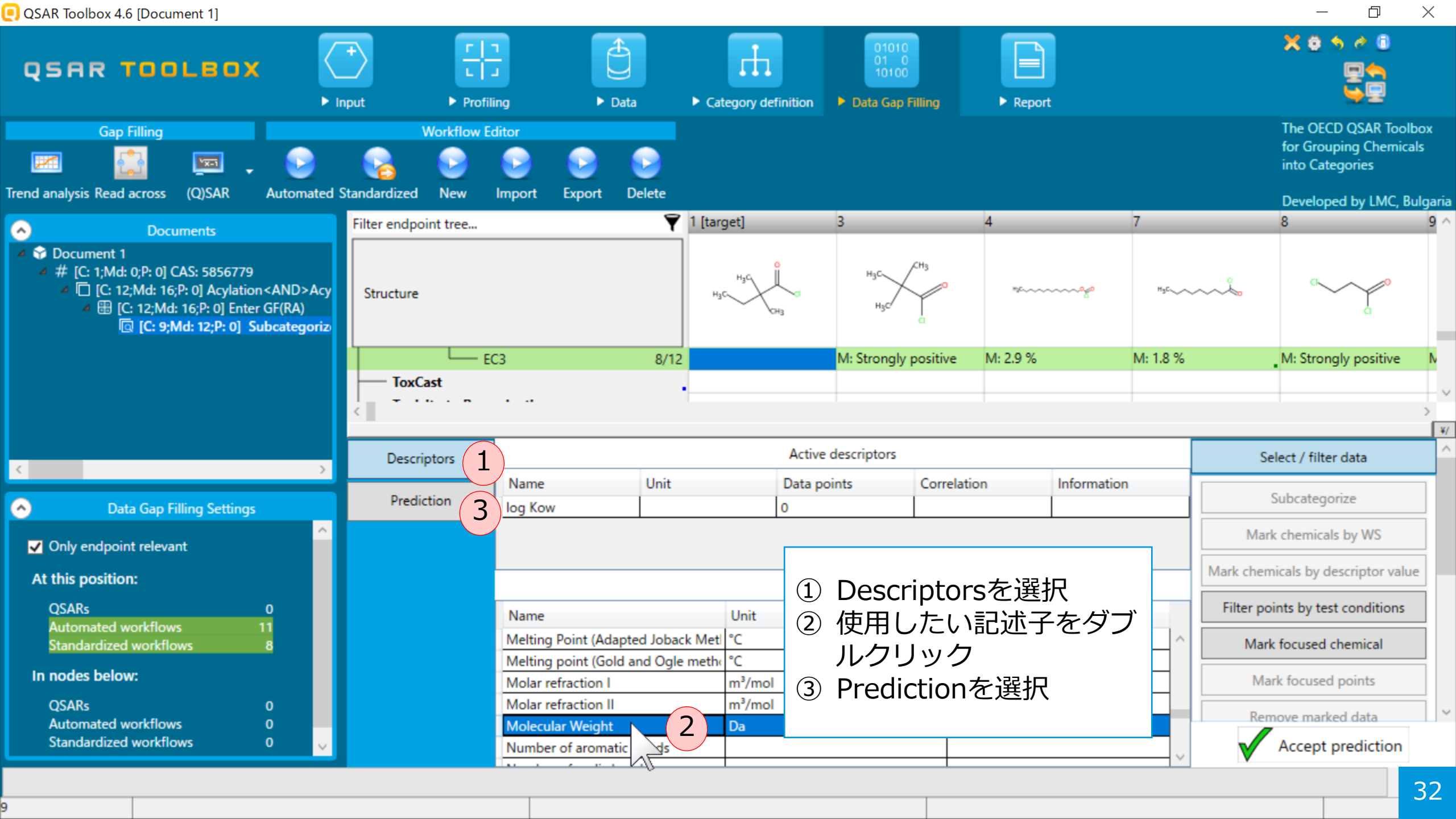
新規プロファイラを作成する

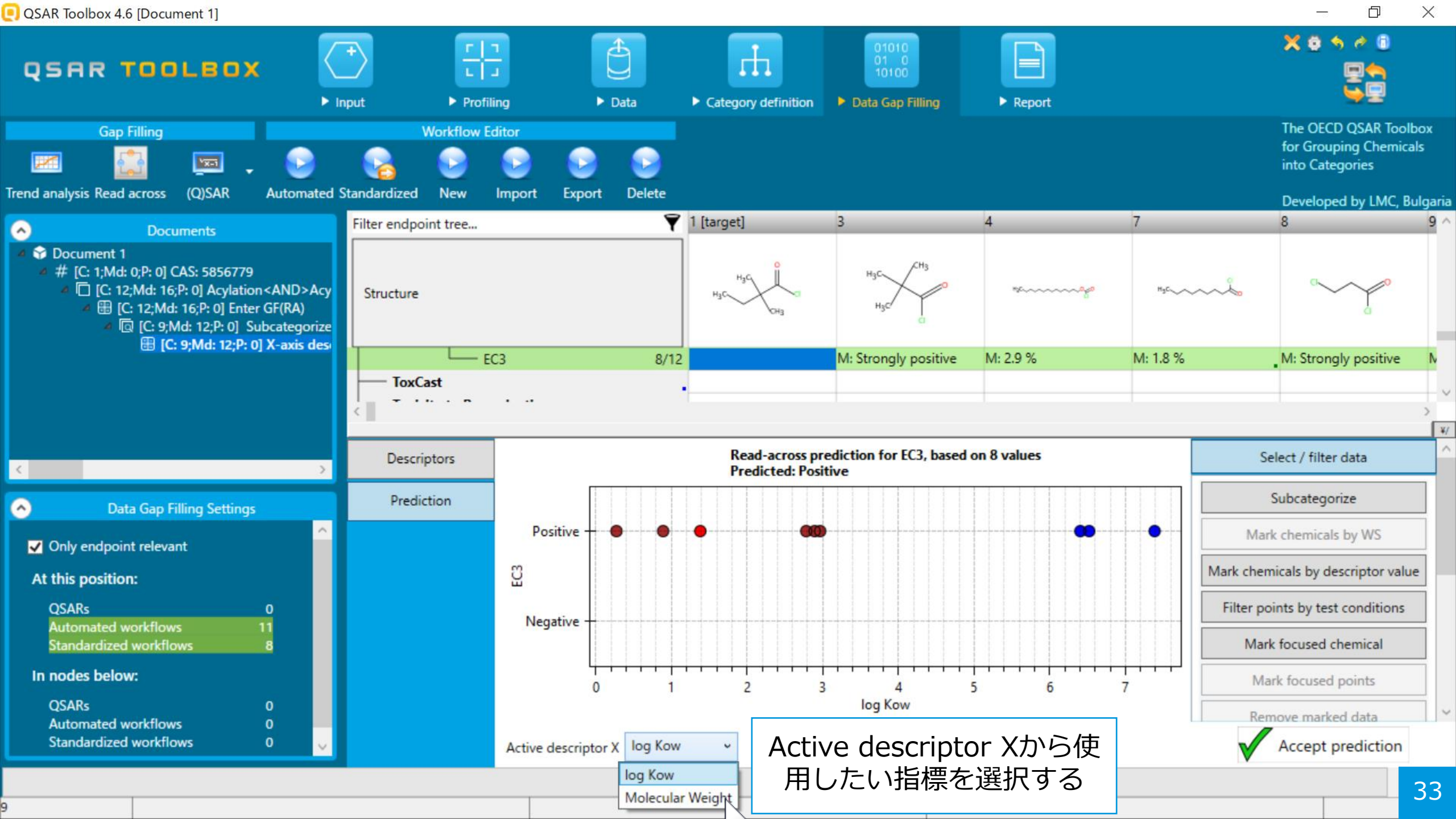
- QSAR Toolbox公式サイトのサポートページからマニュアル（英語）がダウンロードできる
  https://qsartoolbox.org/support/
  - Building a custom profiler
    https://qsartoolbox.org/access-pdf-attachment/?pid=2169
  - SMARTS structures search
    https://qsartoolbox.org/access-pdf-attachment/?pid=2170

グラフの軸を変えられませんか？

- データギャップ補完でのグラフの横軸に使用する記述子は変更できます




QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Profiling
Data
Category definition
Data Gap Filling
Report
Gap Filling
Workflow Editor
Trend analysis
Read across
(Q)SAR
Automated
Standardized
New
Import
Export
Delete
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
Documents
Document 1
[C: 1;Md: 0;P: 0] CAS: 5856779
[C: 12;Md: 16;P: 0] Acylation<AND>Acy
[C: 12;Md: 16;P: 0] Enter GF(RA)
[C: 9;Md: 12;P: 0] Subcategoriz
Filter endpoint tree...
Structure
1 [target]
3
4
7
8
9
EC3
8/12
M: Strongly positive
M: 2.9 %
M: 1.8 %
M: Strongly positive
ToxCast
Descriptors
1
Prediction
3
Active descriptors
Name
Unit
Data points
Correlation
Information
log Kow
0
Select / filter data
Subcategorize
Mark chemicals by WS
Mark chemicals by descriptor value
Filter points by test conditions
Mark focused chemical
Mark focused points
Remove marked data
Data Gap Filling Settings
Only endpoint relevant
At this position:
QSARs 0
Automated workflows 11
Standardized workflows 8
In nodes below:
QSARs 0
Automated workflows 0
Standardized workflows 0
Name
Unit
Melting Point (Adapted Joback Met
°C
Melting point (Gold and Ogle meth
°C
Molar refraction I
m³/mol
Molar refraction II
m³/mol
Molecular Weight
Da
Number of aromatic
2
① Descriptorsを選択
② 使用したい記述子をダブルクリック
③ Predictionを選択
Accept prediction
32


QSAR Toolbox 4.6 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Profiling
Data
Category definition
Data Gap Filling
Report
Gap Filling
Workflow Editor
Trend analysis
Read across
(Q)SAR
Automated
Standardized
New
Import
Export
Delete
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
Documents
Document 1
[C: 1;Md: 0;P: 0] CAS: 5856779
[C: 12;Md: 16;P: 0] Acylation<AND>Acy
[C: 12;Md: 16;P: 0] Enter GF(RA)
[C: 9;Md: 12;P: 0] Subcategorize
[C: 9;Md: 12;P: 0] X-axis des
Filter endpoint tree...
Structure
1 [target]
3
4
7
8
9
EC3
8/12
M: Strongly positive
M: 2.9 %
M: 1.8 %
M: Strongly positive
ToxCast
Descriptors
Prediction
Read-across prediction for EC3, based on 8 values
Predicted: Positive
Positive
Negative
EC3
0
1
2
3
4
5
6
7
log Kow
Select / filter data
Subcategorize
Mark chemicals by WS
Mark chemicals by descriptor value
Filter points by test conditions
Mark focused chemical
Mark focused points
Remove marked data
Data Gap Filling Settings
Only endpoint relevant
At this position:
QSARs 0
Automated workflows 11
Standardized workflows 8
In nodes below:
QSARs 0
Automated workflows 0
Standardized workflows 0
Active descriptor X
log Kow
log Kow
Molecular Weight
Accept prediction
Active descriptor Xから使用したい指標を選択する
33

お問合せ先

- QSAR Toolboxの動作環境、インストールできない、正常に動作しない
  - QSAR Toolbox Helpdesk
    https://qsartoolbox.org/
- QSAR Toolboxの使い方
  - NITEのQSAR関係お問合せメール
    hess@nite.go.jp
- 少量新規評価フローでの評価方法、評価結果について
  - NITE化審法連絡システム
    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)
- 少量新規評価フロー以外の評価方法、評価結果について
  - コンサルタント等