一特/監視類似物質検出ツール
ユーザマニュアル

2026年7月

（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。

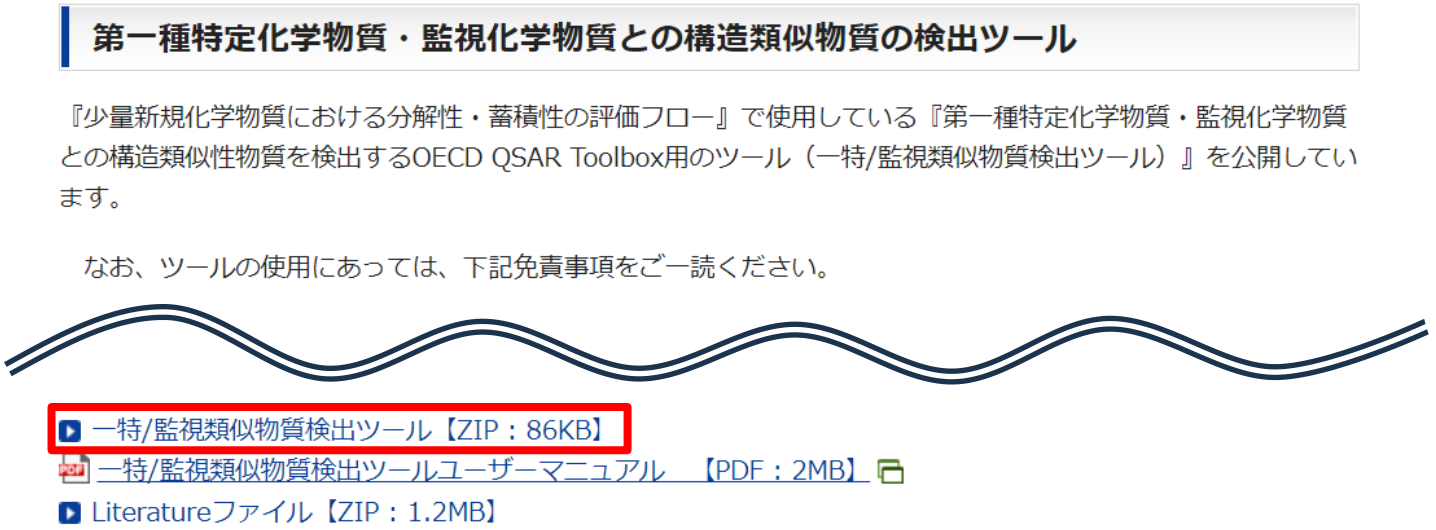
一特/監視類似物質検出ツールを使用するためには、初回のみ、QSAR Toolboxに一特/監視類似物質検出ツールプロファイラを登録する必要があります。

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



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

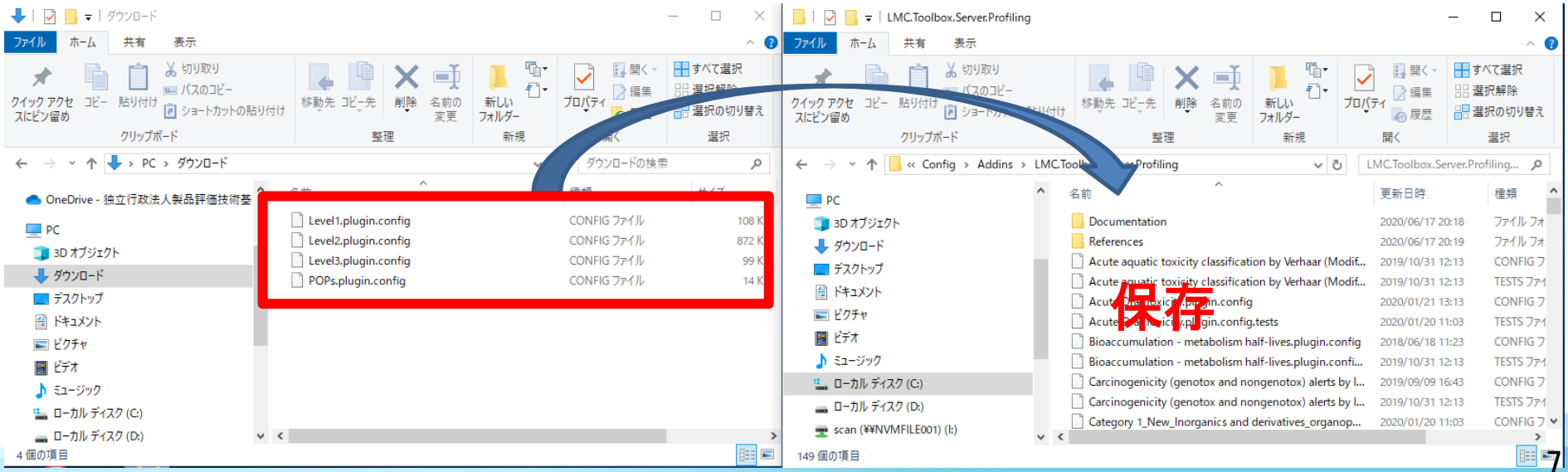
QSAR Toolboxは起動させずに、以下のプロファイラ保存フォルダを開きます。お持ちのQSAR Toolboxのバージョンによって保存フォルダが異なります。

バージョン4.3
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
C:¥Program Files¥Common Files¥QSAR Toolbox 4.6¥Config¥Addins¥LMC.Toolbox.Server.Profiling
バージョン4.7
C:¥Program Files¥Common Files¥QSAR Toolbox 4.7¥Config¥Addins¥LMC.Toolbox.Server.Profiling
バージョン4.8(最新)
C:¥Program Files¥Common Files¥QSAR Toolbox 4.8¥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

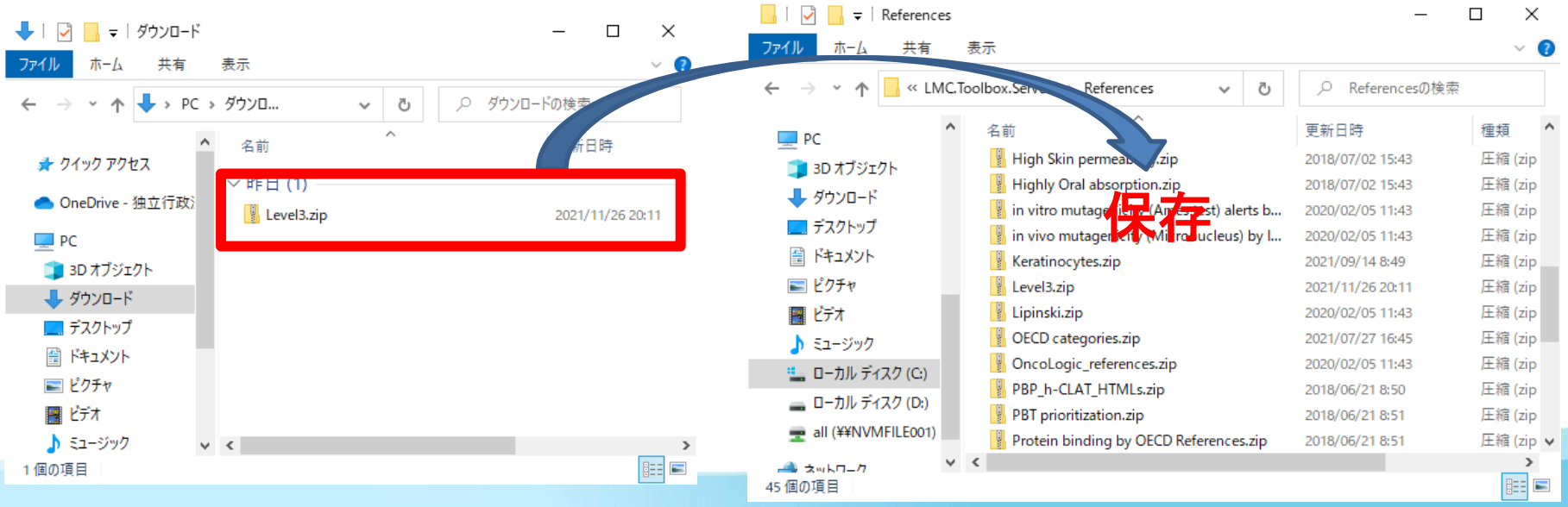


1. 一特/監視類似物質検出ツールの設定（初回のみ）

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（QSARtoolbox4.8の場合）。

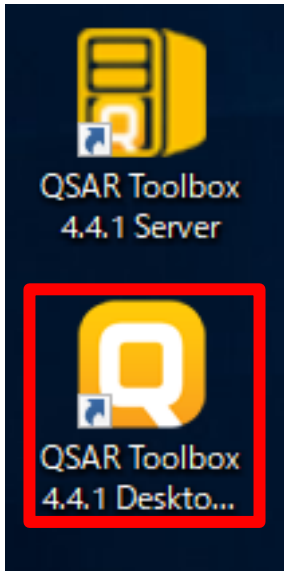
C:¥Program Files¥Common Files¥QSAR Toolbox 4.8¥Config¥Addins¥LMC.Toolbox.Server.Profiling¥References



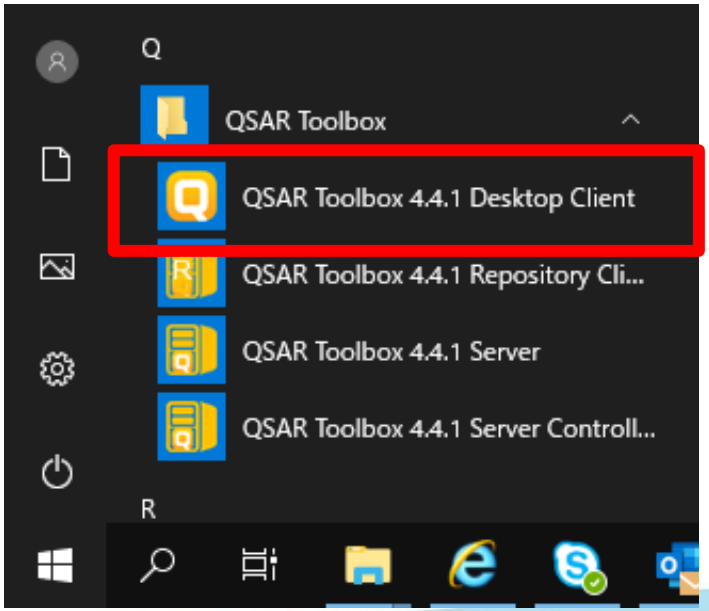
2. QSAR Toolboxの起動

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。



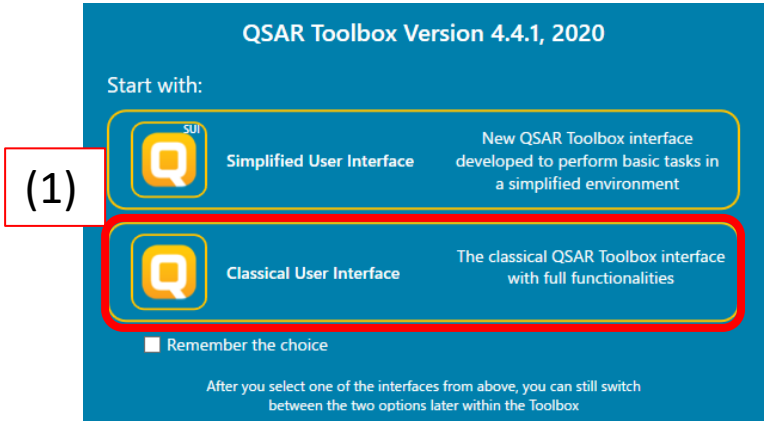
または



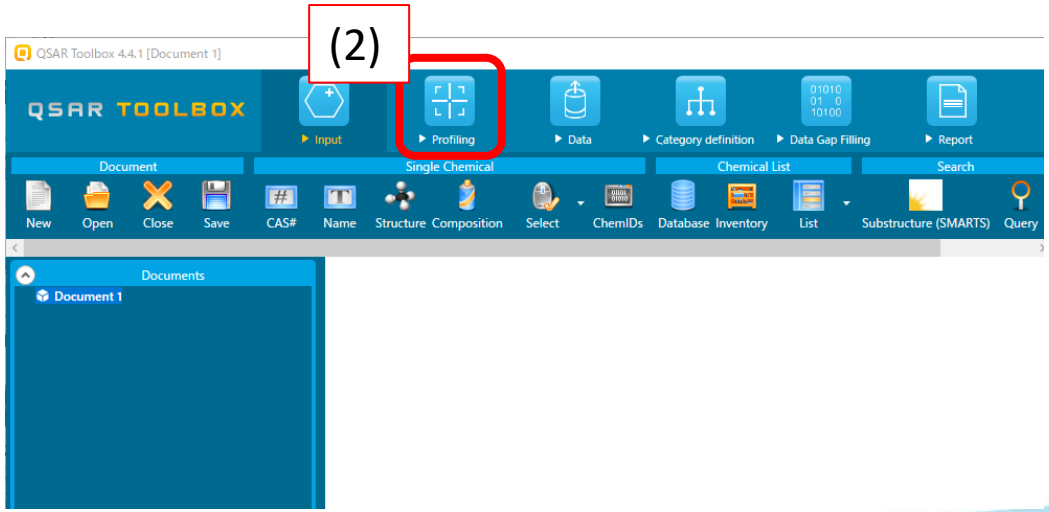
2. QSAR Toolboxの起動

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）



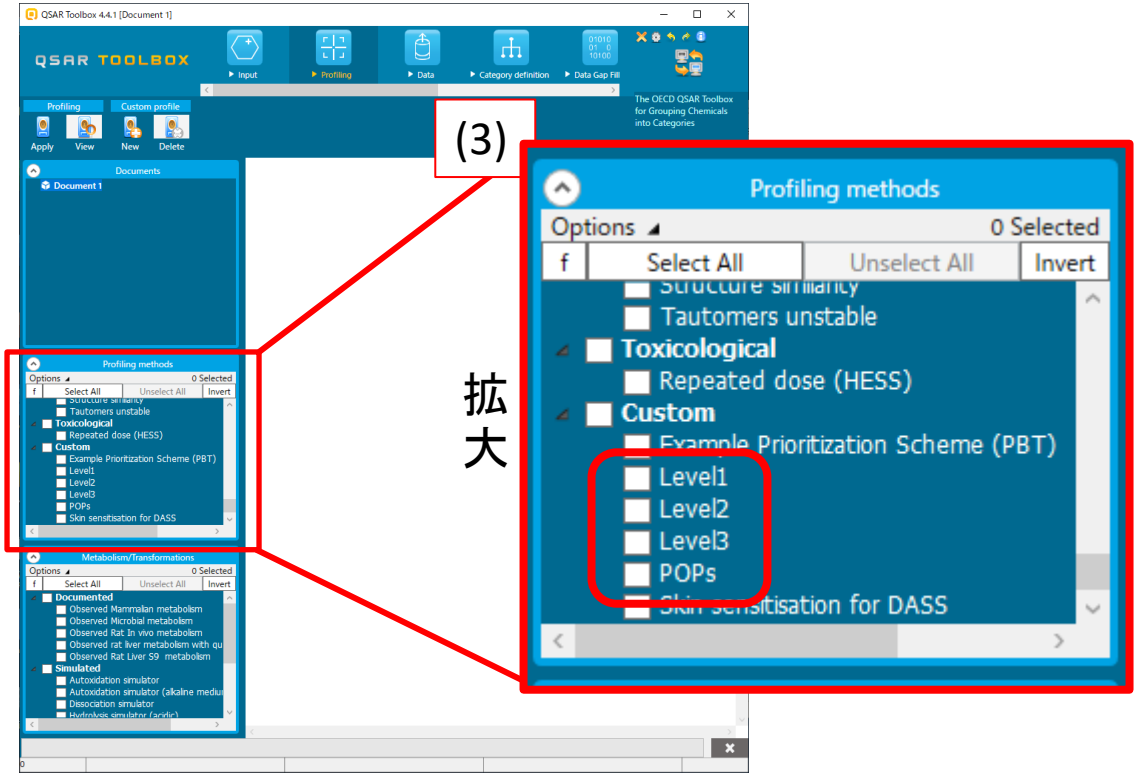
(2)右の画面が表示されたら、上段の「▸Profiling 」アイコンをクリックしてください。



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

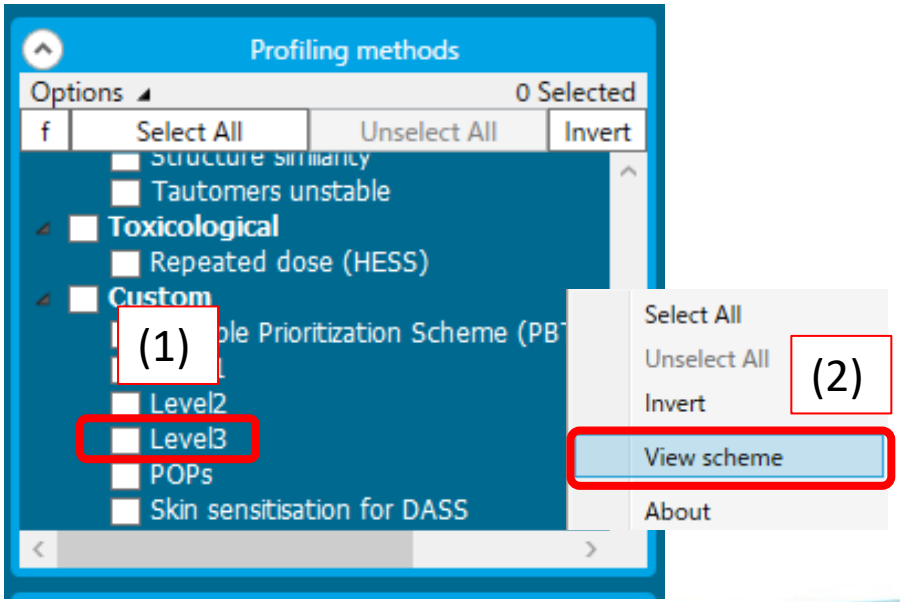
- Level1
- Level2
- Level3
- POPs

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。

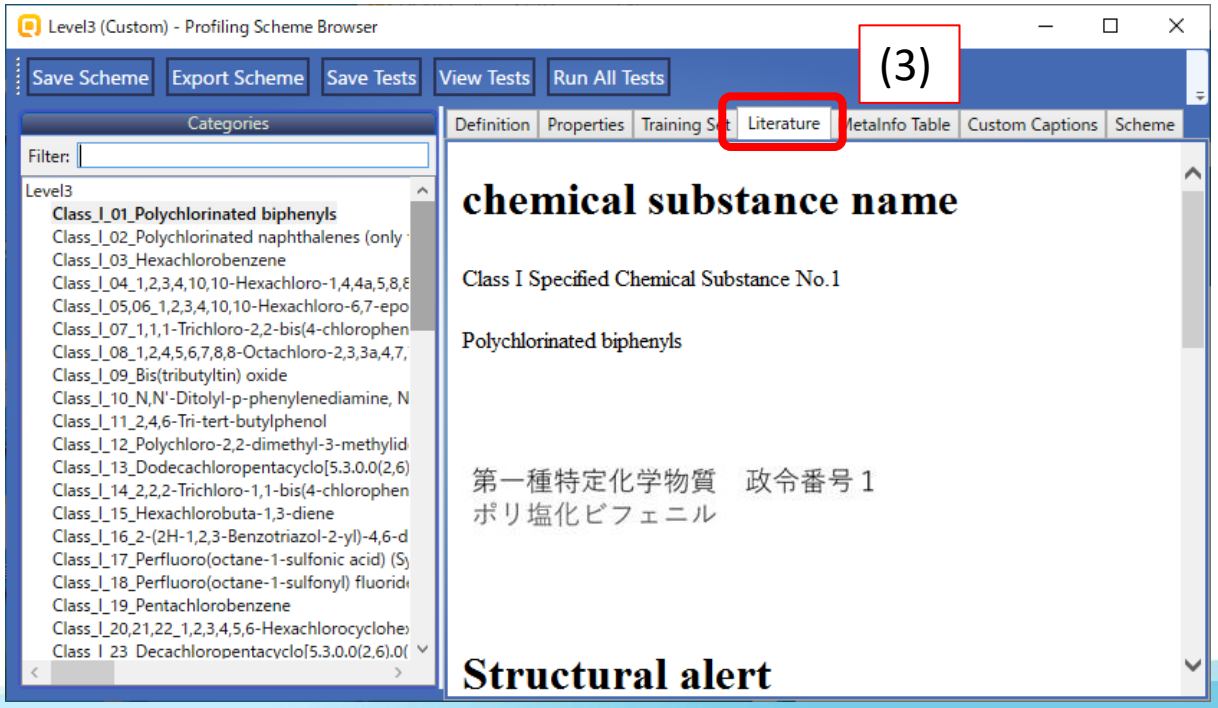
(2)View schemeをクリックしてください。



2. QSAR Toolboxの起動

2.3　Level3のLiteratureデータ確認方法

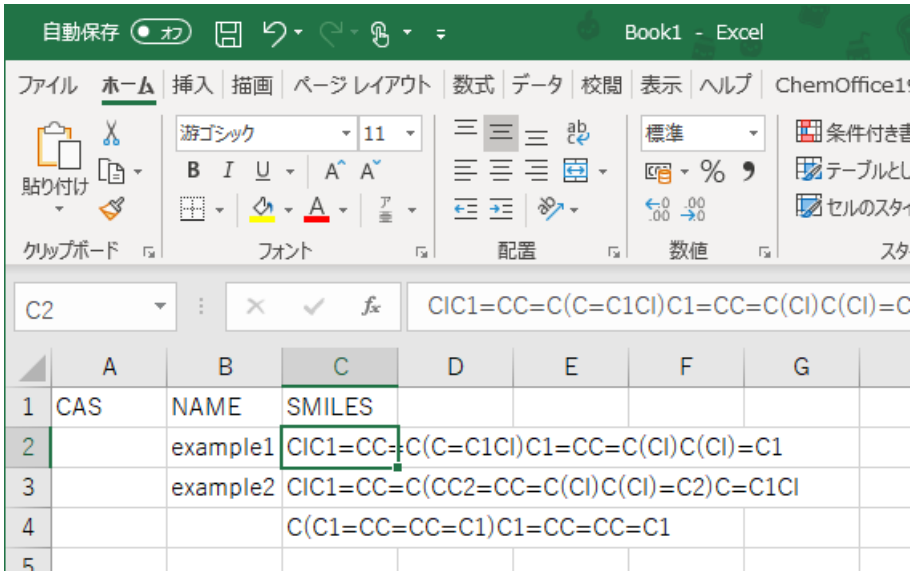
(3)出てきたウインドウのLiteratureをクリックすることで、Level3プロファイラに登録されている一特/監視化学物質の構造定義等を確認することができます。



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。



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以外は入力がなくて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）

〇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

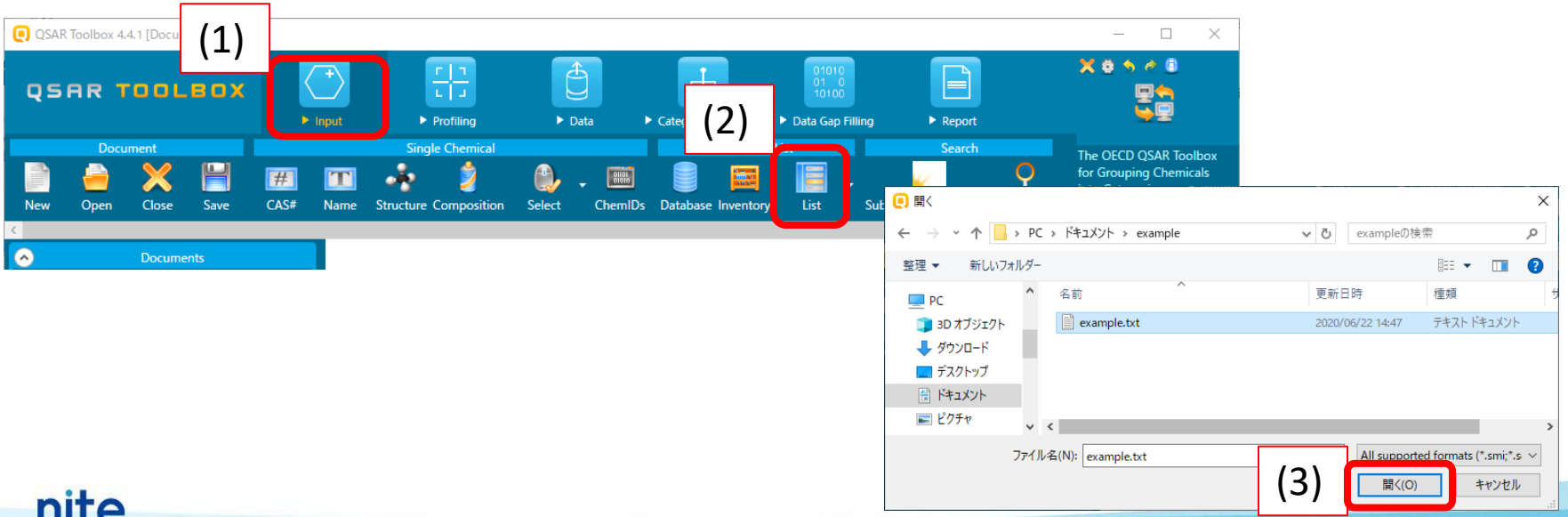
3. ツールを適用させるSMILESのインポート

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

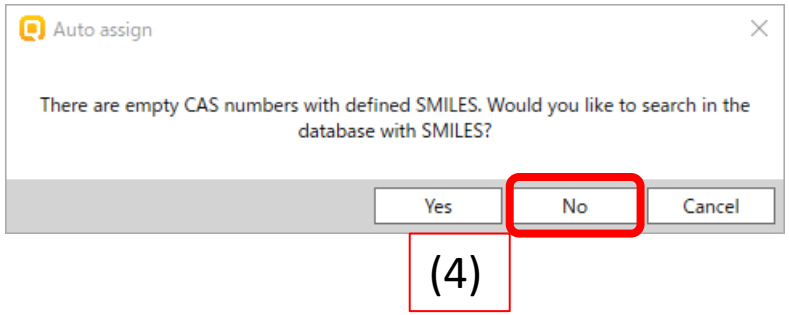


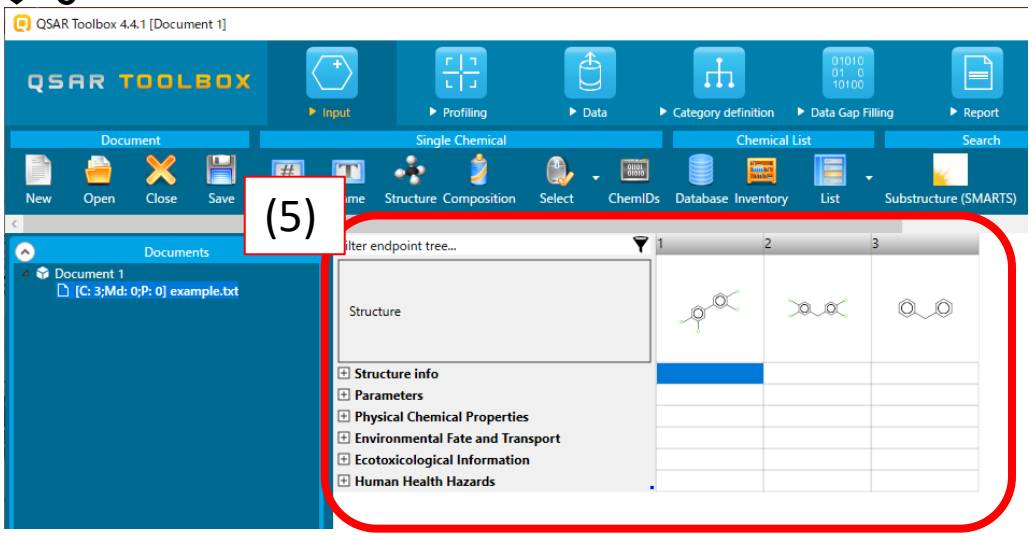
3. ツールを適用させるSMILESのインポート

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。

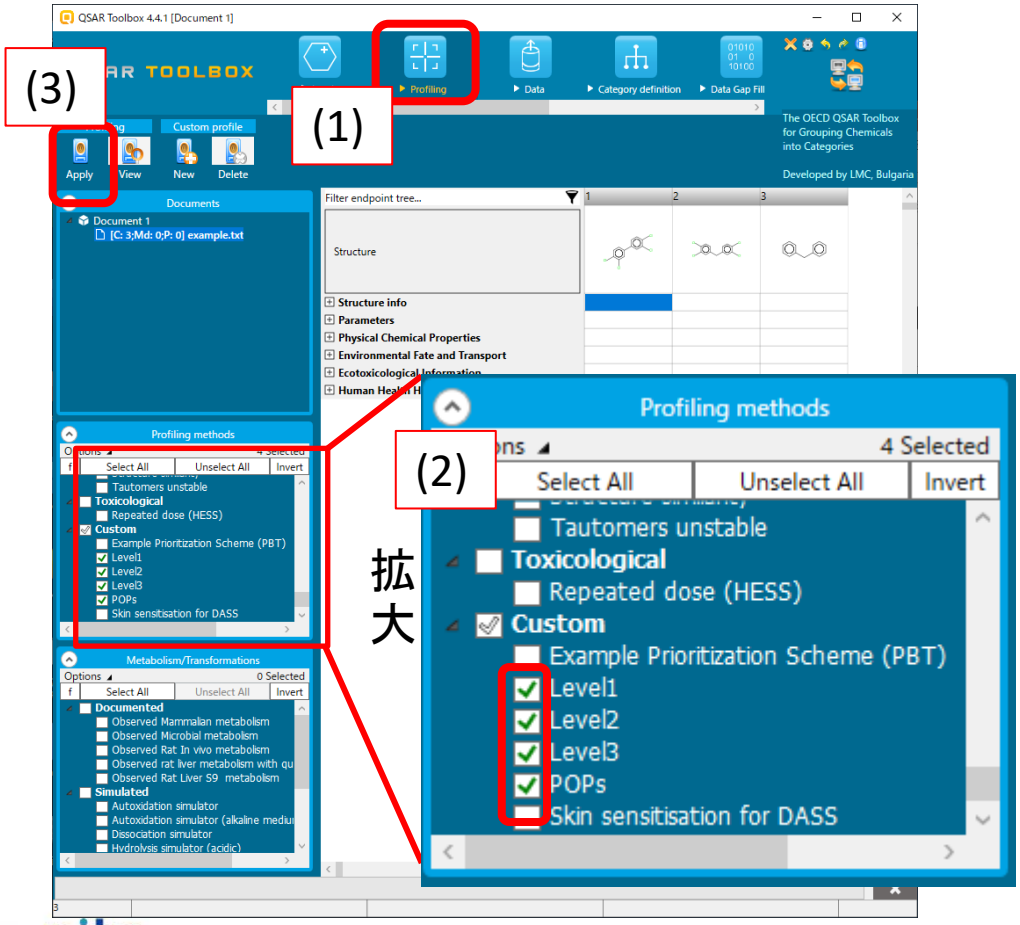
(5) SMILESが読み込まれます。





4. 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



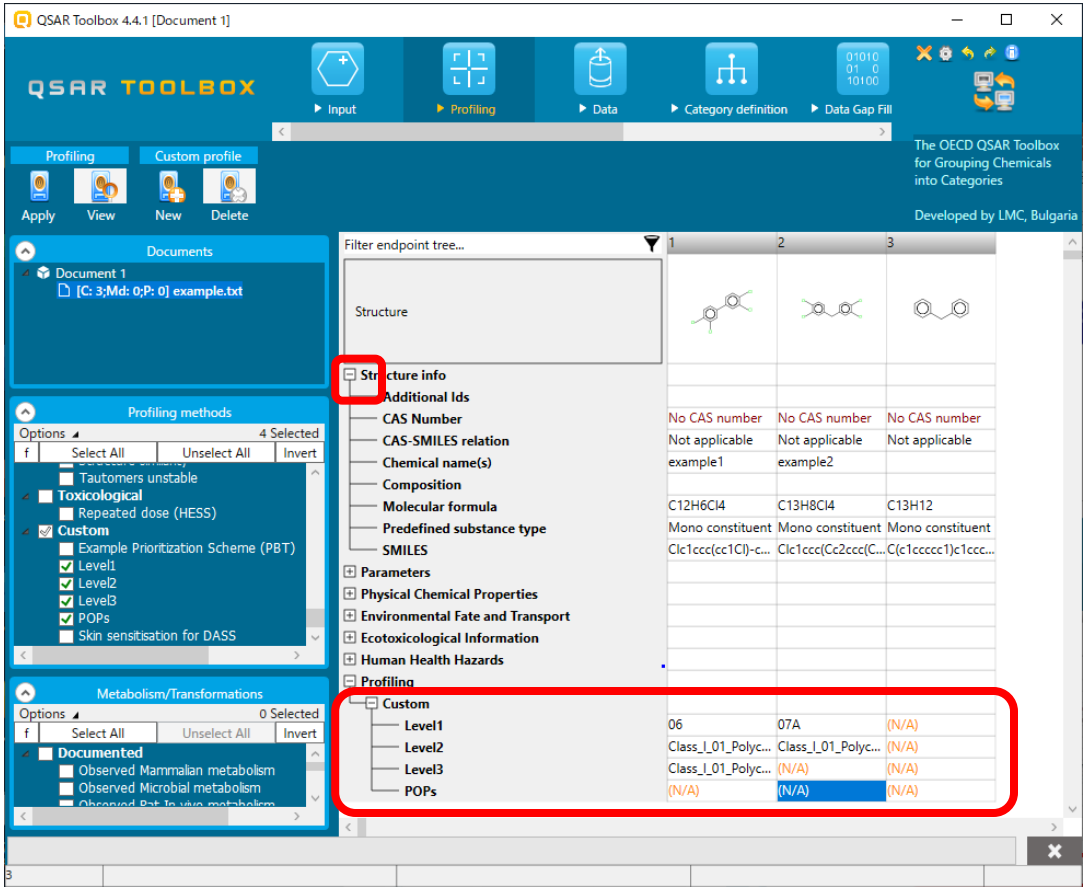
(1)「▸Profiling 」アイコンをクリックしてください。

(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



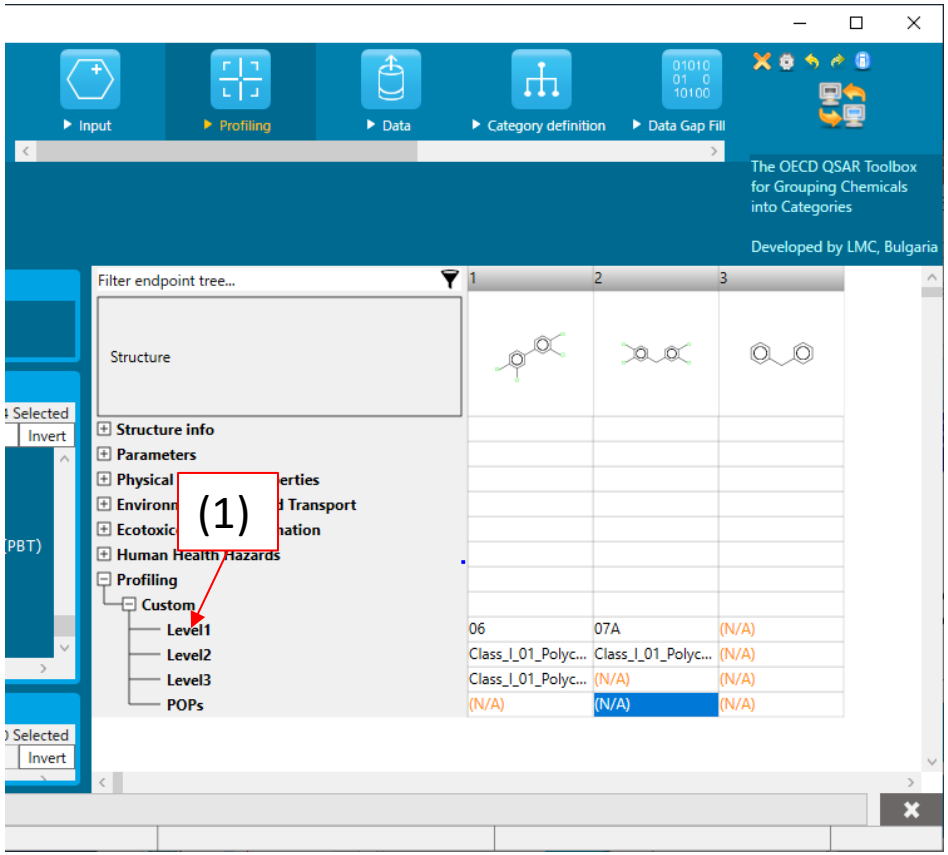
それぞれのプロファイラの適用結果が表示されます。

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。

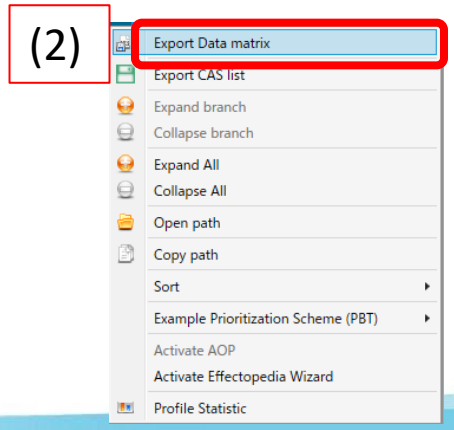
4. 一特/監視類似物質検出ツールの適用

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)



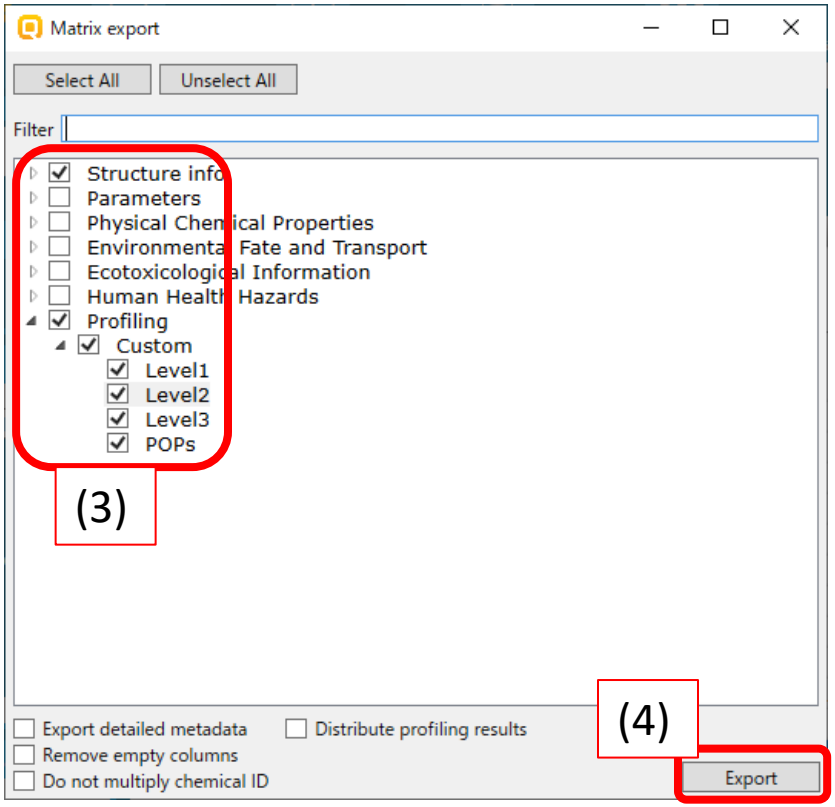
(1)プロファイラ名が記載されている薄いグレーのエリアを右クリックしてください。

(2)「Export Data Matrix」をクリックしてください。



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

〇共通

・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。

〇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)，ヘキサブロモビフェニル(一特24)，ポリブロモビフェニル(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	テトラブロモジフェニルエーテル（一特25)，ペンタブロモジフェニルエーテル（一特26)，ヘキサブロモジフェニルエーテル（一特27)，ヘプタブロモジフェニルエーテル（一特28)，デカブ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-トリブロモ-2-（2，3-ジブロモ-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)，ペルフルオロ（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	ペルフルオロヘプタン(監視34)，ペルフルオロオクタン(監視35)
14B	ＰＦＯＳ又はその塩(一特17)，ＰＦＯＳＦ(一特18)，ＰＦＯＡ(一特34)，ペルフルオロドデカン酸(監視29)，ペルフルオロトリデカン酸(監視30)，ペルフルオロテトラデカン酸(監視31)，ペルフルオロペンタデカン酸(監視32)，ペルフルオロヘキサデカン酸(監視33)
15	ペルフルオロ（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-（ペルフルオロブチル）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-パラ-フェニレンジアミン、N-トリル-N'-キシリル-パラ-フェニレンジアミン又はN，N'-ジキシリル-パラ-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	ジペ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)，ヘキサブロモシクロドデカン(一特30)
27	2-イソプロピルビシクロ［4．4．0］デカン又は3-イソプロピルビシクロ［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

〇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。

5. 一特/監視類似物質検出ツール適用結果の概要

〇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。

注意

一特35(PFOA関連物質)及び37(PFHxS関連物質)については、該当構造の抽出漏れをなくすために該当する可能性がある構造を広めに抽出しています。該当しない場合もありますので、該当するか否かは一特のリストをご確認ください。

5. 一特/監視類似物質検出ツール適用結果の概要

〇POPs

・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、以下のとおりです。

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)
Chlorpyrifos: Chlorpyrifos (クロルピリホス)
MCCP: Medium-chain chlorinated paraffins (中鎖塩素化パラフィン)
LC-PFCA and its salts: Long-chain PFCA and its salts (長鎖PFCAとその塩)
LC-PFCA related compounds: Long-chain PFCA related compounds (長鎖PFCA関連物質)

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/chrip/chrip_search/intSrhSpcLst?_e_trans=&slScNm=RJ_01_001

監視化学物質
https://www.chem-info.nite.go.jp/chem/chrip/chrip_search/intSrhSpcLst?_e_trans=&slScNm=RJ_01_010

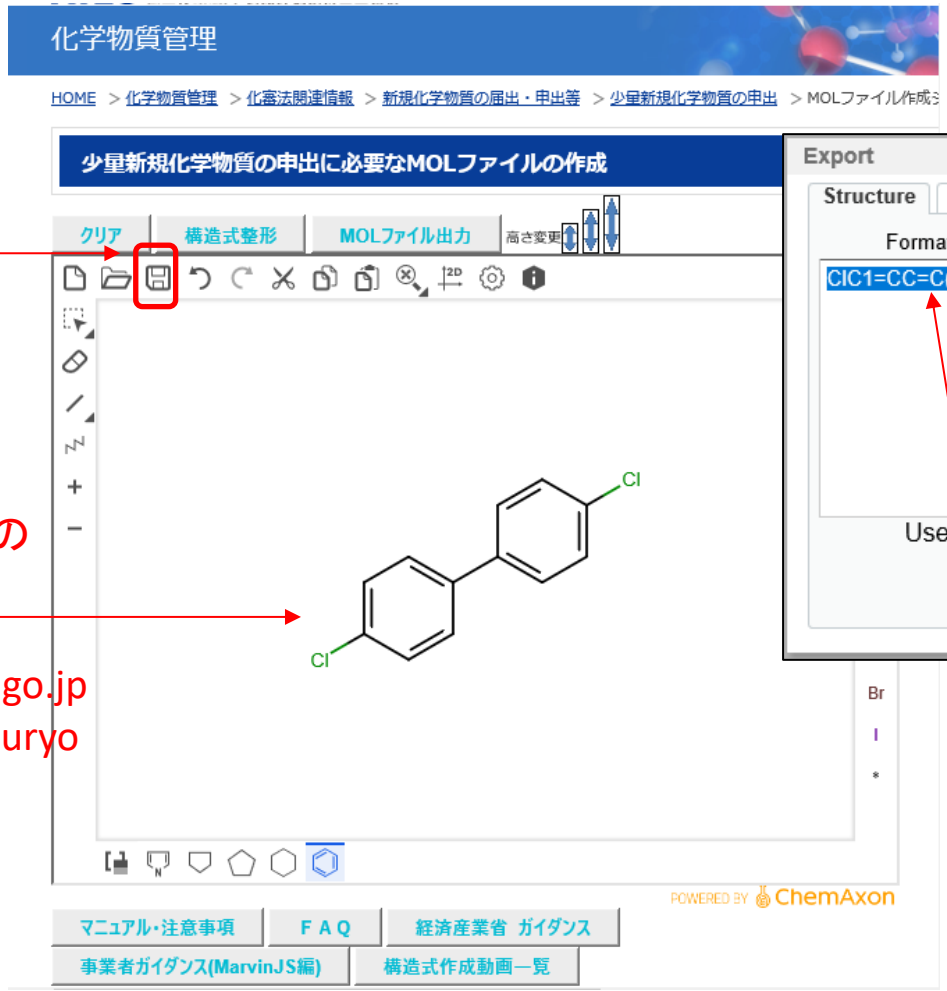
POPs
https://www.chem-info.nite.go.jp/chem/chrip/chrip_search/intSrhSpcLst?_e_trans=&slScNm=RO_01_002

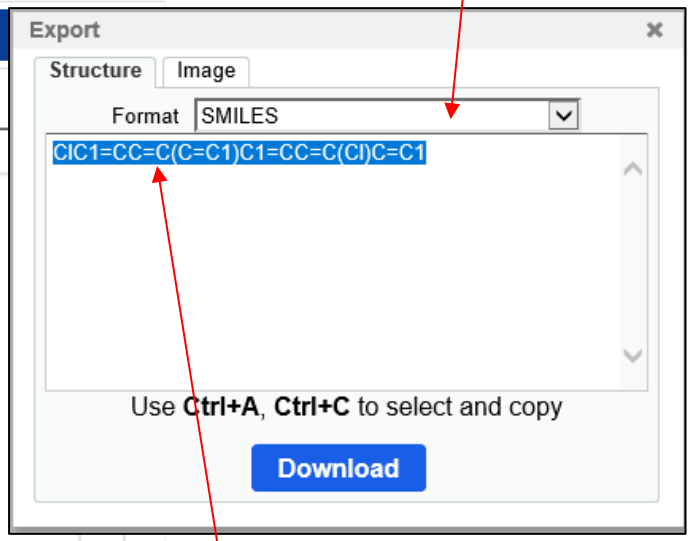
プロファイラを用いた評価フローの詳細は、
「少量新規化学物質における分解性及び蓄積性評価フローについて(解説)」に記載しております。
https://www.nite.go.jp/chem/qsar/syouryou_QSAR.html

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）