

一特/監視類似物質検出ツール ユーザマニュアル

2024年3月29日

(独)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

はじめに

本ユーザマニュアルでは、少量新規化学物質における分解性及び蓄積性評価フローにて用いられる「一特/監視類似物質検出ツール」の使用方法を解説いたします。

「一特/監視類似物質検出ツール」はQSAR Toolboxの“Profiling”機能を用いており、使用するためにはOECDが無料で公開しているQSAR Toolboxが必要です。

QSAR Toolboxのインストール方法につきましては、下記のウェブサイトでご案内しています：

https://www.nite.go.jp/chem/kanren/kokusai_qsar.html#

インストール時の技術的な問題や機能に関する質問は、下記のQSAR toolboxヘルプデスクにお問い合わせください。

<https://qsartoolbox.org/support/#help>

目次

1. 一特/監視類似物質検出ツールの設定(初回のみ)
2. QSAR Toolboxの起動
3. ツールを適用させるSMILESのインポート
4. 一特/監視類似物質検出ツールの適用
5. 一特/監視類似物質検出ツール適用結果の概要

1. 一特/監視類似物質検出ツールの設定(初回のみ)

1.1 一特/監視類似物質検出ツールのダウンロード

一特/監視類似物質検出ツールは、NITEが一特/監視類似物質検出のためにカスタムしたQSAR Toolbox用の「プロファイラ」と呼ばれるファイルです。

一特/監視類似物質検出ツールを使用するためには、初回のみ、QSAR Toolboxに一特/監視類似物質検出ツールプロファイラを登録する必要があります。

1. 一特/監視類似物質検出ツールの設定(初回のみ)

1.1 一特/監視類似物質検出ツールのダウンロード

「一特/監視類似物質検出ツール」のZipファイルを以下のサイトからダウンロードしてください。

https://www.nite.go.jp/chem/qsar/syouryou_QSAR.html#section3

第一種特定化学物質・監視化学物質との構造類似物質の検出ツール

『少量新規化学物質における分解性・蓄積性の評価フロー』で使用している『第一種特定化学物質・監視化学物質との構造類似性物質を検出するOECD QSAR Toolbox用のツール（一特/監視類似物質検出ツール）』を公開しています。

なお、ツールの使用にあっては、下記免責事項をご一読ください。

更新日：2021年12月3日

▶ 一特/監視類似物質検出ツール【ZIP: 84KB】

▶ 一特/監視類似物質検出ツールの使用マニュアル【PDF: 1MB】

▶ Literatureファイル【ZIP: 1MB】

1. 一特/監視類似物質検出ツールの設定(初回のみ)

1.2 プロファイラ保存フォルダを開く

QSAR Toolboxは起動させずに、以下のプロファイラ保存フォルダを開きます。お持ちのQSAR Toolboxのバージョンによって保存フォルダが異なります。

バージョン4.2

C:\Program Files (x86)\Common Files\QSAR Toolbox 4.2\Config\Profilers

バージョン4.3

C:\Program Files (x86)\Common Files\QSAR Toolbox 4.3\Config\Addins\LMC.Toolbox.Server.Profiling

バージョン4.4

C:\Program Files (x86)\Common Files\QSAR Toolbox 4.4\Config\Addins\LMC.Toolbox.Server.Profiling

バージョン4.5

C:\Program Files (x86)\Common Files\QSAR Toolbox 4.5\Config\Addins\LMC.Toolbox.Server.Profiling

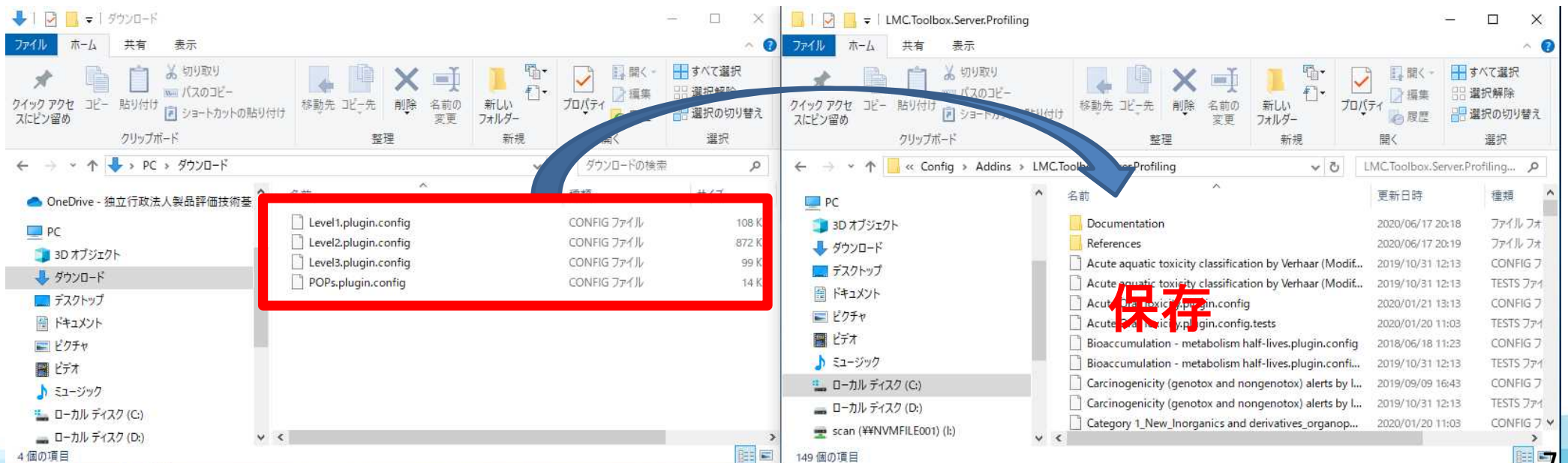
バージョン4.6(最新)

C:\Program Files\Common Files\QSAR Toolbox 4.6\Config\Addins\LMC.Toolbox.Server.Profiling

1. 一特/監視類似物質検出ツールの設定(初回のみ)

1.3 プロファイラの保存

1.1の手順でダウンロードしたZIPファイルを解凍し、入っている4ファイルをプロファイラ保存フォルダに保存します(旧バージョンのファイルが保存されている場合、旧バージョンのファイルは削除するか、上書きしてください)。以上でプロファイラの登録は完了です。



1. 一特/監視類似物質検出ツールの設定(初回のみ)

1.4 一特/監視類似物質検出ツール(Level3)のLiteratureファイル登録方法

一特/監視類似物質検出ツール(Level3)について、登録されている一特/監視化学物質の構造定義等を確認する事が可能となりました。

当該情報は、Literatureファイルを特定のフォルダに保存することで確認できるようになります。

1. 一特/監視類似物質検出ツールの設定(初回のみ)

1.4 一特/監視類似物質検出ツール(Level3)のLiteratureファイル登録方法

Literatureファイルを以下のサイトからダウンロードしてください。
(Literatureファイル名「Level3.zip」)

https://www.nite.go.jp/chem/qsar/syouryou_QSAR.html#section3

第一種特定化学物質・監視化学物質との構造類似物質の検出ツール

『少量新規化学物質における分解性・蓄積性の評価フロー』で使用している『第一種特定化学物質・監視化学物質との構造類似性物質を検出するOECD QSAR Toolbox用のツール(一特/監視類似物質検出ツール)』を公開しています。

なお、ツールの使用にあっては、下記免責事項をご一読ください。

更新日：2021年12月3日

▶ 一特/監視類似物質検出ツール【ZIP: 84KB】

▶ 一特/監視類似物質検出ツールの使用マニュアル【PDF: 1MB】

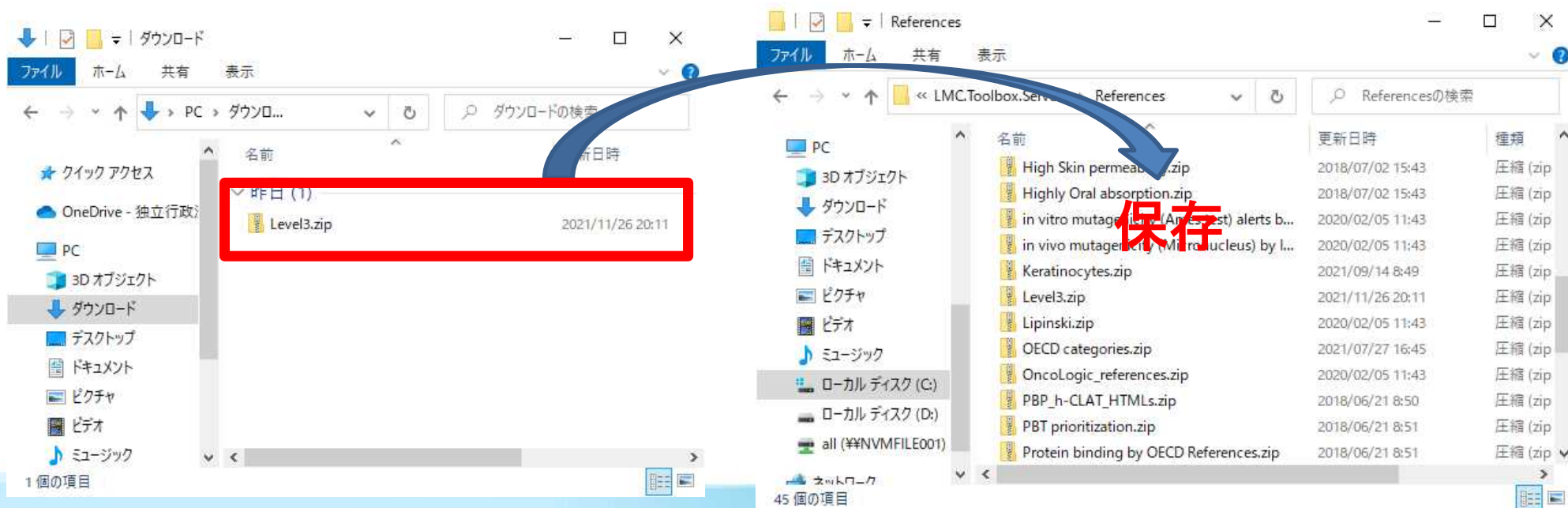
▶ Literatureファイル【ZIP: 1MB】

1. 一特/監視類似物質検出ツールの設定(初回のみ)

1.4 一特/監視類似物質検出ツール(Level3)のLiteratureファイル登録方法

ダウンロードした「Level3.zip」ファイルを解凍せずに、そのまま以下のフォルダに保存してください(QSARtoolbox4.6の場合)。

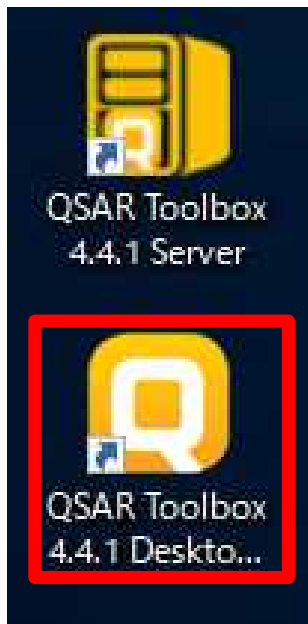
C:\Program Files\Common Files\QSAR Toolbox 4.6\Config\Addins\LMC.Toolbox.Server.Profiling\References



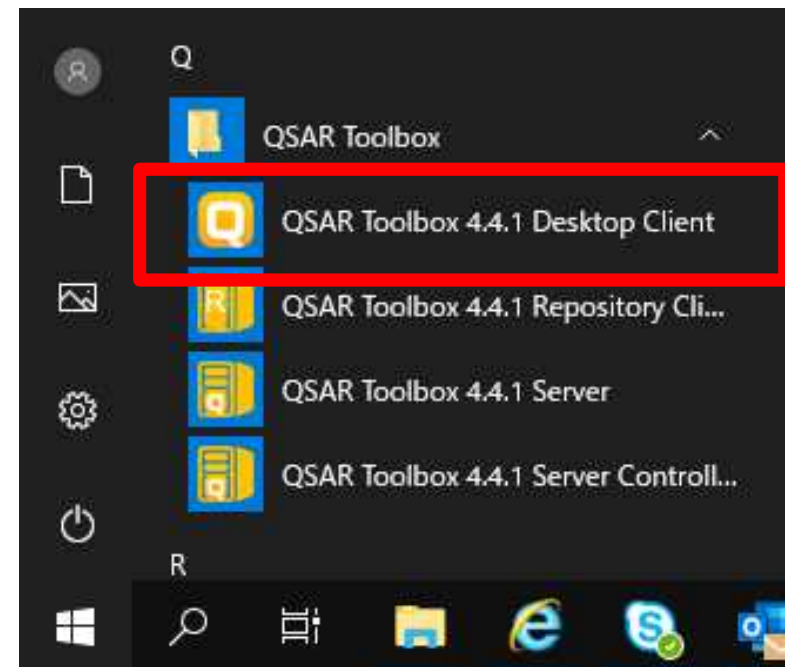
2. QSAR Toolboxの起動

2.1 QSAR Toolboxの起動

QSAR Toolboxのデスクトップアイコンまたは画面左下のスタートボタンからQSAR Toolbox Desktopのアイコンを選択してください。



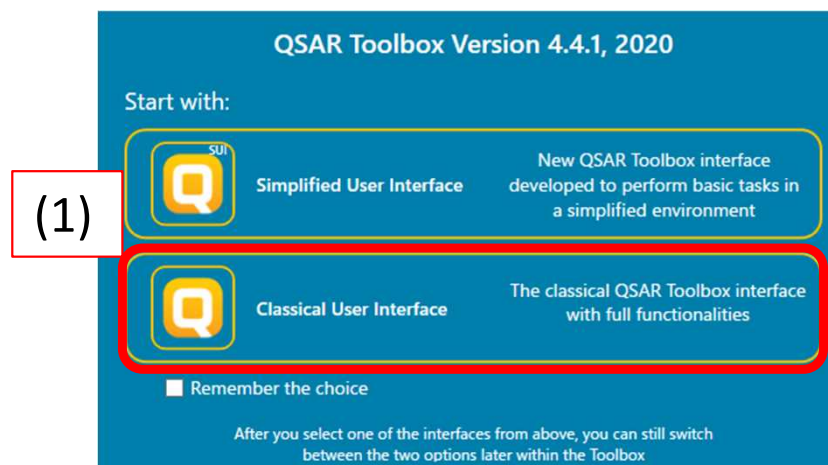
または



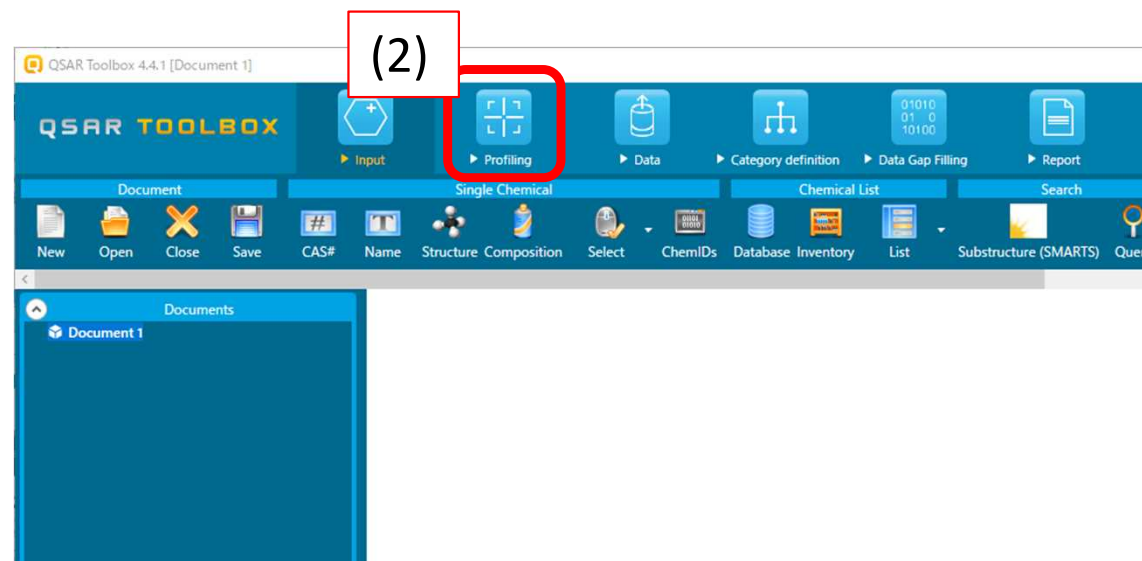
2. QSAR Toolboxの起動

2.2 プロファイラの確認

(1) Interface選択画面が表示されますので、「Classical User Interface」をクリックしてください。
(バージョン4.4より前のQSAR Toolboxでは表示されません)



(2) 右の画面が表示されたら、上段の「>Profiling」アイコンをクリックしてください。



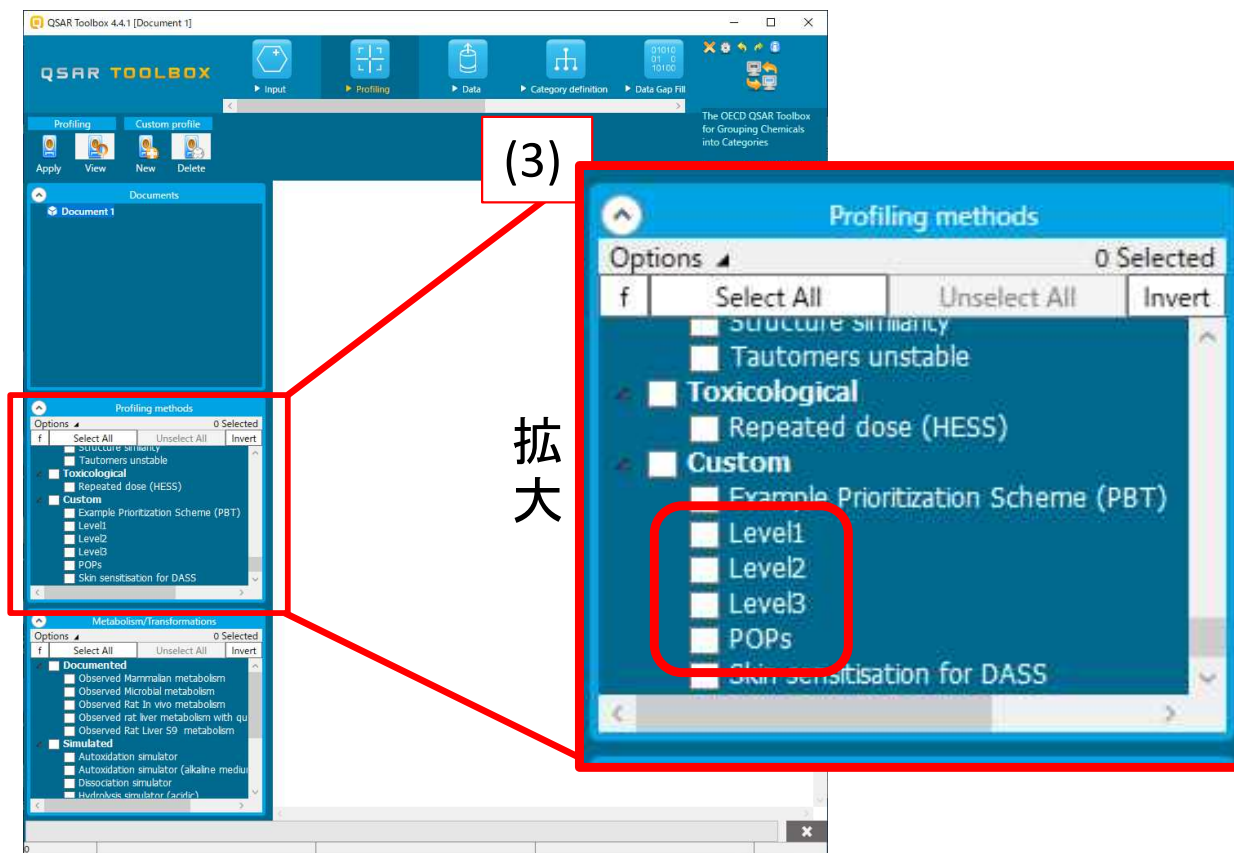
2. QSAR Toolboxの起動

2.2 プロファイラの確認(続き)

(3)「Profiling methods」ウィンドウの「Custom」プロファイラー一覧に、以下のプロファイラが追加されていることを確認してください。

プロファイラ名

- Level1
- Level2
- Level3
- POPs

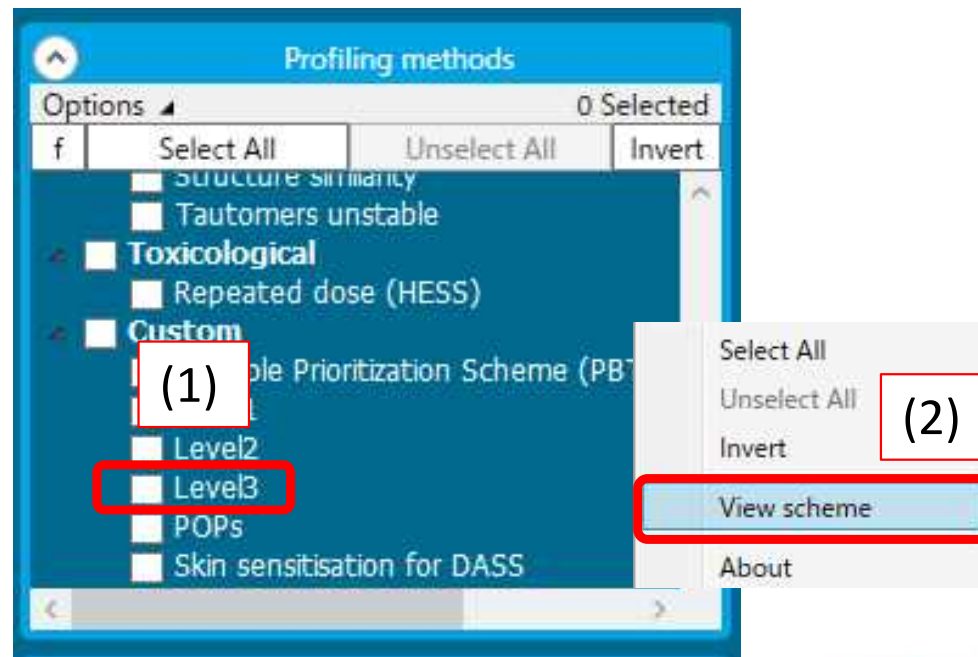


2. QSAR Toolboxの起動

2.3 Level3のLiteratureデータ確認方法

(1) 「Profiling methods」ウィンドウのLevel3を右クリックしてください。

(2) View schemeをクリックしてください。



2. QSAR Toolboxの起動

2.3 Level3のLiteratureデータ確認方法

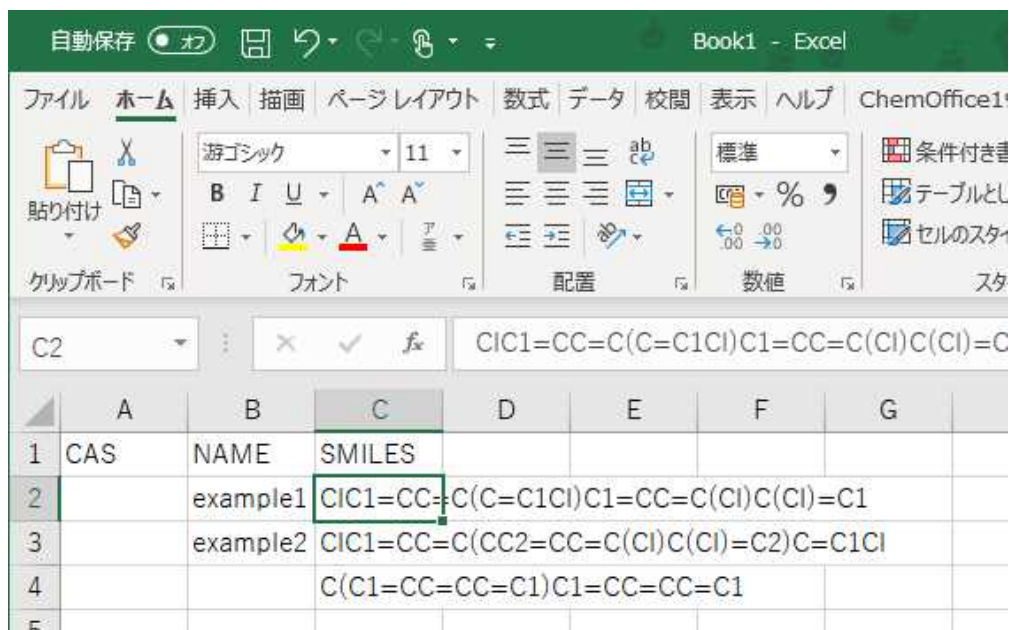
(3)出てきたウインドウのLiteratureをクリックすることで、Level3プロファイラに登録されている一特/監視化学物質の構造定義等を確認することができます。

The screenshot shows the 'Level3 (Custom) - Profiling Scheme Browser' window. The 'Literature' tab is selected and highlighted with a red box, with a circled '(3)' next to it. The main display area shows details for 'chemical substance name', including 'Class I Specified Chemical Substance No.1', 'Polychlorinated biphenyls', and '第一種特定化学物質 政令番号1 ポリ塩化ビフェニル'. A 'Structural alert' section is visible at the bottom.

3. ツールを適用させるSMILES のインポート

3.1 インポート用ファイルの作成

Microsoft Excel等を用いて、インポート用ファイルを作成します。



The screenshot shows a Microsoft Excel spreadsheet with the following data:

	A	B	C	D	E	F	G
1	CAS	NAME	SMILES				
2		example1	<chem>C1C1=CC=C(C=C1C1)C1=CC=C(C1)C(C1)=C1</chem>				
3		example2	<chem>C1C1=CC=C(CC2=CC=C(C1)C(C1)=C2)C=C1C1</chem>				
4			<chem>C(C1=CC=CC=C1)C1=CC=CC=C1</chem>				
5							

1番上の行のA列に「CAS」、B列に「NAME」、C列に「SMILES」を入力してください。

2番目以下の行にSMILES等を入力します。(SMILES以外は入力がなくともツールの適用は可能です)

入力が完了したら、「テキスト(タブ区切り)(*.txt)」で保存してください。(保存場所、ファイル名は任意です)

3. ツールを適用させるSMILES のインポート

3.1 インポート用ファイルの作成(続き)

○SMILESを描画する上での注意

インポート用ファイルに記載するSMILESは、「少量新規化学物質の構造式ファイル作成に係る事業者ガイダンス」に記載の、化審法少量新規申出で提出するMOLファイルと同じルールで構造式を描画してください。正常にツールの適用ができない場合があります。

・少量新規化学物質の構造式ファイル作成に係る事業者ガイダンス

<https://www.nite.go.jp/data/000100455.pdf>

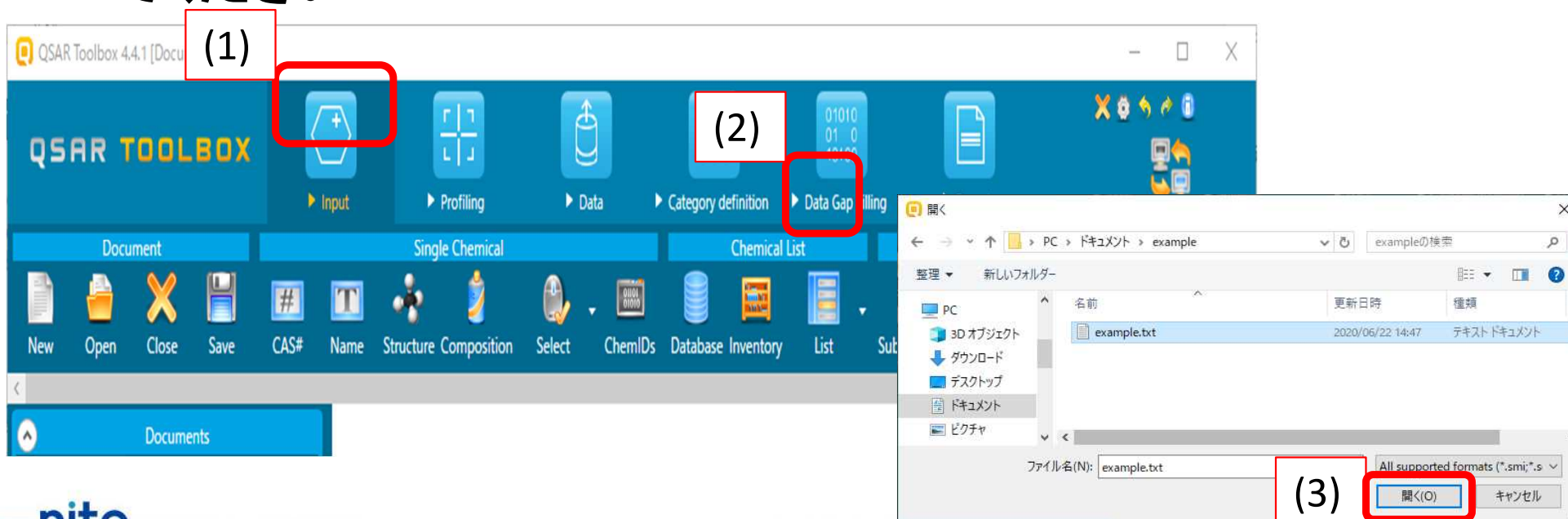
3. ツールを適用させるSMILES のインポート

3.2 ファイルのインポート

(1) QSAR Toolboxの「Input」タブをクリックしてください。

(2) 「List」をクリックしてください。

(3) 「3.1 インポート用ファイルの作成」で作成したファイルを開いてください

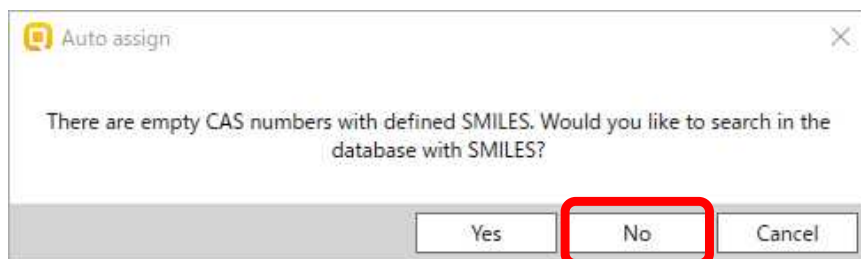


3. ツールを適用させるSMILES のインポート

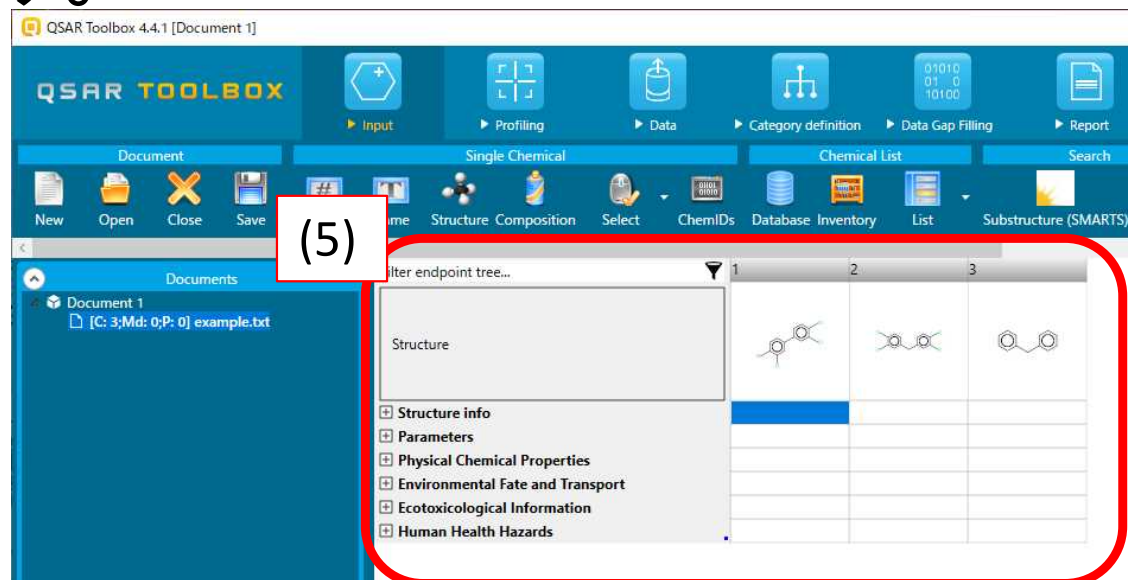
3.2 ファイルのインポート(続き)

(4)「Auto assign」というポップアップが表示されますが、「No」を選択してください。

(5) SMILESが読み込まれます。



(4)



(5)

4. 一特/監視類似物質検出ツールの適用

4.1 プロファイラの適用



(1) 「▶Profiling」アイコンをクリックしてください。

(2) 「Profiling methods」ウィンドウの「Custom」に登録したLevel1～POPsプロファイラのチェックボックスにチェックを入れてください。

(3) 「Apply」をクリックしてください。

4. 一特/監視類似物質検出ツールの適用

4.2 適用結果の確認

The screenshot displays the QSAR Toolbox 4.4.1 interface. The main window shows three chemical structures in the 'Structure' column. The 'Structure info' panel is expanded, and the 'Custom' profiling method is selected. The results table shows various properties for each structure, including molecular formula, SMILES, and profiling levels. The 'Structure info' panel is highlighted with a red box, and the 'Custom' profiling method is also highlighted with a red box.

1	2	3	
No CAS number	No CAS number	No CAS number	
Not applicable	Not applicable	Not applicable	
example1	example2		
Composition			
Molecular formula	C12H6Cl4	C13H8Cl4	C13H12
Predefined substance type	Mono constituent	Mono constituent	Mono constituent
SMILES	Clc1ccc(cc1Cl)-c...	Clc1ccc(Cc2ccc(C...C(c1cccc1)c1ccc...	
Parameters			
Physical Chemical Properties			
Environmental Fate and Transport			
Ecotoxicological Information			
Human Health Hazards			
Profiling			
Custom			
Level1	06	07A	(N/A)
Level2	Class_I_01_Polyc...	Class_I_01_Polyc...	(N/A)
Level3	Class_I_01_Polyc...	(N/A)	(N/A)
POPs	(N/A)	(N/A)	(N/A)

それぞれのプロファイラの適用結果が表示されます。

CAS番号や化合物名を入力した場合は、

「Structure info」の左の「+」アイコンをクリックすると表示されます。

4. 一特/監視類似物質検出ツールの適用

4.3 適用結果の確認(CSVファイルでエクスポートする場合)

The screenshot shows the OECD QSAR Toolbox interface. On the left, a tree view under 'Filter endpoint tree...' is expanded to 'Profiling' > 'Custom' > 'Level1'. A red box with the number '(1)' points to this 'Level1' node. The main area displays a table with three columns labeled '1', '2', and '3'. The first row shows chemical structures. Subsequent rows show classification codes: '06', '07A', and '(N/A)'. The table also includes rows for 'Class_I_01_Polyc...' and 'POPs'.

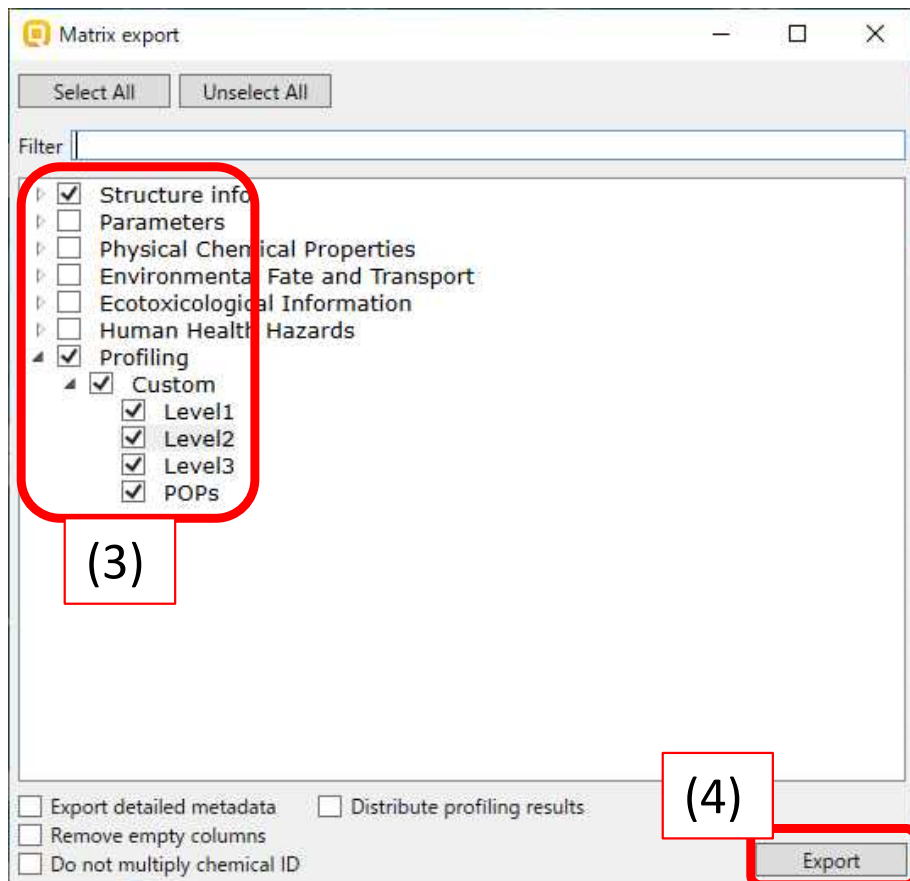
(1) プロファイラ名が記載されている薄いグレーのエリアを右クリックしてください。

(2) 「Export Data Matrix」をクリックしてください。

The screenshot shows a context menu with 'Export Data matrix' highlighted by a red box and labeled with '(2)'. Other menu items include 'Export CAS list', 'Expand branch', 'Collapse branch', 'Expand All', 'Collapse All', 'Open path', 'Copy path', 'Sort', 'Example Prioritization Scheme (PBT)', 'Activate AOP', 'Activate Effectopedia Wizard', and 'Profile Statistic'.

4. 一特/監視類似物質検出ツールの適用

4.3 適用結果の確認(CSVファイルでエクスポートする場合)(続き)



(3) エクスポートしたい項目をチェックし、(4)「Export」をクリックしてください。

(5) ファイル名とフォルダを選択し、保存してください。

5. 一特/監視類似物質検出ツール 適用結果の概要

○共通

- ・適用結果が「(N/A)」となった場合、それぞれのプロファイラの構造条件に合致していないことを示します。

○Level1

- ・化学構造が類似する一特/監視物質をグループ化し、それぞれのグループに対する構造類似性を判定しています。Level1の判定結果に対応する一特/監視物質のグループは次ページのとおりです。

5. 一特/監視類似物質検出ツール 適用結果の概要

判定結果 (グループ番号)	該当する一特/監視物質 (ID*)
1	アルドリン(一特4), ディルドリン(一特5), エンドリン(一特6)
2	クロルデン又はヘプタクロル
3	トキサフェン(一特12), エンドスルファン又はベンゾエピン (一特29)
4	マイレックス(一特13), クロルデコン(一特23)
5	O- (2, 4-ジクロロフェニル) = O-エチル=フェニルホスホノチオアート(監視9)
6	ポリ塩化ビフェニル (一特1), ヘキサプロモビフェニル(一特24), ポリプロモビフェニル(監視11), ジエチルビフェニル(監視20), トリエチルビフェニル(監視23)
7A	DDT(一特7), 7A)ケルセン又はジコホル (一特14)
7B	ジベンジルトルエン (監視22)
8	テトラプロモジフェニルエーテル (一特25), ペンタプロモジフェニルエーテル (一特26), ヘキサプロモジフェニルエーテル (一特27), ヘプタプロモジフェニルエーテル (一特28), デカプロモジフェニルエーテル(一特33)
9	ポリ塩化ナフタレン(一特2), ジイソプロピルナフタレン(監視15), トリイソプロピルナフタレン(監視16)
10	ヘキサクロロベンゼン(一特3), ペンタクロロベンゼン(一特19), 1, 3, 5-トリプロモ-2-(2, 3-ジプロモ-2-メチルプロポキシ) ベンゼン (監視8), ペンタクロロフェノール又はその塩若しくはエステル (一特31)
11	α -ヘキサクロロシクロヘキサン(一特20), β -ヘキサクロロシクロヘキサン (一特21), γ -ヘキサクロロシクロヘキサン(一特22), ベルフルオロ (1, 2-ジメチルシクロヘキサン) (監視27)
12	ポリ塩化直鎖パラフィン(一特32)
13	ヘキサクロロブタ-1, 3-ジエン(一特15)
14A	ベルフルオロヘプタン(監視34), ベルフルオロオクタ(監視35)
14B	P F O S 又はその塩(一特17), P F O S F (一特18), P F O A (一特34), ベルフルオロドデカン酸(監視29), ベルフルオロトリデカン酸(監視30), ベルフルオロテトラデカン酸(監視31), ベルフルオロペンタデカン酸(監視32), ベルフルオロヘキサデカン酸(監視33)
15	ベルフルオロ (1, 2-ジメチルシクロヘキサン) (監視27), 2, 2, 3, 3, 4, 4, 5-ヘプタフルオロ-5- (ベルフルオロブチル) オキソラン(監視36)
16	ビス (トリブチルスズ) = オキシド(一特9)

判定結果 (グループ番号)	該当する一特/監視物質 (ID*)
17	テトラフェニルスズ (監視7)
18	N, N'-ジトリル-バラ-フェニレンジアミン、N-トリル-N'-キシリル-バラ-フェニレンジアミン又はN, N'-ジキシリル-バラ-フェニレンジアミン(一特10)
19A	2, 4, 6-トリ-ターシャリ-ブチルフェノール (一特11), 1-tert-ブチル-3, 5-ジメチル-2, 4, 6-トリニトロベンゼン(監視2), 1, 3, 5-トリ-tert-ブチルベンゼン(監視10), 4-sec-ブチル-2, 6-ジ-tert-ブチルフェノール(監視37)
19B	2, 6-ジ-tert-ブチル-4-フェニルフェノール(監視14), 2, 2', 6, 6'-テトラ-tert-ブチル-4, 4'-メチレンジフェノール(監視28)
20	2, 4-ジ-tert-ブチル-6- [(2-ニトロフェニル) ジアゼニル] フェノール(監視26)
21	2- (2H-1, 2, 3-ベンゾトリアゾール-2-イル) -4, 6-ジ-tert-ブチルフェノール(一特16), 2, 4-ジ-tert-ブチル-6- (5-クロロ-2H-1, 2, 3-ベンゾトリアゾール-2-イル) フェノール(監視18), 2- (2H-1, 2, 3-ベンゾトリアゾール-2-イル) -6-sec-ブチル-4-tert-ブチルフェノール(監視25)
22	N, N-ジシクロヘキシル-1, 3-ベンゾチアゾール-2-スルフェンアミド(監視24)
23	1, 4-ビス (イソプロピルアミノ) -9, 10-アントラキノン(監視38)
24	水素化テルフェニル(監視21)
25	ジベンテンダイマー又はその水素添加物(監視12)
26	シクロドデカン (監視4), シクロドデカ-1, 5, 9-トリエン(監視3), ヘキサプロモシクロドデカン(一特30)
27	2-イソプロピルピシクロ [4. 4. 0] デカン又は3-イソプロピルピシクロ [4. 4. 0] デカン (監視13)
28	1, 1-ビス (tert-ブチルジオキシ) -3, 3, 5-トリメチルシクロヘキサン (監視6)
29	α - (ジフルオロメチル) - ω - (ジフルオロメトキシ) ポリ [オキシ (ジフルオロメチレン) /オキシ (テトラフルオロエチレン)] (監視39)
30	オクタメチルシクロテトラシロキサン(監視40), ドデカメチルシクロヘキサシロキサン(監視41)
31	酸化水銀 (II) (監視1)

*J-CHECK (https://www.nite.go.jp/chem/jcheck/top.action?request_locale=ja) による

5. 一特/監視類似物質検出ツール 適用結果の概要

○Level2

- ・プロファイラを適用させた化学構造が、化審法一特/監視物質に類似度80%(QSAR Toolboxのデフォルト)以上となった場合に、類似している化審法一特/監視物質(Class_1/Monitoring)の政令番号が示されます。

○Level3

- ・プロファイラを適用させた化学構造が、化審法一特/監視物質(Class_1/Monitoring)と一致した場合に、その政令番号が示されます。

5. 一特/監視類似物質検出ツール 適用結果の概要

OPOPs

- ・プロファイラを適用させた化学構造が、POPs条約付属書Aへの掲載が決定した物質(一特/監視物質でないもの)へ該当する場合に、該当する物質の名称や略称が示されます。

本プロファイラで定義している物質は、次ページのとおりです。

5. 一特/監視類似物質検出ツール 適用結果の概要

Dechlorane Plus : Dechlorane Plus (デクロランプラス)

Methoxychlor: Methoxychlor (メトキシクロル)

PCDD: Polychlorinated dibenzo-p-dioxins
(ポリ塩化ジベンゾーパラージオキシン)

PCDF: Polychlorinated dibenzofurans
(ポリ塩化ジベンゾフラン)

PFHxS related compounds: PFHxS-related compounds
(PFHxS関連物質)

PFOA: Perfluorooctanoic acid (PFOA), its salts and PFOA-related compounds
(ペルフルオロオクタン酸とその塩及びPFOA関連物質)

PFOA?: PFOA関連物質である可能性があるが、確定できていない構造群
(PFOA関連物質については条約の決議文書の解釈に疑義が生じており、
一部構造群については該当するかどうか未確定となっております)

UV-328: UV-328

5. 一特/監視類似物質検出ツール 適用結果の概要

化審法一特/監視物質、POPs物質一覧については、NITE-CHRIPより御確認ください。

第一種特定化学物質

https://www.chem-info.nite.go.jp/chem/crip/crip_search/intSrhSpclst?e_trans=&slScNm=RJ_01_001

監視化学物質

https://www.chem-info.nite.go.jp/chem/crip/crip_search/intSrhSpclst?e_trans=&slScNm=RJ_01_010

POPs

https://www.chem-info.nite.go.jp/chem/crip/crip_search/intSrhSpclst?e_trans=&slScNm=RO_01_002

プロファイラを用いた評価フローの詳細は、「少量新規化学物質における分解性及び蓄積性評価フローについて(解説)」に記載しております。

https://www.nite.go.jp/chem/qsar/syouryou_QSAR.html

補足情報

SMILESの作成方法

<https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/syouryou/mol/>

② クリック

① 少量新規申出のルールに従って構造を作成
<https://www.nite.go.jp/chem/kasinn/syouryou.html>

③ 選択

④ 選択してコピー (SMILES形式の構造)

化学物質管理

HOME > 化学物質管理 > 化審法関連情報 > 新規化学物質の届出・申出等 > 少量新規化学物質の申出 > MOLファイル作成

少量新規化学物質の申出に必要なMOLファイルの作成

クリア 構造式整形 MOLファイル出力 高さ変更

Structure Image

Format SMILES

ClC1=CC=C(C=C1)C1=CC=C(Cl)C=C1

Use **Ctrl+A**, **Ctrl+C** to select and copy

Download

マニュアル・注意事項 FAQ 経済産業省 ガイダンス

事業者ガイダンス(MarvinJS編) 構造式作成動画一覧

POWERED BY ChemAxon