

# IUCLID実践セミナー

## テキスト

第1.2版

日本化学工業協会  
2008.10



このマニュアルは欧州委員会発行のIUCLID5 Guidance and support, End User Manual, Volume 1 June 2007を基に日化協が独自に抜粋・翻訳・補足したものです。

なお、翻訳に際しては、経済産業省発行の同マニュアルの部分訳(経済産業省 > 国際協調と調和の促進 > REACH(欧州化学品規制)について > REACH関連資料に収載のIUCLID5のガイダンス文書(手引き書)の和訳)を参考にさせていただいています。

Copyright © 2008 日本化学工業協会REACHタスクフォース

**Version 2008-10-06**

## Table of Contents

### アジェンダ

### IUCLIDとは何か

### 演習のためのコンピュータ設定とユーザ名の確認

### ケーススタディ

#### C. さあ始めましょう-初心者のための事例練習

##### C.1. 事例練習のイントロダクション

##### C.2. Starting IUCLID 5: First steps ウィザード

##### C.3 Substanceのためのデータセットを作成し、参照物質の割り当てる

##### C.4 Substanceデータセットを一つ完成させる

###### C.4.1 セクション1から3のデータを入力/編集する

###### C.4.2 セクション4から13のデータを入力/編集する

##### C.5. Printing the Substance dataset

##### C.6. ドシエを作成する

##### C.7. Exporting the Substance dataset

##### C.8. Importing the Substance dataset

[C.9. Making annotations](#)

[C.9.1. Annotating raw data](#)

[C.9.2. Annotating a Dossier](#)

[C.10. Logging out](#)

...

## [E. Specific Guidance on Content of IUCLID Sections](#)

...

[E.2. \[2\] Identification and Labelling](#)

[E.2.1. GHS](#)

[E.2.2. DSD-DPD](#)

[E.2.2.JCIA\\_1 DSD-DPD補足 危険物分類](#)

[E.3. \[3\] Manufacture, Use and Exposure](#)

...

[E.3.5. Identified uses and exposure scenarios](#)

[E.3.6. Uses advised against](#)

[E.3.7. Waste from production and use](#)

[E.3.8. Exposure estimates](#)

## **[付録:](#)**

[IUCLIDのアイコン](#)

[IUCLIDエントリ画面](#)

[IUCLID toolbar](#)

# IUCLID実践セミナー 2008.10.06 日本化学工業協会 2F A会議室

## アジェンダ

1. 10:00 開講 説明: IUCLIDとは何か
2. 10:30-10:50 実習: §1 IUCLIDをインストールする—デストリビューティッド・インストール  
10:50-11:00 休憩
3. 11:00-12:00 実習: §2 (C.1., C.2., **C.3.**, **C.4.1.**) Substanceのためのデータセットを作成
4. 12:00-13:00 昼食: 会議室Cにご用意しております。  
昼食中にはECHAが提供している予備登録の解説ビデオを日本語字幕付きでこの部屋で上映します。  
[download: 単一成分物質のバルク登録用XMLファイル作成ビデオコンテンツ \[zip\]](#)  
[download: 多成分物質のバルク登録用XMLファイル作成ビデオコンテンツ \[zip\]](#)
5. 13:00-14:00 実習: §3(**C.4.2.**) エンドポイントデータの入力。  
14:00-14:10 休憩
6. 14:10-15:10 実習: §4(**E.2.2.**, **E.2.2.JCIA\_1**)分類についての調査と入力。  
15:10-15:20 休憩
7. 15:20-16:20 実習: §5(**C.6.**) ドシエ(一式書類)の作成。
8. 16:20-16:30 質問等



**IUCLID 5**  
INTERNATIONAL UNIFORM CHEMICAL INFORMATION DATABASE

## IUCLID 5.0

Copyright 2005-2007 by the European Commission  
<http://www.iuclid.eu>

---

© 2008 日本化学工業協会

# IUCLIDとは何か

- International Uniform Chemical Information Database
- ソフトウェア・アプリケーション・システム
- 化学物質固有の危険(有害)性データの管理と規制当局への報告
- 第1バージョン: 1993年 ECB により開発
  - 目的: 「既存物質のリスク評価と管理」に関する理事会規則(EEC) 793/93(いわゆる「既存物質規則」)の要請を満たす
    - 「既存物質」は1981年9月18日以前に欧州市場にあったとみなされる、また、EINECSインベントリに記載されている物質である。この既存物質規則は産業界に「高生産量化学物質」(HPVCs)に関して入手可能なデータをすべて登録することを義務付けている。
- 「EUリスク評価プログラム」内でデータ収集と評価のための基本ツールでもあった。

(IUCLID5末端ユーザ取説, p.11)

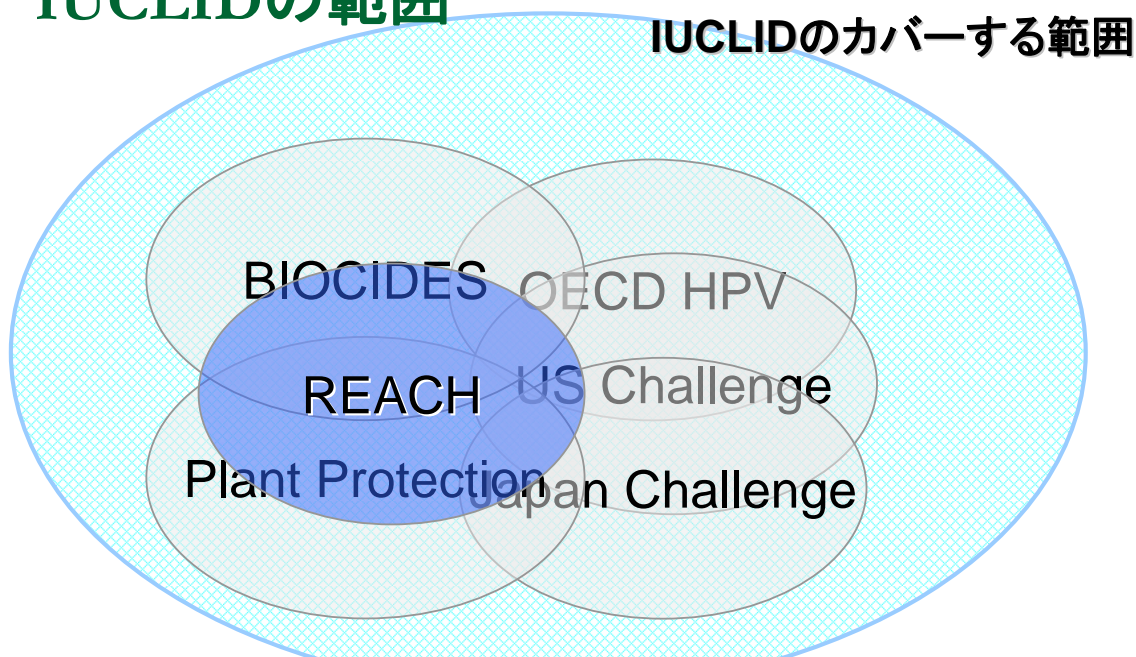
# IUCLID履歴

- 1993 ECB第1バージョン開発、「既存物質規制」(理事会規則(EEC) 793/93)と「EUリスク評価プログラム」に使用
- 1998,2000 Ver 3.05, 3.1.1。OECD SIDS; ICCA, US HPVCで使用
- 2000(?) EU バイオサイド指令 98/8/EC(BPD)の通知プロセスで使用
- 2001 Ver 4.0 既存物質規制とバイオサイド指令に対応。
- 2007/06/12 IUCLID 5 リリース - REACHに対応。設計を一新。
- 2007/06/19 IUCLID XML format
- 2007/12/17 IUCLID4→IUCLID5 移行ツール 更新
- 2008/02/08 Pre-registration XML format
- 2008/03/26 IUCLID 5 Pre-registration plugin リリース
- 2009初頭に IUCLID 5.1リリース予定

([IUCLID5 Webサイト](#)とIUCLID5末端ユーザ取説等から)

「IUCLIDとは」

## IUCLIDの範囲



**IUCLIDがカバーするのはREACHだけではない。**

## REACH規則の目的

- 本規則(REACH Regulation)によって、
  - 競争力及び技術革新を強化させつつ、
  - 確実に人の健康や環境の高レベルでの保護を図り、ならびに、
  - 物質そのものおよび調剤および物品に含まれる物質の物流の自由を図るべきである。また、
  - 本規則によって、物質のハザード評価の代替手法の開発を促進すべきである。

*“This Regulation should ensure a high level of protection of human health and the environment as well as the free movement of substances, on their own, in preparations and in articles, while enhancing competitiveness and innovation. This Regulation should also promote the development of alternative methods for the assessment of hazards of substances.”(Whereas clause 1)*

# REACH規則の新しい特徴

- 既存化学物質と新規化学物質の要求事項の区別をなくす。
  - 段階的導入物質(経過措置)
- リスクアセスメントの実施責任を産業界(特に化学物質生産者)に移す。
  - ハザードベースの規制からリスクベースの規制
  - Risk assessment ⇒ Safety assessment
- Article(物品、成形品、製品)製造業者にも責任。
  - リスクベースの規制
- ITの活用
  - IUCLID5, REACH-IT, (Q)SAR Tool, CSA/CSR tool

5

## リスクベース規制

リスク = 危険性 × 暴露

- 危険性(Hazard、Dangerous properties) :
  - その物質は、潜在的に人、環境へどのような悪い影響を及ぼす固有の性質を持っているか？
    - (物理化学的)危険性、(人健康)有害性；環境への悪影響
- 暴露(Exposure) :
  - 誰が、いつ、どのように、どれくらい危険なものに接触するか？
    - 暴露シナリオ(exposure scenario)、暴露量(exposure)
- リスク(Risk):
  - その結果として、どのくらい悪い影響が、どのくらいの頻度(確率)で起こるか？
    - 危険性の低い物質
    - 暴露量が低い(≒頻度(確率)が小さい)



# リスクベース規制

リスク = 危険性 × 暴露

- 危険性(Hazard、Dangerous properties) :
  - その物質は、潜在的に人、環境へどのような悪い影響を及ぼす固有の性質を持っているか？
    - (物理化学的)危険性、(人健康)有害性；環境への悪影響
- 暴露(Exposure) :
  - 誰が、いつ、どのように、どれくらい危険なものに接触するか？
    - 暴露シナリオ(exposure scenario)、暴露量(exposure)
    - いつ暴露するか？(製造、取扱い、廃棄、ライフサイクルの各段階)
    - 誰が暴露するか？(製造業者、川下取扱者、消費者; 環境)
- リスク(Risk):
  - その結果として、どのくらい悪い影響が、どのくらいの頻度(確率)で起こるか？
    - 危険性の低い物質
    - 暴露量が低い(≒頻度(確率)が小さい)

7

# リスクベース規制

- 暴露(Exposure) :
  - 誰が、いつ、どのように、どれくらい危険なものに接触するか？
    - 暴露シナリオ(exposure scenario)、暴露量(exposure)
    - いつ暴露するか？(製造、取扱い、廃棄、ライフサイクルの各段階)
    - 誰が暴露するか？(製造業者、川下取扱者、消費者; 環境)
- ➡ 化学物質を取扱う川下ユーザ(DU)にも責任を。
- ➡ **取扱いの情報(Use Information)**の収集が物質の危険な性質の収集とともに重視。

# リスクベース規制

リスク = 危険性 × 暴露

- 危険性(Hazard、Dangerous properties) :
    - その物質は、潜在的に人、環境へどのような悪い影響を及ぼす固有の性質を持っているか？
- 物質固有の危険性データ: 危険性カテゴリと危険性の程度
- 暴露(Exposure) :
    - IUCLIDを使って記録される2つのデータ
      - 暴露シナリオ(exposure scenario)、暴露量(exposure)
- 暴露データ:  
製造、取扱い、廃棄; ライフサイクルの各段階での暴露のシナリオ(カテゴリ)と暴露の程度(量)
- リスク(Risk):
    - その結果として、どのくらい悪い影響が、どのくらいの頻度(確率)で起こるか？
      - 危険性の低い物質
      - 暴露量が低い(≒頻度(確率)が小さい)

9

「IUCLIDとは」

## IUCLID5とREACH-IT

**IUCLID5ソフトウェア**は、IUCLID5形式の提出書類の作成道具、データ貯蔵庫

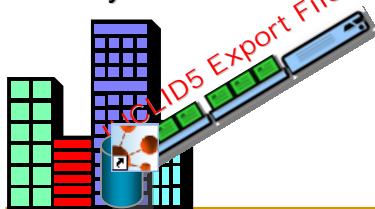
**REACH-IT Portal**は、書類や情報を受付の玄関口(窓口)

**REACH-IT web**は、書類や情報を提出するためのネットワーク

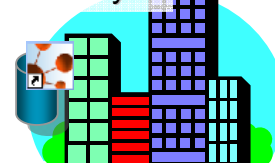
2008/06/01 REACH-IT Portal開設  
<https://reach-it.echa.europa.eu/>



Industry A



Industry B



**IUCLID5 Export File**はデータ輸送用のコンテナ(電子書類)

「IUCLIDとは」

# IUCLID5とREACH-IT

2008/06/01 REACH-IT Portal開設  
<https://reach-it.echa.europa.eu/>

**IUCLID5ソフトウェア**は、IUCLID5形式の提出書類の作成道具、データ貯蔵庫

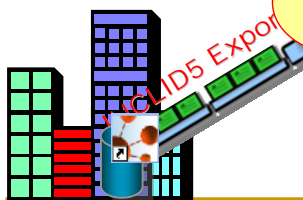
**REACH-IT Portal**は、書類や情報を受付の玄関口(窓口)

**REACH-IT web**は、情報を受付するためのネットワーク

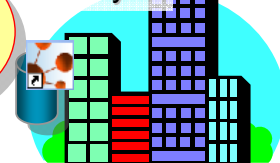
ECHAとのコミュニケーション(情報交換、提出)はREACH-IT Portalを通じて。

当然、予備登録も....

Industry A



Industry B



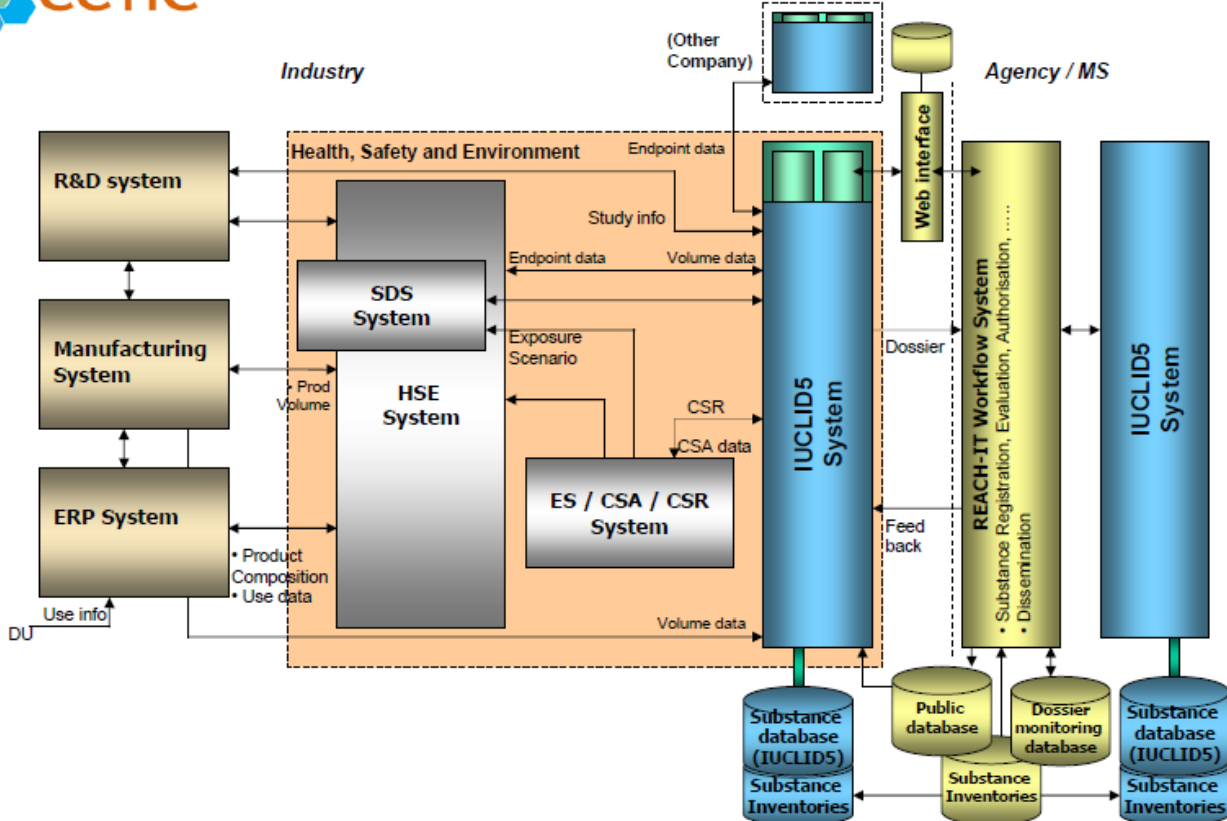
**IUCLID5 Export File**はデータ輸送用のコンテナ(電子書類)

2008.6

11



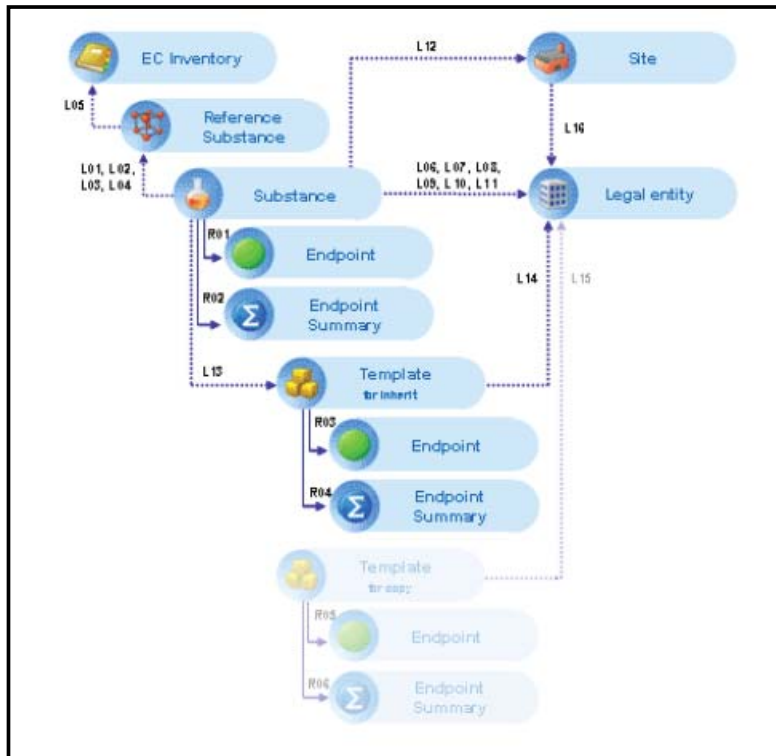
## Industry IT systems for REACH - 'Systems Portfolio'



出展: CEPIC: 11 - 2007 01 25 REACH-IT Architecture introduction.pdf, および、第10回REACH作業部会資料から

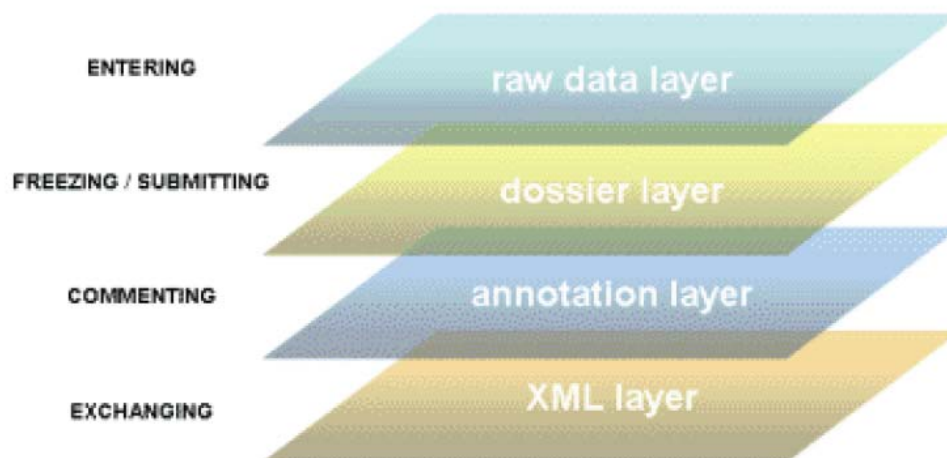
2008-09-29

10 / 97



出展: IUCLIDのマニュアルから

### Multiple data layers in IUCLID 5



## 演習のための設定 - distributed versionのクライアント・インストール

今日の演習のためにまず、あなたのコンピュータを起動し、Windows XPでデフォルトのままログインしてください。

まだそのコンピュータにはIUCLIDはインストールされていません。そこで、まず、あなたの前にあるローカルコンピュータでIUCLIDを使えるように設定しましょう。

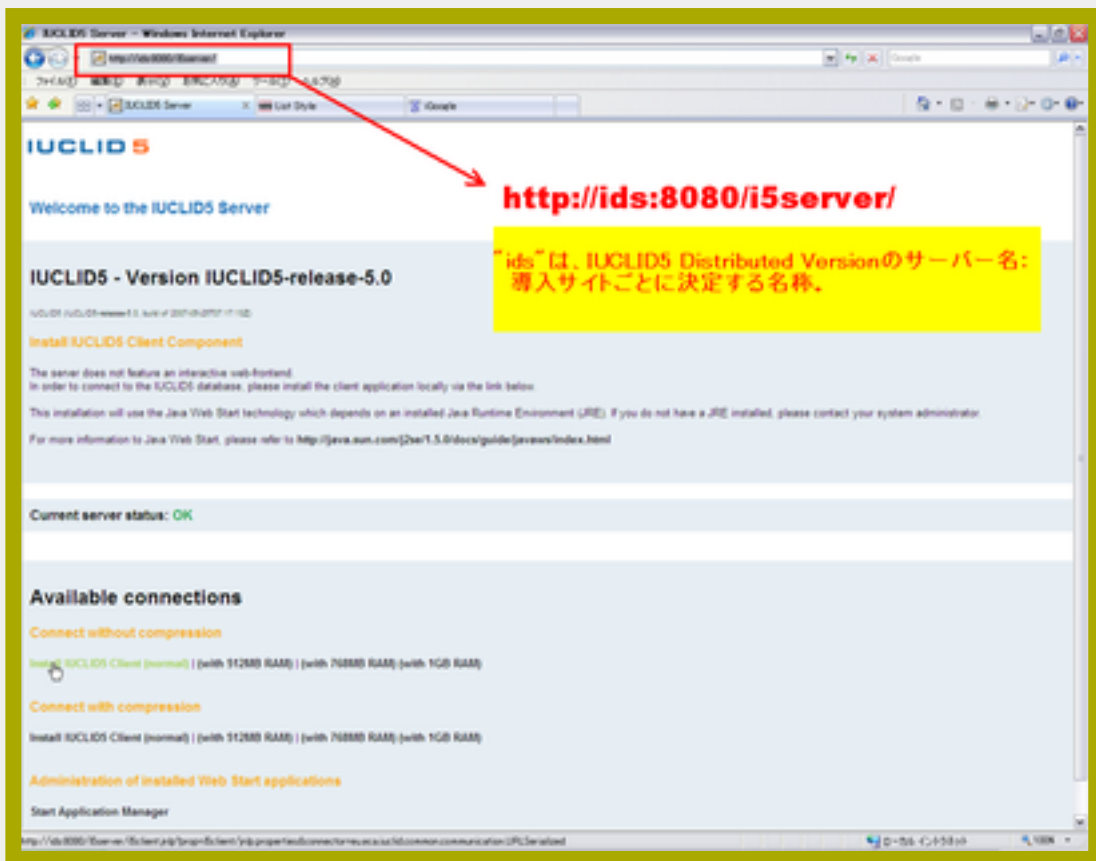
### 【演習】

今この部屋に設定しているLAN環境では、IUCLIDサーバー稼働し、皆様のローカル・コンピュータとケーブルでつながっています。このサーバー(名称: IDS)にはローカル・コンピュータにIUCLID5 Java Applicationをインストールするための機能が含まれています。

手順1： IUCLIDサーバーを呼び出してください。この実習セッションでは、次のURLをクリックするか、ブラウザのアドレスバーにそれを入力してください：

<http://ids:8080/i5server/>

このURLは実習セッションでのみ有効です。あなたが職場でIUCLIDサーバーを利用されるときは、あなたが利用するLAN内でIUCLIDサーバーが設置されており、そのアドレスが利用可能でなければなりません。



## Note

このIUCLIDサーバー、idsという名称、そして、そのアドレスは、この実習セッションでのみ利用可能です。あなたが自分の職場で、自宅でのidsサーバーにアクセスしようとしてもこの実習セッションが属しているLAN(Local Area Network)の外にいるためアクセスできません。また、idsの名前解決が適切に行われるように設定されていなければ、idsの名前をつかってidsサーバーにアクセスすることはできません。

手順2：インストーラーの起動。

開く画面で、Available connections > Install IUCLID5 client (normal)をクリックしてください。そうすると、IUCLID5のクライアントインストーラーが起動し、あなたのローカルコンピュータにインストールが開始されます。

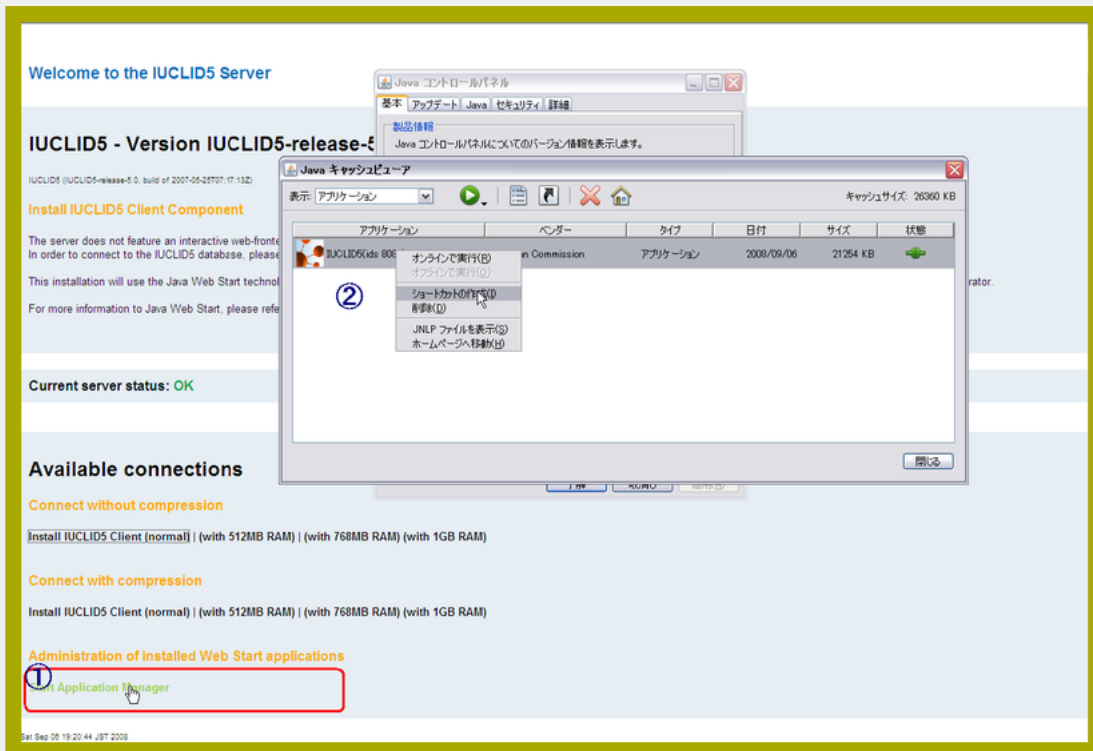


手順3: インストールが数分で終わるとIUCLID5が自動的に起動します。このままIUCLID5にログインしてもよいのですが、ここでは一端[CANCEL]ボタンを押してIUCLID5の起動をキャンセルしてください。



手順4: デスクトップにIUCLIDアイコンを作成する:

1. 4-①: IUCLIDサーバー(ids)画面(最初にインストールを行った画面)を開き、最下部にある Start Application Manager **アプリケーション管理ツールの開始**をクリックします。
2. 4-②: Java キャッシュビューアが開いたら、IUCLID5を右クリックし、現れてくるコンテキスト・メニューで「ショートcutsの作成」をクリックします。



## Note

このStart Application Managerで、ショートカットアイコンの作成の他に、インストールしたJava Applicationの削除等の処理ができます。

手順5: 作成されたデスクトップのIUCLIDアイコンからIUCLIDを起動してください。 ログイン名とパスワードはコンピュータに張り付けた付箋をご覧ください。





---

© 2008 日本化学工業協会

## ケース・スタディ

### ケース

今日の実習では次のようなケースを想定します。

日本法人JCNEWが2010年に5 t/aのEthanolを輸出を予定。あなたはその会社が指名したOnly representativeであるJCNEW EUのその担当者であり、REACHがそれについて求めている作業の実施を指示されました。

あなたの役割:

あなたの所属は: JCNEW EUです。

あなたの名前は: ディスプレイに貼ってある付箋に書いてあるとおりとします。

ドシエ(Dossier)を作成しなければなりません。

REACHがもとめる必要な書類等:

1. ドシエ(一式文書)
2. CSR, (暴露シナリオ)
3. SDS, (SDSの付属書としての暴露シナリオ)

### 物質の組成

JCNEWのEthanolの組成は次の通りであるとしてします。一部の情報を企業秘密(CBI)することとします。

【JCNEW社のEthanolの組成】

Chemical Name	CAS#	EINECS#	Typical Conc. (%)	Range of Conc.	CBI
Ethyl alcohol	64-17-5	200-578-6	90	85.4-92.0	
Water	7732-18-5	231-791-2	5.0		Y
Methyl alcohol	67-56-1	200-659-6	3.6	2-5	
Acetaldehyde	75-07-0	200-836-8	10 ppm		Y

- ・ [日本語のみ](#)
- ・ [原文付き](#)

## C. さあ始めましょう-初心者のための事例練習

### C.1. 事例実習 序

このC章のガイダンスは、IUCLID初心者ユーザーが最初に本マニュアルを細部まで読まなくても、アプリケーションをセットアップして、すぐに使用できるようにすることを目的としているが、さらに詳細を調べたい場合のために各章へのリンクも示している。このコーナーは次に示す部分よりなる：

- ・ [First steps ウィザード\(First steps wizard\)](#), これを案内として段階的に作業を実施すれば、あなたはこのアプリケーションをすぐに使えるようになる：[C.2章「IUCLID 5の起動：First steps ウィザード」参照。](#)
- ・ [自習型実習コーナー](#), これを案内として実習すれば、あなたはIUCLIDにおける情報の核心、Substance(物質)[訳注](#)のためのデータセットを取扱うのに必要な最も共通な機能が使えるようになる。このコーナーは次に示す章にさらに分かれている：
  - [C.3 Substanceのためのデータセットを作成し、参照物質の割り当てる](#)
  - [C.4 Substanceデータセットを一つ完成させる](#)
    - [C.4.1 セクション1から3のデータを入力/編集する](#)
    - [C.4.2 セクション4から13のデータを入力/編集する](#)
  - [C.5 そのSubstanceデータセットを印刷する](#)
  - [C.6 ドシエ\(Dossier\)\[訳注\]\(#\), 一式文書を作成する](#)
  - [C.7 そのSubstanceデータセットをエクスポートする](#)
  - [C.8 そのSubstanceデータセットをインポートする](#)
  - [C.9 注釈を入れる](#)
    - [C.9.1 原データに注釈を入れる](#)

- ・ C.9.2 ドシエに注釈を入れる

- C.10 ログアウトする

数多くの実例がこの実用的な実習中に出てくる。これらの例は種々の公開データセットから取り上げたものではあるが、使用されている物質の事例と必ずしも関連付けられてはいない。この点から、例はすべて架空のものと考えてもらいたい。

### Note

この実用的事例は特定のあなたの提出作業と関連が無いかもしれない。それでも、一般的なIUCLIDの機能性について慣れるためにこれらを自分で実習してみることは役に立つ場合もあるだろう。

#### 【訳注】

##### Dossier

dossierはfileと同義である。dossierはフランス語ではファイルのことである。ここでは大文字で始まっているためこの分脈では特別な意味を持っている。fileはファイルと訳すのであるから、dossierはドシエでもよいだろう。

##### Substance

IUCLIDにおいては、大文字で始まるSubstanceは、オブジェクトであり、フィーチャ(feature)である。物質のデータが入るコンテナである。この意味において物質と訳さずSubstanceとしておきたい。

- ・ [日本語のみ](#)
- ・ [原文付き](#)

## C.2. IUCLID5の開始: First steps ウィザード

コンピュータへのIUCLIDのインストール後、最初の起動時に、First steps ウィザードが起動します。First steps ウィザードは、アプリケーションのセットアップに関連するあなたの数ステップを案内してくれます。その結果あなたはそのアプリケーションをすぐに使用できるようになります。IUCLIDアプリケーションとユーザ・アカウントが管理者によってすでにセットアップされている場合この章をスキップすることができます。ユーザに関連する設定は [D.16章「ユーザ、役割、設定などの管理」](#) で詳しく述べられている機能を使用しても行うことができますが、その中のいくつかについては、SuperUser（スーパーユーザ）権限が必要になります（[D16章16.2.1.「SuperUser」と「SuperUser属性」の違い](#)参照）。

### 重要

このウィザードにより、アプリケーションを使用して作業する際にあらかじめ必要となるユーザ・アカウントを設定できる。ただし、デフォルト設定で管理者アカウントとして提供されているSuperUserアカウントでログインした時点で、これを行うことはできない。[\[参照 訳脚注1\]](#)

このウィザードを実行する前に、少なくとも自身の会社・組織についての法人[\[訳注: Legal Entity\]](#)情報が自身のコンピュータにIUCLIDエクスポートファイルの形式で保管されていることを確認すること（[詳細については、D.9章「公式のLegal entityの作成方法」を参照](#)）。

以下の情報は後の段階でもアップロードできるが、このウィザードを起動する時点で、自身のPCに以下のファイルを保管しておくことを強く推奨する:

- ・ ECインベントリ（[詳細についてはD.12章「インベントリ（ECインベントリ関連情報の表示）」参照](#)。）
- ・ 参照物質インベントリ（[詳細については、D.11章「参照物質（参照物質関連情報の作成と更新）」参照](#)。）

### Note

もしこのウィザードを手動で起動させたいときには、「SuperUser」としてログインし、FileメニューからAdministrative tools(管理ツール)、Initialise(初期化)コマンドを選択する。

最初にIUCLIDアプリケーションをセットし、毎日の作業に適したユーザアカウントを作成するためには、そして、そのインストールがうまくいったことを確認するために、次のステップを実施する:

1. デスクトップにある該当するアイコンをクリックしてIUCLIDを開始する。

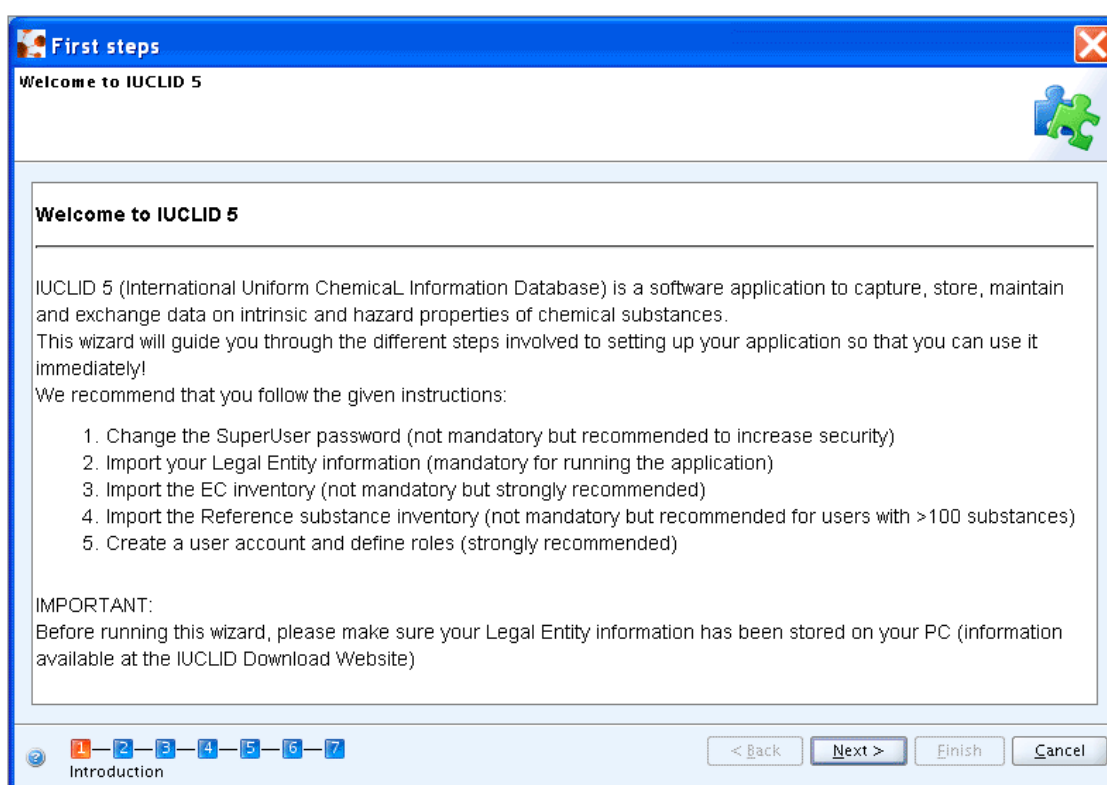


2. 初めてそのアプリケーションを開始したときには、利用できるユーザは管理者"SuperUser"だけである。管理者としてログインするために次の名前を入力する(ケース・センシティブ設定であることに注意!):

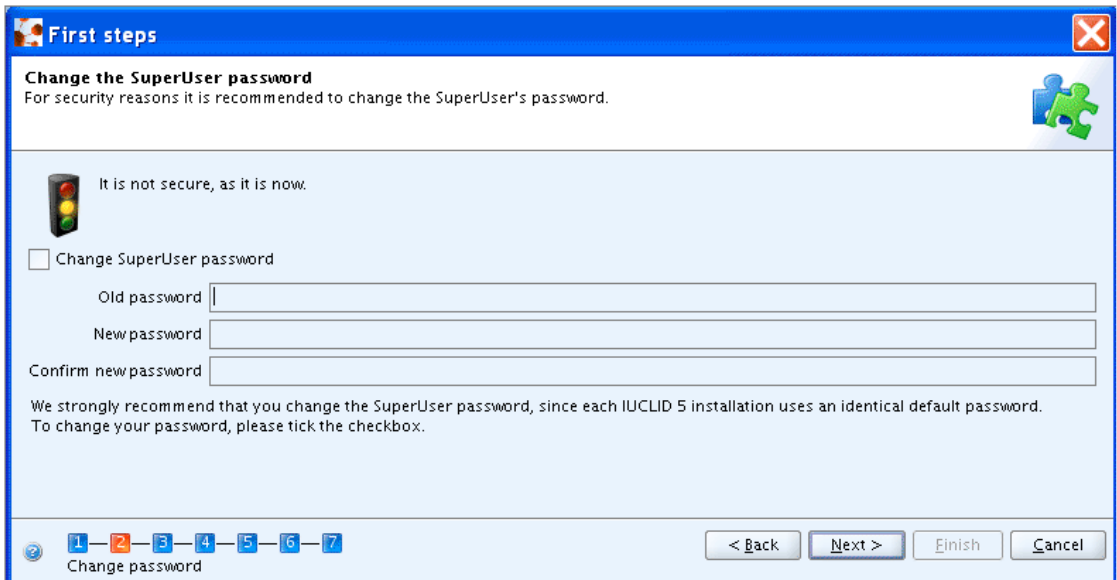
- Username(ユーザ名): SuperUser
- Password(パスワード): root



3. First stepsウィザードによって、第1ステップとして一般的な情報が示される。Nextボタンをクリックする。



4. ステップ 2: もしあなたがSuperUserのデフォルトパスワードをもっと安全なパスワードに変更していなければ、ウィザード画面内の信号機が黄色になるだろう。Change SuperUser passwordチェックボックスを選択し、古いパスワード"root"とタイプし、新しいパスワードをタイプする。Nextボタンをクリックする。



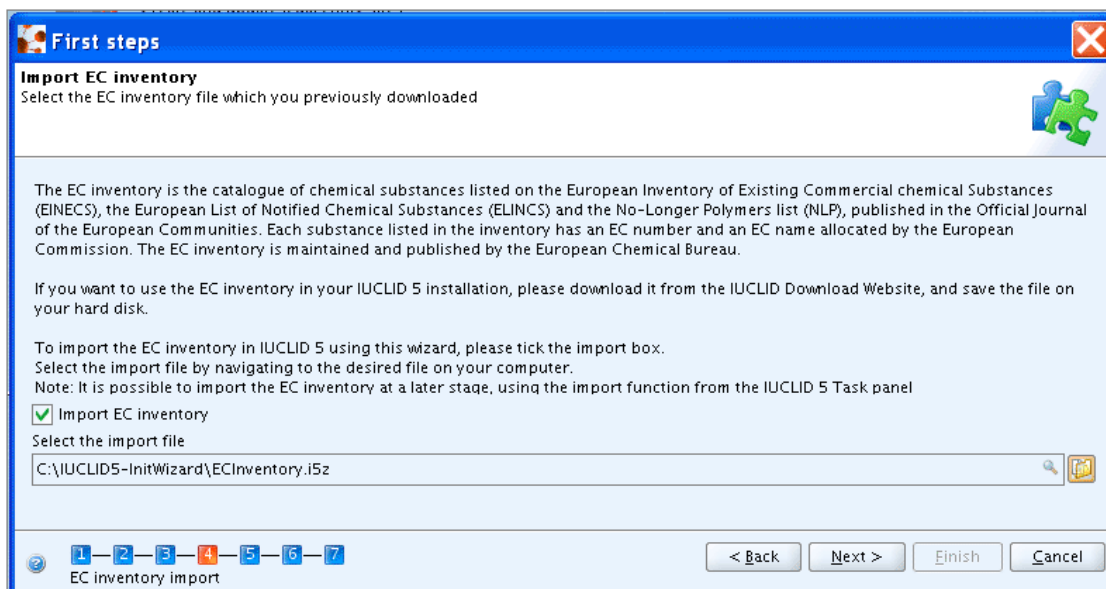
5. ステップ 3: Legal entityのインポートファイルを選択 (参照: [上にある重要欄](#))し、Nextボタンをクリックする。Legal entityはただちにインポートされるだろう。

### **Important**

注意: このウィザードをうまく実行するには少なくとも一つのLegal entityをインポートしなければならない。もしIUCLIDシステム内にLegal entityを入れていなければ、ウィザードの信号機は赤だろう。Legal entityがひとつうまくインポートされるまで、First steps wizardは自動的にIUCLIDにログインしたときに起動するだろう。



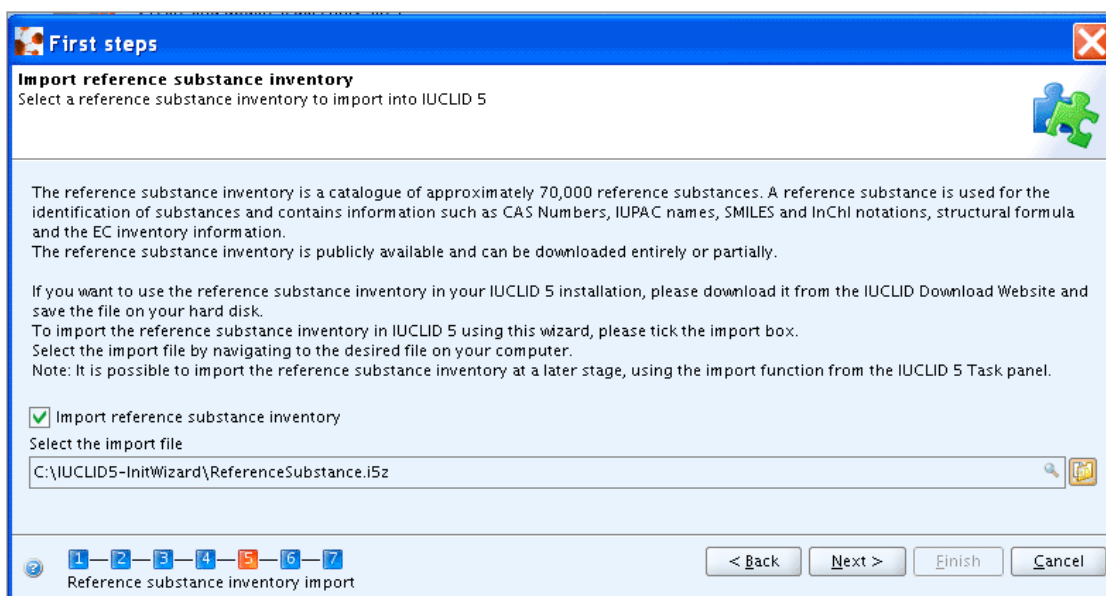
6. ステップ 4: ECインベントリに関するファイルを選択する(参照 [このページの一番上の重要欄](#))。ECインベントリはただちにインポートされない。そのインポートはFirst stepsウィザードの終了時点で開始する。コンピュータのスピードとインベントリのサイズによってこのインポートにかかる時間は変わり、30分はかかるだろう。



7. ステップ 5: Reference substance(参照物質)インベントリのファイルを選択する (参照 [このページの一番上の重要欄](#))。その参照物質インベントリは直ちにはインポートされない。インポートはECインベントリのインポートと一緒にFirst stepsウィザードの終了時点で開始する。コンピュータのスピードとインベントリのサイズによってこのバルク処理にかかる時間は変わる。参照物質インベントリそれ自身はインポートするのに数時間はかかるだろう。

### Note

もし全参照物質インベントリ(complete Reference substances inventory)をあなたのIUCLIDシステムに入れることを望まないのであれば、個々の参照物質ファイルをIUCLIDウェブサイトダウンロードして使用できる。



8. ステップ 6: 新しいユーザ・アカウントを作成し、このユーザに役割(role)を割り当てる(assign)、これによって、そのユーザのデータへのアクセス権限が定義される。SuperUserで作業をすることはサポートされていないので新しいユーザを作成する必要がある。

- Create user チェックボックスを選択する。

すべてのフィールドを入力する。ユーザには、ログイン中にユーザの特定をおこなうためにLogin name(ログイン名)が必要である。Full name(完全名)は適切なユーザの識別に使用される。



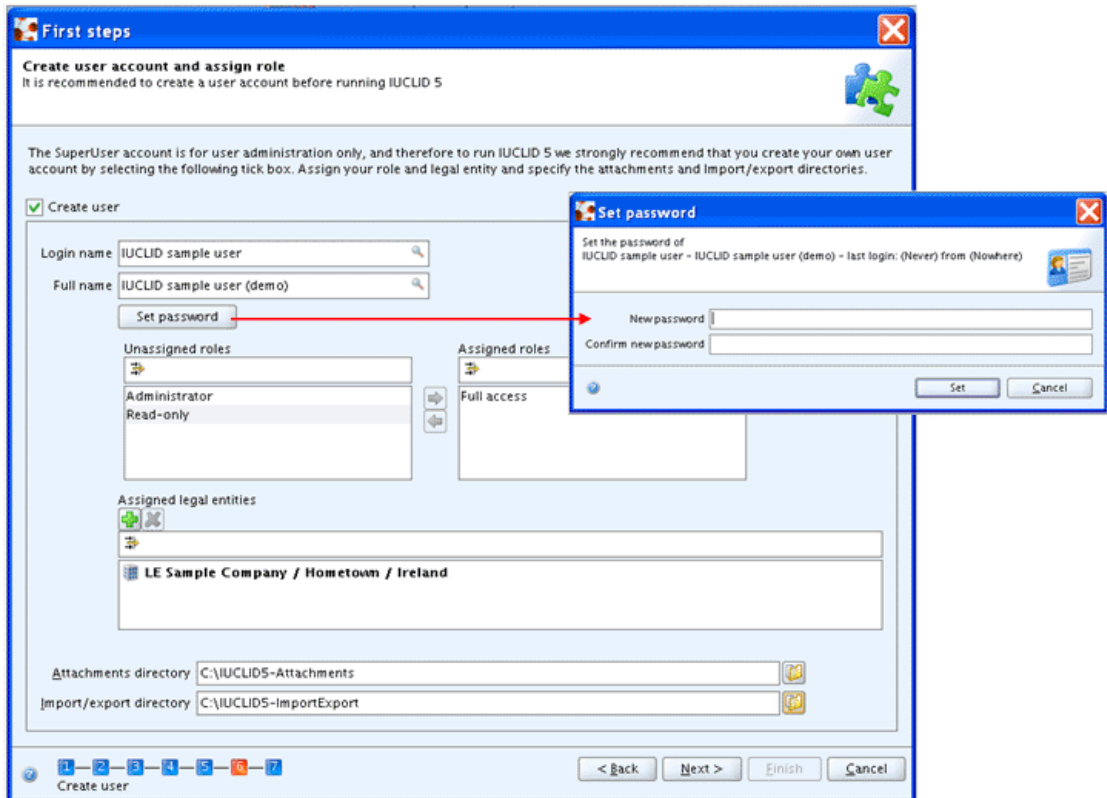
Assigned role(割り当てられた役割)はアクセス許可を管理するために必要である(インストールしたばかりのIUCLID5には"Administrator(管理者)", "Full access(フルアクセス)", と"Read-only(閲覧のみ) がデフォルトで提供される。)

- Login nameを入力(ログイン期間中にユーザ特定に使用される。) Full nameを入力(適切なユーザの特定に使用される)
- 任意で、Set passwordをクリックして、パスワードを設定する。
- 未割当の役割のリスト中の一つのロールをクリックして反転表示してRight arrow(右矢印)をクリックしてユーザにそれを割り当てる。ある役割(Role)の割当はアクセス許可を管理するために必要である(インストールしたばかりのIUCLIDでは、役割"Administrator"(管理者)、"Full access"(フルアクセス)、"Read-only"(閲覧のみ)がデフォルトでは与えられている。

### Tip

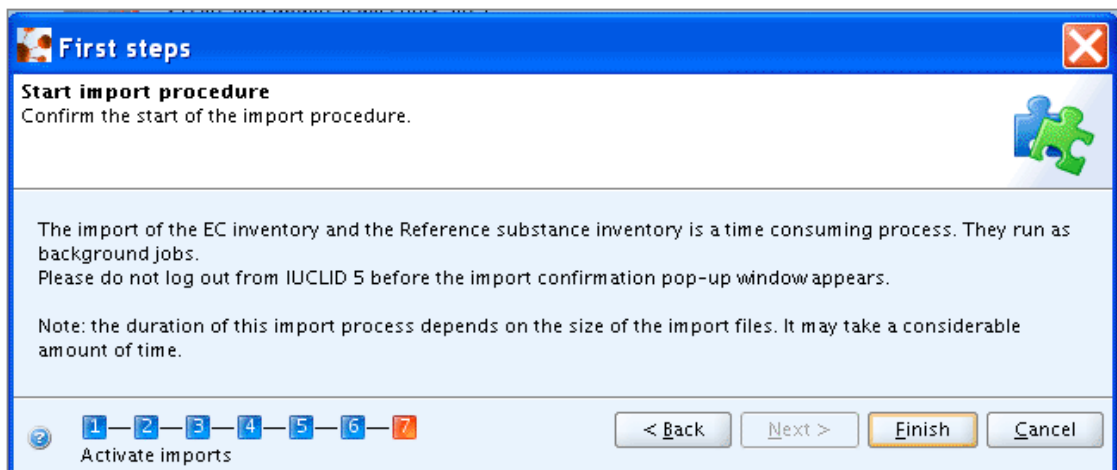
スタンドアロンバージョンとデスクトップバージョンのいずれのIUCLIDをセットアップしても"Administrator"の役割をもつユーザを一つ作っておくことを推奨する。いったん一つのユーザを作成したら、IUCLID管理者(デスクトップバージョンの場合)は異なる他のユーザを作ることができ、それらに異なる役割を割り当てることできる (参照: [D.16.1 Principles of administration tools for user settings](#))。

- 緑色のプラスボタンをクリックして、必要なLegal entityの検索を実施して、Legal entityを割り当てる (通常はこのLegal entityは、このウィザードの第3ステップでインポートされる)。Legal entity nameのQueryフィールドにおいては、必要なLegal entityの名前かアスタリスク(\*)をワイルドカードとして入力し、Searchボタンをクリックする。Query(検索)結果リスト中で必要なエントリ(項目)をクリックしてから、Assign(割り当て)ボタンをクリックする。
- 任意で添付ディレクトリとインポート/エクスポートディレクトリを選択する。これらの設定はのちの段階で作ることも可能である。これについては[D.16.5 Feature "User Preferences": How to set User Preferences](#)章に記載されている。
- Nextボタンをクリックする。



9. ステップ 7: もしウィザードの段階中にECインベントリとReference substancesインベントリ・ファイルのいずれかまたは両方を選択していた場合、ここでインポートを実行できる。 **Execute imports** ボタンをクリックする。今一度注意していただきたい。このインポートは数時間かかる。かかる時間はコンピュータのスピードとあなたがインポートするデータの量によって異なる。

では **Finish** ボタンをクリックする。もしどのインポートを起動したとしても、あなたはインポートが完了するまで待たねばならない。その後、ログアウトしてから新しく定義されたユーザとして再度ログインしなければならない(覚えてますか: SuperUserとしての作業することはサポートされていない)。



【訳注】

1.

1. この段落の英文はクリアカットな表現でない。デフォルトのSuperUserでこのウィザードを使用したらUserアカウントが作れないというような意味にも取れるが、実際は、この段落の次の段落に記載されているLegal Entityを未設定の状態(それがdefaultの状態だが)のままUserアカウントを作ろうとしたときそのアカウントがLegal Entityと結びつけることができないので(Legal entityが無いので)、アプリケーションを支障なく実行できるUserアカウントができないという意味であろう。要するに次の段落に記載した"Legal entity"のAssignを必ずやる必要があるということの警告と思われる。

ケース・センシティブ(case sensitive)

ケース・センシティブとは、アルファベットの大文字と小文字を区別して認識されてつづられるということである。ユーザ名がケース・センシティブということは、たとえば、SuperUserとSuperuserというユーザ名は区別して認識されるため、superuserとユーザ名を書いたのでは、SuperUserとしてログインできないことを意味する。

---

© 2008 日本化学工業協会

- ・ [日本語のみ](#)
- ・ [原文付き](#)

### C.3. Substanceのためのデータセット作成と参照物質割り当て(Assign)

この章のチュートリアルではSubstanceデータセットを作成して、それに参照物質を割り当てる(Assign)方法を示す。

## 序

IUCLIDにはSubstanceの特定に関する重要な要素が三つある：

- ・ **EC Inventory(ECインベントリ)**：主に欧州委員会／欧州化学品庁により中央管理し、提供されている化学物質識別子カタログである。このカタログをIUCLIDのウェブサイトからダウンロードしていたらIUCLIDの主要機能であるEC Inventory**ECインベントリ**を使ってざっと見渡すことができる。 [D.12 インベントリ\(Inventory関連情報の閲覧\)](#)参照。
- ・ **Reference Substance Inventory(参照物質インベントリ)**：ユーザのIUCLIDのインストール環境においてユーザ自身が必要に応じて管理・更新するローカル・インベントリ。 [D.11.1 参照物質インベントリ\(Reference substance inventory\)](#)参照。

### Note

ECインベントリに記載されている約70,000の参照物質がIUCLIDのウェブサイトからダウンロードできて、あなたのIUCLIDシステムにインポートできる。

- ・ [D.4 Substance \(Create and update substance related information\)](#).

**Substance(物質)データセット**：IUCLIDにおける情報の中核。これには、物質の組成を含む化学的アイデンティティ、製造と取扱い(Use)と曝露に関する情報、分類と表示に関する情報、義務付けられた入手可能なエンドポイント研究要約のすべての化学物質に関する全データが含まれる。Substanceデータセットはデータの保存場所であり、このデータを使用して、提出物質(submission substance)に関するドシエの作成を行う。 [D.4章「物質（物質関連情報の作成と更新）」](#)参照。

物質データセットが一つの化学物質について作成される時には、ある参照物質の一つに割り当てられる。その参照物質はECインベントリを基にするか、インベントリにない時には、新規に定義される。物質データセットの名前の由来となっている（提出）物質と割り当てられた参照物質との違いを、(i)単一成分物質および(ii)多成分物質の場合について、次例に基づいて簡潔に説明をします。

- ・ Diethyl peroxydicarbonate:
  - Reference substance = Diethyl peroxydicarbonate as listed in EC inventory, with the following identifiers: EC 238-707-3, CAS 14666-78-5, C6H10O6
  - Submission substance = e.g. Diethyl peroxydicarbonate, i.e. named after the Reference substance as main constituent, but includes isododecane as stabilizing agent and, hence, an additive together with impurities which need to be specified in section *1.2 Composition*. The typical concentration of diethyl peroxydicarbonate in this substance is 22% with an upper limit of 27%.
- ・ Mixture of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene:
  - Reference substance = Mixture of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene, with the following identifiers: EC 215-535-7, CAS 1330-20-7, C8H10
  - Submission substance = e.g. Mixture of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene, i.e. named after Reference substance as main constituents, but with identification of all these constituents, i.e. 1,4-dimethylbenzene (30-40%), 1,2-dimethylbenzene (25-35%), 1,3-dimethylbenzene (20-30%), and impurities (water, 5-12%).

## ワークフロー

Substanceデータセットの作成とセクション1~3の入力には以下のワークフローが含まれる：

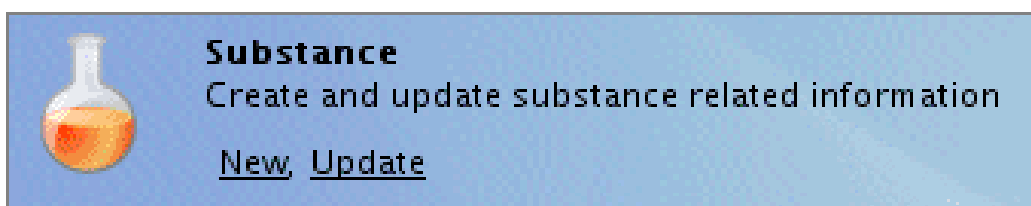
- New Substance機能(Substanceを新規に作成する機能)を起動し、Substance名とその所有者であるLegal entityを設定する。
- そのSubstanceのデータセットに参照物質を割り当てる。
- 参照物質を新規に作成した場合、該当するレコード画面に切り替えてECインベントリ内の化学物質アイデンティティをその参照物質に割り当てる；その他の識別子フィールドを入力する。
- 当該Substanceレコードに切り替えて戻る。
- 適切にセクション1,2,3を完成させる。

## ステップ・バイ・ステップ ガイド

次のステップ・バイ・ステップ・ガイドでは架空のサンプルデータを基にスクリーンショットを使って説明をします。

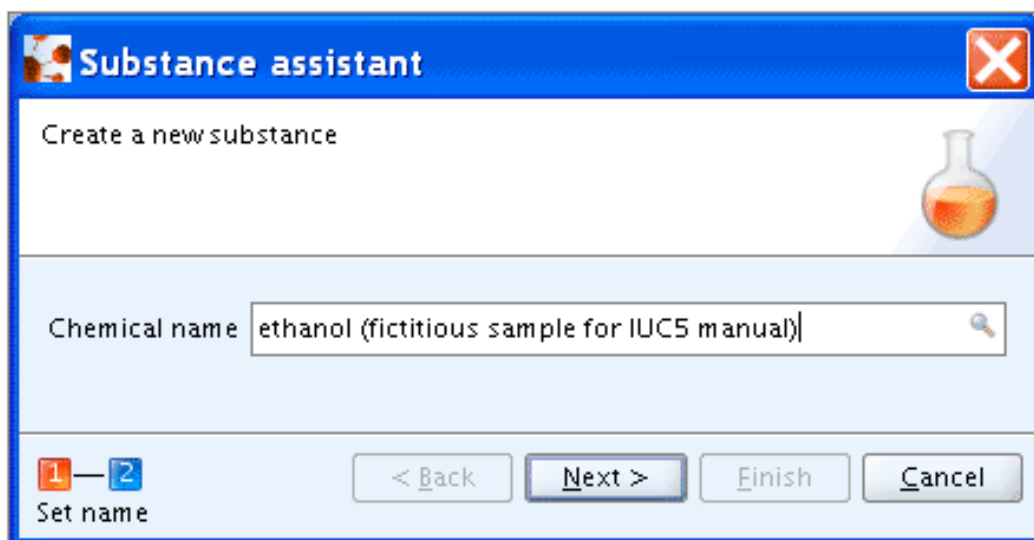
1.

**New Substance**コマンドをIUCLIDタスクパネルかメニューバー上のFileメニューから選択してください。



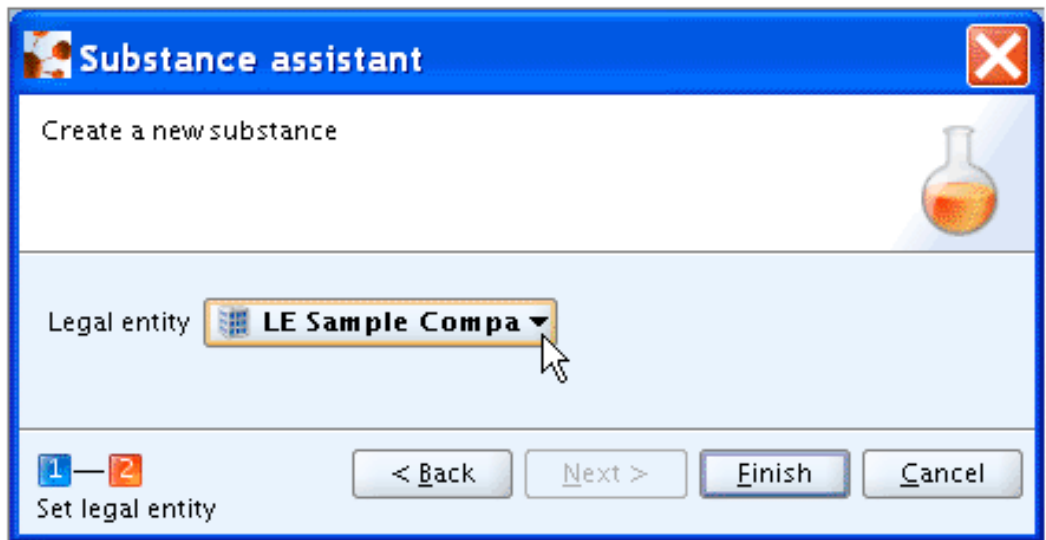
2. そのSubstanceのウィザード訳注[訳注: Substance assistantと名前がつけられている(下図参照)]が現れて、あなたが目的の処理ができるように、次のステップで導いてくれます：

そのSubstanceのユーザ定義名を入力し、**Next**ボタンをクリックしてください。

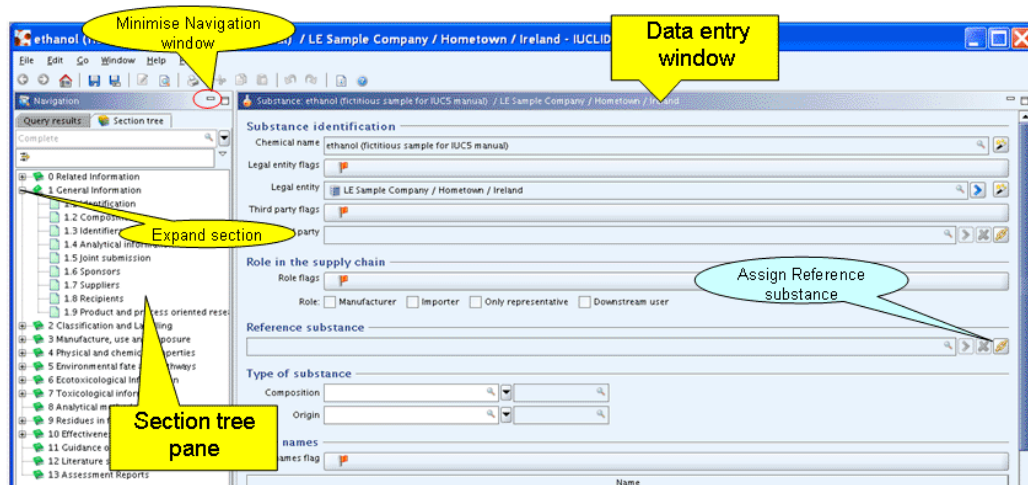



入力補助: ethanol (fictitious sample) [+あなたのユーザID]

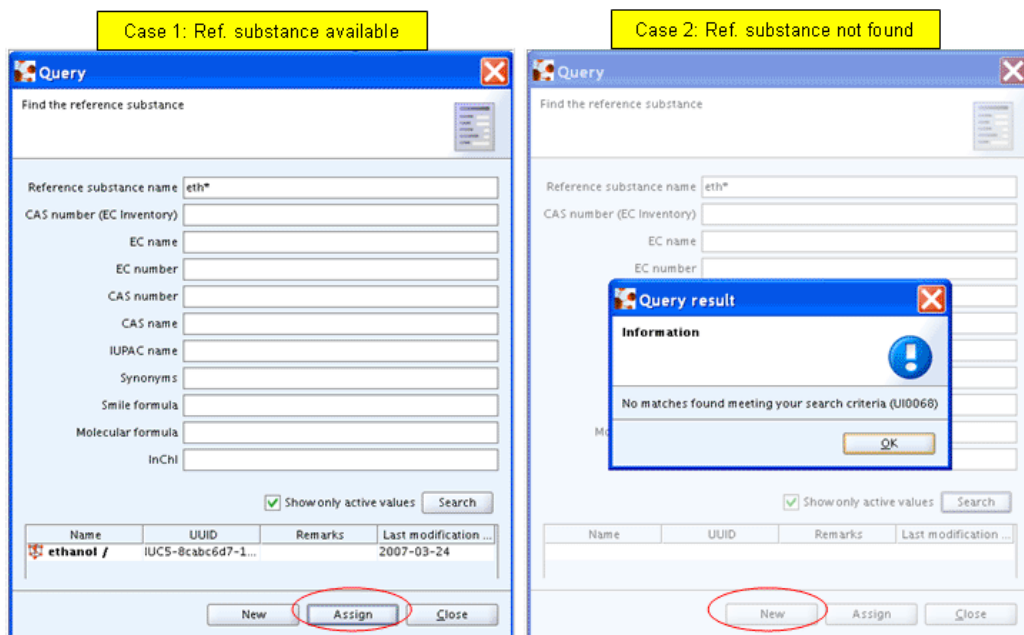
- ドロップダウンリストからLegal entityを選択して、**Finish**ボタンをクリック。（注：自身の会社用に設定したLegal entityを使用するか、まだ使えない場合は、IUCLIDのウェブサイトで作成した他のLegal entity（公式Legal entity (LEO)）を使用する。必要ならば、新しくLegal entityを後に作成して、そのデータセットに割り当てることもできる。D.9章「法人」機能：法人の作成方法参照。）




3. 新しく作成したそのSubstanceデータセットがデータ入力(Data entry)ウィンドウ内に表示され、**Query results**タブと**Section tree**タブがナビゲーション(Navigation)ウィンドウ内に現れます。小さめのモニターでは、**Minimize(最小化)**ボタン(下のスクリーンショットで赤丸を印した)をクリックしてデータ入力ウィンドウを大きくしてもよい。



4. 参照物質を割り当てるため、Reference substanceフィールド中の**Add reference**ボタンをクリック(上のスクリーンショット参照)。Queryダイアログボックスが現れるので、その中で以下の手順で従う：
- ・ ケース1: 目的の参照物質を検索する。例えば、EC nameフィールドに“ethanol”または“eth\*”を入力し、**Search**ボタンをクリックするか、Enterキーを押す。
  - ・ ケース2: 物質が見つからない場合、**New (新規)** ボタンをクリックして、適切な名前(例:“ethanol”)を入力する。入力したら、**Finish**ボタンをクリックする。(注:参照物質は対応する機能を使用して後に定義し (D.11章「参照物質-新規」機能:参照物質の作成方法」参照。)、このデータセットに割り当てることもできる。)

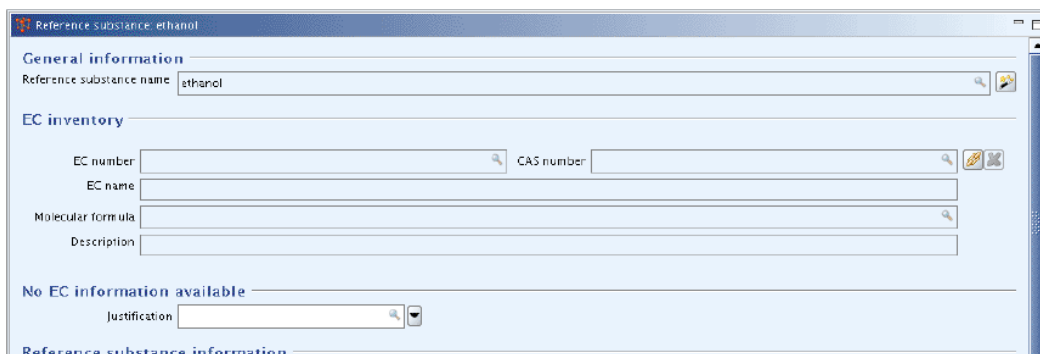




5. 新しく参照物質を作成した場合には、ECインベントリおよび他の識別子は次の手順に従って定義しなくてはならない：

- ・ 参照物質に、右端にある **Goto** ボタン  をクリックして切り替える。



- ・ 空の参照物質のレコードが現われます。



- ・ 対応するECインベントリ・アイデンティティを割り当てるために、右端にある **Add reference** ボタン  を押し、Queryダイアログボックスが現われたら、そこでその物質を探し、あれば **Assign** ボタンをクリックします。(注: データ入力がロックされている場合は、ツールバー上の **Edit** ボタン  をクリック。)

**Query** Find information in the EC inventory

EC number

EC name


CAS number

EC molecular formula

Description

State	EC number	EC name	CAS number	Molecular f...	Descriptic
★	200-578-6	ethanol	64-17-5	C2H6O	
★	200-810-6	ethambutol	74-55-5	C10H24N2...	
★	200-814-8	ethane	74-84-0	C2H6	
★	200-837-3	ethanethiol	75-08-1	C2H6S	
★	203-473-3	ethane-1,2...	107-21-1	C2H6O2	
★	207-130-9	ethacridine	442-16-0	C15H15N3O	
★	207-633-3	ethaverine	486-47-5	C24H29NO4	


Number of results: 265

- EC番号、EC名、CAS番号、分子式、あれば説明(Description)が自動的に参照物質レコードに入力される。他のフィールド(たとえば、CAS名、IUPAC名、別名(Synonym)、SMILES表記(notation))をこの時点で入力してもよい(後に入力することもできる)。
- ツールバー上のBackボタンをクリックすることで、Substanceデータセットに戻ることができて、割り当てた参照物質の識別子フィールドが表示される。

Reference substance

ethanol / Ethanol / ethanol / 64-17-5

EC number	EC name
200-578-6	ethanol
CAS number	CAS name
64-17-5	ethanol
IUPAC name	Ethanol

- これで新しく作成したSubstanceデータセットが参照物質と関連付けられたので、Go Home  ボタンをクリックしてこのデータセット閉じてもよいし、引き続き C.4 物質データセットの入力の章の説明にしたがってこのデータセットに入力してもよい。

### Tip

参照物質は後でSubstanceに割り当て(assign)てもよいのだが、次の理由からSubstanceデータセットを作成する時点で行うことを強くお勧めする： C.4 セクション4~13におけるデータの入力・編集の章で示すように、新たなエンドポイント研究レコードを作成する際には、Test material identity (試験物質アイデンティティ) フィールドは自動的に参照物質の識別子で埋めらる。しかし、参照物質を後か



ら割り当てた際には、このフィールドは自動的に更新されないので、代わりに、そのSubstanceの識別子を各レコードに手入力しなくてはならなくなってしまいます。

【訳注】

ウィザード(Wizard)

ユーザ・インターフェースの一つ。ダイアログボックスで手順に処理方法をユーザに示して特定の処理を導く。

---

© 2008 日本化学工業協会

- ・ 日本語のみ
- ・ 原文付き

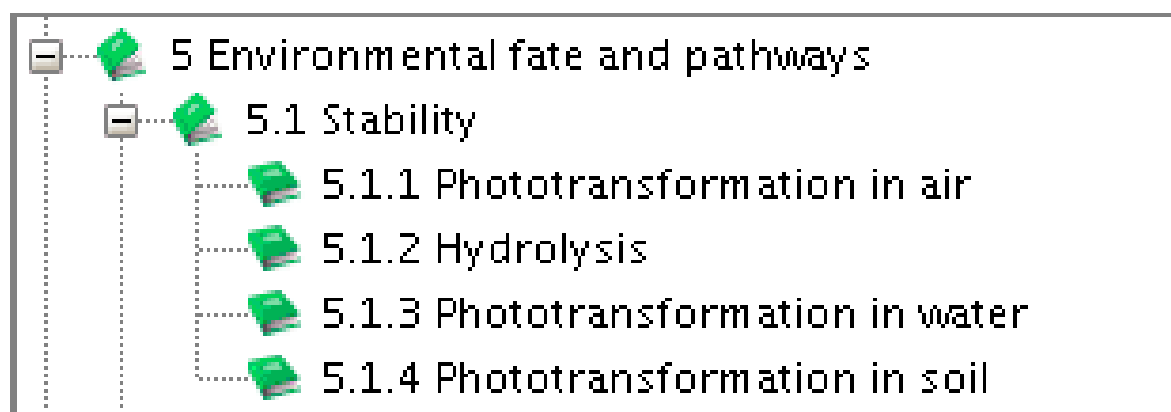
## C.4. 物質データセットの入力

この章のチュートリアルではSubstanceデータセットのセクションの入力方法を示す。次の2項目にそれぞれサンプルデータと説明を用意した：

- ・ セクション1～3のデータの入力・編集 (C.4.1章)
- ・ セクション4～13のデータの入力・編集(C.4.2章)



## イントロダクション

IUCLIDデータセットは13の主要セクションで構成されている。これらのセクションの多くはさらにサブセクションに分けられている(次のスクリーンショット例参照)。



セクション1～3とセクション4～13とでは、データ入力において、次のような顕著な違いがある：

- ・ セクション1～3：データは直接サブセクションに入力し、セクション1～3全体が物理的に1つのレコードとして管理される。追加でレコードは作成されない。
- ・ セクション4～13：データは、ユーザが作成したエンドポイント研究レコードかエンドポイント要約レコードにだけ入力できる。

ユーザーインターフェース上では、これは異なるシンボルによって区別できる：セクション1～3内のサブセクションのタイトルの前には緑色か赤色のページ・シンボル  が付いてるが、セクション4～13のレコードにはいずれも緑の丸いシンボル  が付いている。詳しくはD.4.6.1 セクション0～3とセクション4～13の違いを参照。

### Note

セクション 0 *Related Information*(関連情報)にはTemplates(テンプレート)、Categories(カテゴリ)、Mixtures(混合物)に関する特別な情報が含まれていて、初心者向けの事例実習には含まれていない。この事例実習は実用的な例によってSubstanceデータセットの最も一般的な編集の特性と機能について説明するためのものである。

## ワークフロー

Substanceデータセットを編集・入力するために、次のワークフローが適用される：

- Substanceデータセットを開く。
- セクションツリーを開いてサブセクションを表示する。
- 表示モードをカスタマイズする。すなわち、いま扱っている規制プログラムで要求されているセクションを表示する。
- 適切にセクション1,2,3を完成させる。
- 要求されていればセクション4からセクション13のエンドポイントセクションを完成させる。

---

© 2008 日本化学工業協会

- ・ 日本語のみ
- ・ 原文付き

## C.4.1. セクション1から3にデータを入力/編集する

IUCLIDのセクション1から3は一般的かつ非エンドポイントの情報からなる。次のようなタイプの情報を処理する:

- ・ セクション 1 一般的情報(*General information*): 物質に関する一般的情報には、次のような項目で表わされる化学物質のアイデンティティが含まれる: 関連する参照物質、その組成、種々のビジネス関係(スポンサー、供給者、受領者、共同提出/コンソーシアムのメンバー)、規制プログラムやその他のITシステム(たとえばIUCLID4参照)で割り当てられた識別子(たとえばREACH登録番号)、分析情報とスペクトルデータ、そして(該当する場合)製品・プロセス指向研究開発。詳細については、[E.1 Section 1: General Information](#)を参照。
- ・ セクション 2 分類と表示(*Classification and labelling*): 分類と表示情報はこのセクションに、世界的に調和した分類と表示のシステム(Globally Harmonised System for Classification and Labelling (GHS))と欧州指令(物質について67/548/EEC、調剤について1999/45/EC)とその修正と適応(化)とのいずれかまたは両方したがってこのセクションに追加する場合がある。もっと詳しい情報が、[E.2 Section 2: Classification and Labelling](#)章にある。
- ・ セクション 3 製造、使用と暴露(*Manufacture, use and exposure*): このセクションに保存される情報には次のものが含まれる: 製造方法、生産推算量、輸入と使用、製造/使用場所、商流での入手、使用と暴露シナリオ、廃棄物の生成、物質の製造または使用からの結果として生じる化学物質。さらに詳しい情報が、[E.3 Section 3: Manufacture, Use and Exposure](#)章で述べられている。

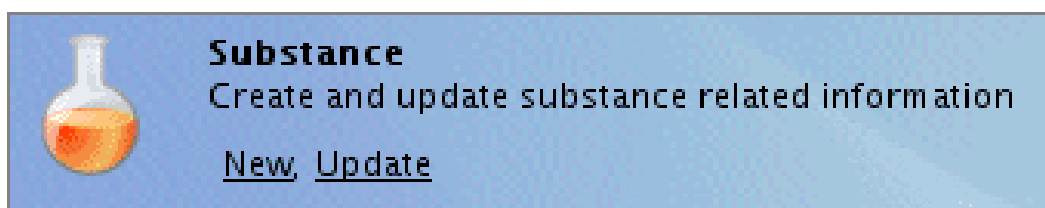
### Note

セクション0 関連情報(Related information)は実際にはデータ入力セクションではないが、他のIUCLIDの要素がデータセットと関連させる手段を提供し、任意の関連関連情報、すなわち、テンプレート(Templates)、混合物(Mixtures)、カテゴリ(Categories)を示すことができる。[B.4.2.1 General and non-endpoint information](#)。

## ステップ・バイ・ステップガイド

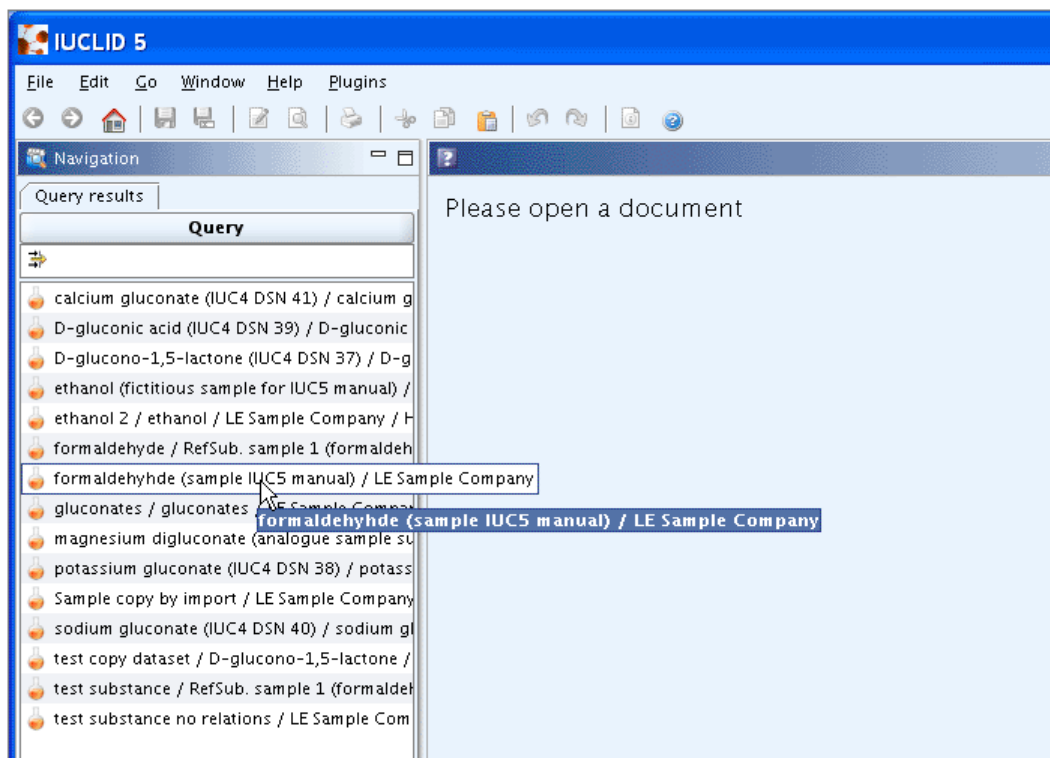
次に示すステップ・バイ・ステップガイドでは架空のサンプルデータに基づいてスクリーンショットを用いて説明している。

1. IUCLIDタスクパネルからコマンド**Update Substance** (物質の更新)を選択する。






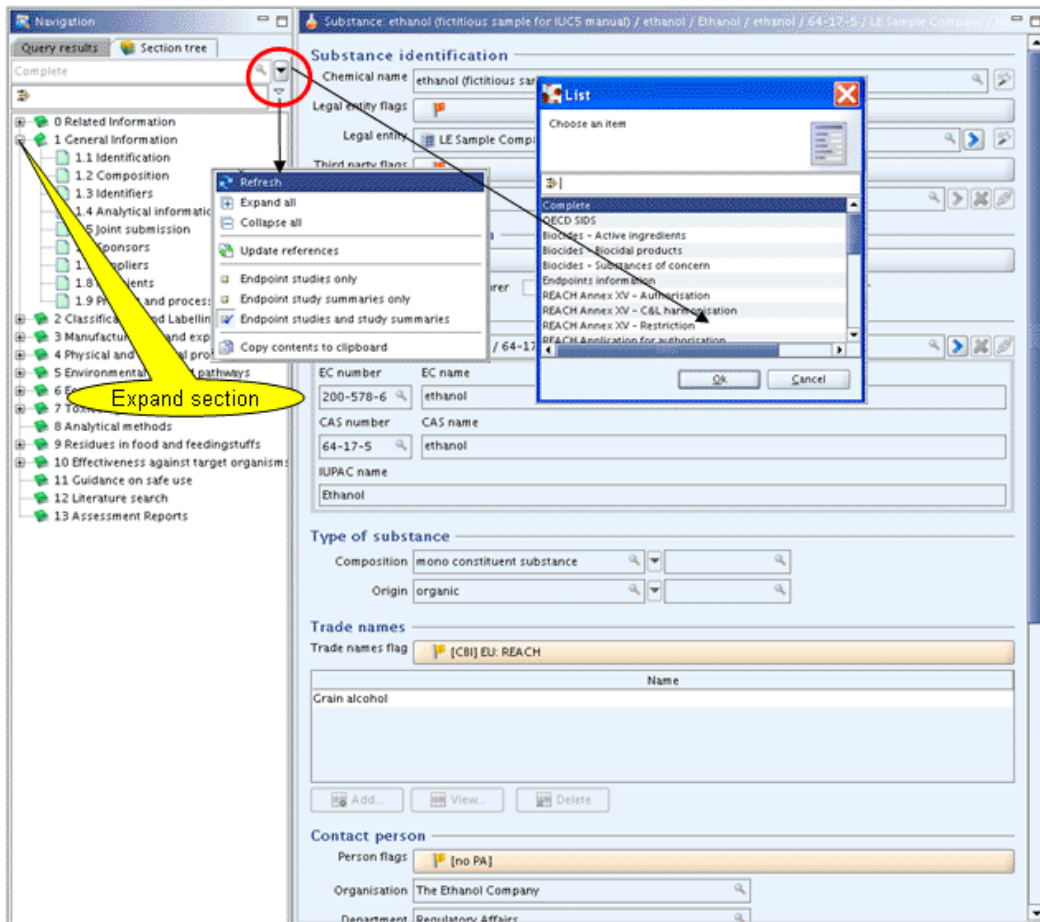
2. 現れる画面には、空のデータ(Data)入力ウィンドウが右側に**Query results**(検索結果)ペインが左側に(タイトルバー**Navigation**の下)があり、そこには、あなたのローカルへのインストール先、または、接続しているネットワークで利用可能なすべての物質が示されている。

必要なSubstance(物質)を(マウス左ボタン)ダブルクリックして、対応するデータセットを開く。もし多数の物質がリストのある場合は、次にある[D.4.3.2 Querying for a Substance in the Query results pane](#)の章に記載されている検索(query)を実施する。(注意: Substanceを右クリックすれば現れるコンテキスト・メニューからデータセットを開くことができる。)



3. Substanceデータセットを開いたとき、Navigationウィンドウに、**Query results**(検索結果)タブが、そして、2番目のタブには、**Section tree**タブが現れる。それをクリックして**Section tree** ペインに切り替えてください。次のような特徴的な機能を知っておきましょう:

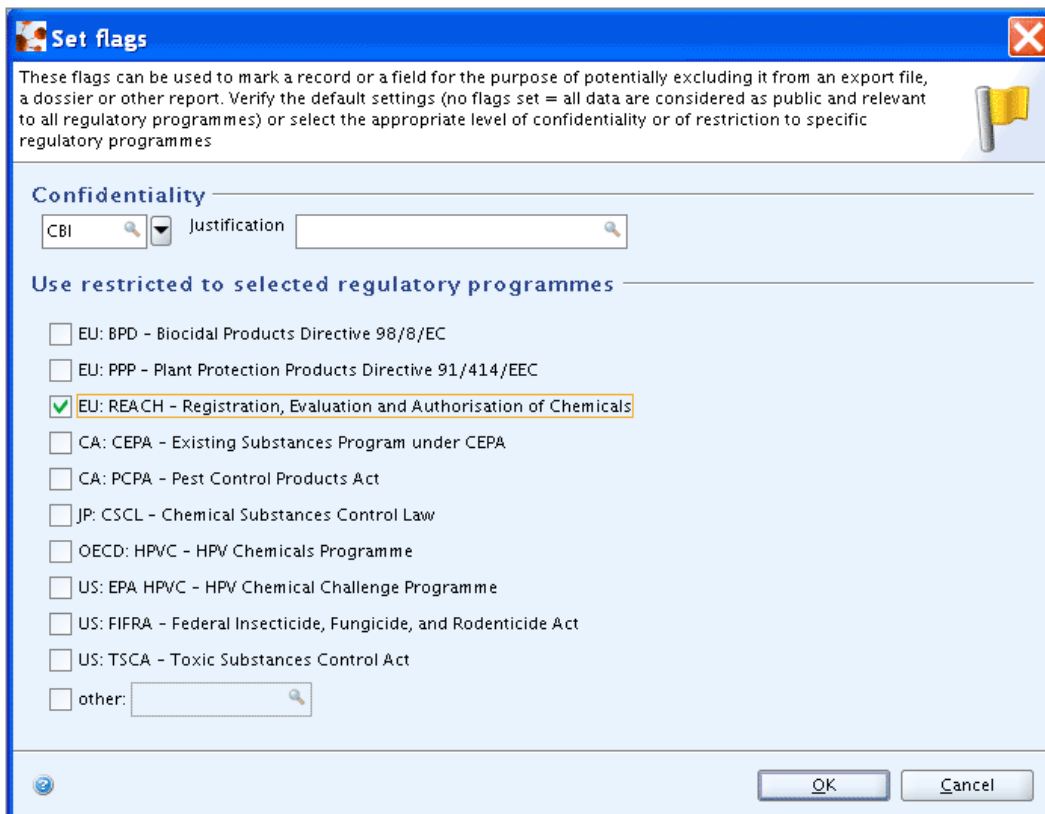
- **Section treeの展開:** いずれのセクション(例: 1 一般的情報(*General Information*))の前にもある**Plus**シンボルか Findペインの隣にある矢印 (下のスクリーンショット中の赤丸)をクリックして、ドロップダウンリストボックスから **Expand all**  を選択する。
- **View mode selector**(閲覧モード・セレクター): 閲覧モードインディケーター(view mode indicator)(Query/Section tree タブの真下にある)隣にある黒い矢印をクリックして、閲覧モードを選択するドロップダウンリストボックスを開く。デフォルトでは、閲覧モード "Complete" (全部)がセットされている。適切な別のモード(たとえば、"REACH Registration 1 - 10 tonnes, standard requirements"を選択してください。すると、section treeが変化して登録や提出に要求されるセクションの前の本のシンボル が赤色に変わります。一方オプションなセクションのシンボルのすべては緑色のままとなります。適用されないいくつかのセクション(たとえば、バイオサイド関連セクション)はtreeから消えます。



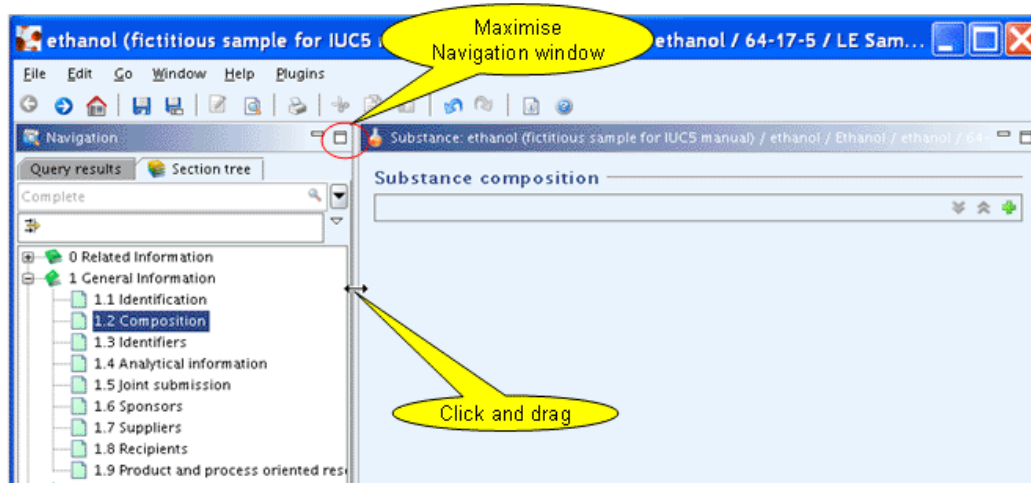
4. IUCLIDセクション 1.1 特定(Identification)では、Role in the supply chain(商流中の役割)の見出しの下のフィールド Type of substance(物質のタイプ)、Trade name(商号)、Contact person(接触窓口)を、上のスクリーンショットで説明されているように、埋めてください。

### Tip


IUCLIDのすべてのセクションで、フラッグダイアログボックスが提供されており、特定のパートに関連して(たとえば、上のスクリーンショット中のTrade names flag(商号フラッグ)、Person flag(人のフラッグ)、あるいは、レコード全体に対してフラッグダイアログボックスが提供されている。これらのダイアログボックスは常に同じデザインで、Confidentiality flagとRegulatory purpose flagsの両方を含んでおり、エクスポート、印刷、あるいは、書類作成のような次の操作でのフラッグを付けたデータふるい分けのために使用できる。たとえば、Trade names flagの"CBI"(企業秘密情報)と"EU: REACH"フラッグを立ててみよう。



5. Section treeペイン中の対応するセクションタイトルをダブルクリックすることによって1.2 Compositionのセクションへ移動してください。(必要であれば、Navigationバーの上のMaximiseボタンをクリックするかNavigationとデータ入力ウィンドウの境界線上に直接マウスを置き、ポインターが両頭の矢印に変わるまで、保持してから、それからそのラインを右左にクリックしドラッグしてください。)



6. セクション1.2 Composition(組成)では、反復ブロック内のフィールドを埋めなさい、そこでは物質の複数の組成を指定できます(たとえば異なった不純物・プロフィールを持つ複数の物質が必要な時)：

- ・ Add シンボル  をクリックしてブロックをSubstance compositionを展開しなさい。
- ・ あなたがこの成分(あるいは成分のプロファイル)に割り当てたい名前を入力しなさい、そして、その物質の典型的な純度を記載しなさい。
- ・ もし必要とされるなら、純度(degree of purity)に関連したConfidentialityとRegulatory purposeのフラッグの両方あるいはいずれかをたてなさい。(次のスクリーンショットを参照)。

- ・ [日本語のみ](#)
- ・ [原文付き](#)

## C.4.2. セクション4から13にデータを入力/編集する

### はじめに

IUCLIDのセクション4から11は「エンドポイントセクション」とも呼ばれています。この文脈においては、エンドポイントは物質の物理化学的性質、環境運命や動態、環境毒性情報、毒物学的情報、特異的信息(たとえば食品や飼料中の残存物)に関するの情報要件あるいはデータポイントを意味しています。その意味しているところは扱おうとしている規制プログラム、たとえば、EU REACH 付属書VIからXIIに設定されている標準情報要件によって変わります。

一つのIUCLIDエンドポイントセクションは「エンドポイント研究」データを保存するためのコンテナを提供しています。たとえば、蒸気圧に関する研究はセクション4.6 Vapour pressure **4.6 蒸気圧**に入力し、経口反復投与毒性研究はセクション7.5.1 Repeated dose toxicity: oral **7.5.1 反復投与毒性: 経口**に入力します。「研究」という言葉はかなり総称的な意味を持っていて、それは実験的な研究を指すばかりでなく、(Q)SAR、読み込み法(read-across)、証拠評価の重みづけ、データ回避(waiving)、あるいは、扱っている情報要件に関するその他あらゆるタイプの情報を指しています。これについての詳しい情報は、[B.4.2.2 Summaries of study reports and other information](#)章で述べられています。

IUCLID中のエンドポイント関連情報の収集は完全研究報告書の記述を要約することが基礎となります。これらの研究要約は非常に簡単に記述することも、非常に詳しく記述することも可能です。しかしながら、研究要約は研究の適切さ(relevance)を評価するのに十分な情報を提供するものでなければなりません。非常に詳しく記述された研究要約は、それがすべての適切な研究項目を処理している場合は、「ロバスト研究要約」とも呼ばれています。(参照 [B.4.2.2.3.1 Definition of key studies, supporting studies, robust study summaries](#))。

IUCLIDでは、研究要約はエンドポイント研究レコード(オブジェクト)を使用して処理されます。そのレコード(オブジェクト)は事前に定義されたフィールドとユーザが研究を要約するのを支援するフリーテキストのプロンプトとをもつテンプレートです。(参照 [D.4.7.1 What is an Endpoint study record?](#)). セクション4から10の各エンドポイント研究レコードは次の4つの主要パートで構成されています：

- ・ 管理データ(Administrative data)
- ・ データの出典(Data source)
- ・ 材料と方法(Material and methods)
- ・ 結果と考察(Results and discussion)
- ・ 総括的要約、添付(Overall remarks, attachments)
- ・ 申請者による要約と結論(Applicant's summary and conclusions)

これらの見出しの下には、エンドポイント独自の入力フィールドとともに、すべてのエンドポイント研究レコードに共通のフィールドが含まれています。フィールドの多くはロバスト研究要約にのみ関係しているため、IUCLIDには詳細レベルのシステムが実装されていて、これによって基本的なフィールドのみを表示するか、全フィールドを表示するかの選択が可能になります。(参照 [D.4.7.6 Switching between display type "basic fields" \(detail level 1\) and "all fields" \(detail level 2\)](#))。

IUCLIDエンドポイント研究レコードのほとんどすべてはいわゆるOECD調和テンプレートに基づいてモデル化されています。OECD調和テンプレートはどんなタイプの化学品(たとえば、殺虫剤、殺生物剤、工業化学品)に関連するエンドポイント研究要約のための標準書式にもなります。(参照 [D.4.7.1 What is an Endpoint study record?](#)章)。

IUCLIDには研究がどの程度に要約されて記載すべきか記載されていません。提供されているフィールドが最大限の詳細さであると考えべきでしょう。古い情報源の研究レポートや文献では、フィールドの多くに要求される、ロバスト研究レ



ベルの詳細さを提供していないことがしばしばあります。一方、極最近に実施された研究とこれから行われる研究ではどれも非常に詳細に要約されている場合があります。どの程度詳細に研究が要約される必要があるかは、それぞれの化学品プログラムに関する適切な手引きを参照してください。OECDの高生産量化学品プログラム、EUリスクアセスメント、その他の目的のために作成された既存のIUCLID4データセットにおいては、IUCLID5の新しいフォーマットに合わせるための不必要な追加的な仕事を避けるような実用的な手法が考えられるべきでしょう。


## Note

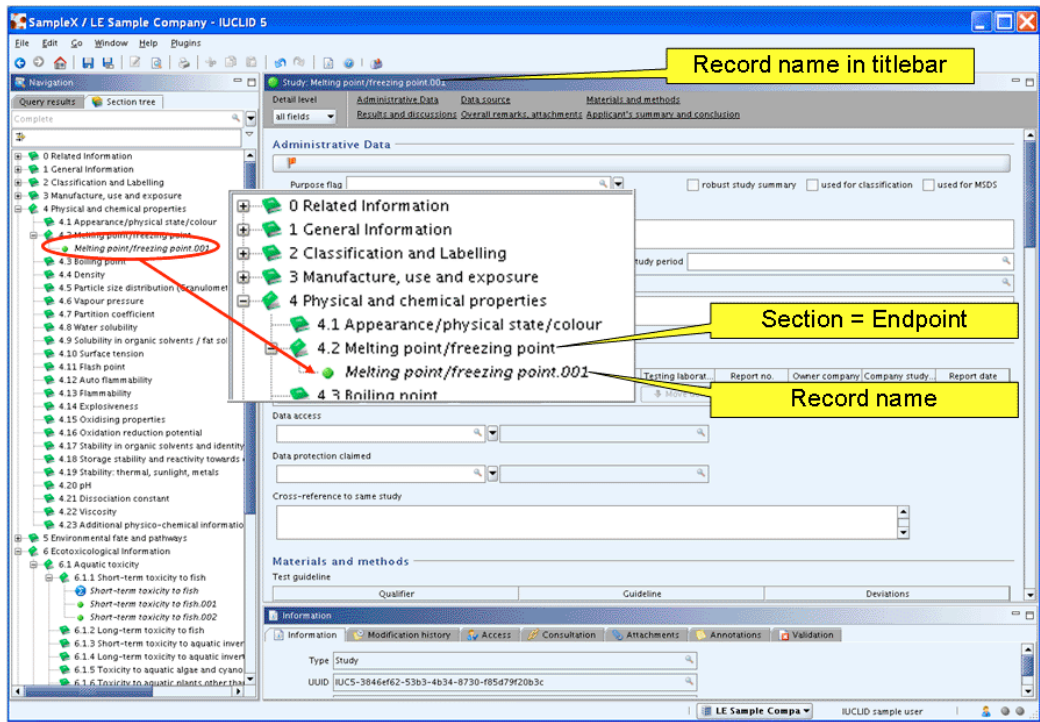
セクション 11 *Guidance on safe use* **11 安全な使用に関する手引き**, 12 *Literature search* **12 文献検索**, 13 *Assessment Reports* **13 アセスメント報告書**はエンドポイント研究要約のためには使用されませんが、エンドポイントの情報に関連はしている。

## ステップ・バイ・ステップ手引き

次に記載するステップ・バイ・ステップの手引は架空のサンプルデータに基づいて、スクリーンショットを用いて説明しています。

## エンドポイント研究レコードの作成

1. [C.4.1 Entering/editing data in sections 1 to 3](#)にしたがって表示されているSubstanceデータセットを開いてください。
2. 閲覧モードが"REACH Registration 1 - 10 tonnes, standard requirements"が選択されていることを確認してください(参照 [C.4.1 Entering/editing data in sections 1 to 3](#)章)。
3. セクション4 *Physical and chemical properties* **4. 物理的・化学的性質**の前にあるプラスシンボルをクリックして、要約されているすべてのセクションを表示してください。
4. セクション4.2 *Melting point/freezing point* **4.2 融点/凝固点**を右クリックし、表示されるメニューから、**New Endpoint study record**(新エンドポイントレコードを作成)コマンドをクリックしてください。
5. 緑色の丸印  で示された新しいレコードが現れます。デフォルトのレコード名が作成され、セクション・ツリー・ペインとレコードタイトル・バーの両方に表示されます。このレコード名はセクションタイトルに続いてドットと連続番号で構成されています。たとえば、次のスクリーンショットで示されているように"Melting point/freezing point.001"などとなります。



## エンドポイント研究レコードの名前の変更

1. セクション・ツリー・ペインのレコードを選択し、F2キーを押すか、レコードで右クリックして表示されるメニューからRenameコマンドを選択します。
2. 適切にレコード名を編集し、OKをクリックします。入力補助: Hommel (1987)/key.001

### Tip


そのレコードの値の概要を手早く示す情報で、デフォルトのレコード名に追加的情報を加えるか、あるいは、レコード名を置き換えてしまう役に立つでしょう。例: "Hommel (1987)/key.001" (著者と年と主要研究をレコードが含んでいることを示す) (詳細については、[D.4.7.3 Renaming an Endpoint Study Record](#) 章に記載がある。)

## セクション4.2 融点/凝固点のためのハンドブックデータの入力

ここで使用する事例には(限定的な)ハンドブックデータの項目が含まれています。ここでは、そのデータは信頼されるデータであり、それゆえに主要研究として使用できることを仮定します。(注意: どのハンドブックデータを物理化学的性質に対するエンドポイントデータをカバーしているか受け入れられているかは適切な規制プログラムの手引きを参照してください。)

1. ここでセクション4.2 Melting point/freezing point **4.2 融点/凝固点**で新しく作成されたレコードが開いていてデータ入力ウィンドウが表示されているはずですが、もしそうでないなら、セクションツリー中の該当レコードをダブルクリックしてください。

### Tip

新しく作成されたレコードは自動的に編集モードになります。レコードを再度開いた時には、ツールバー上のEditボタン  をクリックする必要があります。

2. "Administrative Data"(管理データ)パート: 次のスクリーンショットに示されている内容に従って、適切なフィールドを入力してください:

入力補助: Handbook data are considered to be from a trusted source

3. "Data Source"(データ出典)パート: Reference参照ブロックで、Addボタンをクリックして、開いたダイアログボックスで、Reference type(参照タイプ)を選択し、次のスクリーンショットに記載内容に従って、参照情報の書誌情報を入力してください。このパートの他のフィールドは適用できない(not applicable)フィールドです。

入力補助: review article or handbook

Hommel G

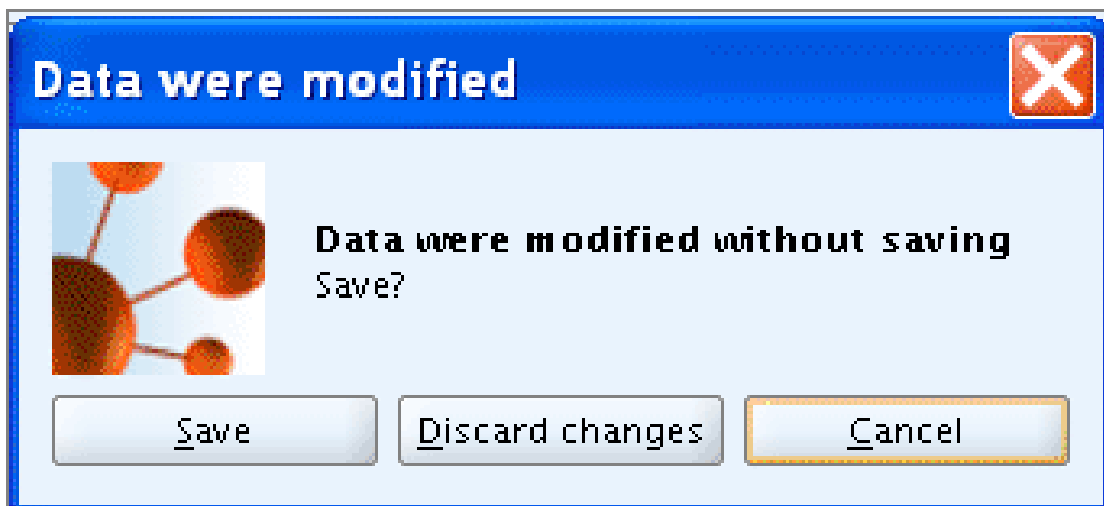
1987

Handbook of dangerous goods (Explanatory leaflet 125)


Berlin, Heidelberg, New York, Springer-Verlag (in German)

4. "Materials and methods"(材料と方法)パート: この事例で入力できるフィールドはGLP complianceGLP準拠フィールドだけです。
5. "Results and discussions"(結果と考察)パート: Melting / freezing point融点/凝固点フィールドブロックで、Add(追加)ボタンをクリックして開くダイアログボックスで融点を摂氏で入力してください。もし、必要があれば、この手順を繰り返してケルビンで対応する値を入力してください。

6. もう一つ続けてエンドポイント研究レコードを作成しようとすると、ダイアログボックスがその修正データを保存するか尋ねてきます。Save(保存)ボタンをクリックして確認をしてください。



## 重要

IUCLIDを継続して、長時間(すなわち2時間以上)使わない場合は、ツールバー上のSave  (保存) ボタンをクリックして確実に入力データを保存するようにしてください。そうしないとセッション・タイムアウトが起こって、そのためにIUCLIDを失速するかもしれません。

### セクション6.1.1 短期魚毒性 研究の基礎的データの入力

この事例では、エンドポイント研究レコードにある研究の基礎的データを入力することが含まれています。ここではある出版物からの限られた情報が入手可能で、研究レポートの要旨(executive summary)は得られているが、研究レポートそのものはまだ入手されていないもの仮定しています。この事例では、**詳細レベル(Detail level)の切替**、**基礎的フィールドのみの使用方法**、**オンラインヘルプの起動の仕方**、**選択肢を包括的に含むドロップダウンリストの取扱い**、**フリーテキストテンプレートの使用**、**アンドゥ(Undo やり直し)機能**について実地に説明することを目的としています。



1. 6.1.1 Short-term toxicity to fish **6.1.1 短期魚毒性** セクション内での新しいエンドポイント研究レコードの作成
2. レコードの名前を"Dorgerloh (1992)"に変更してください。
3. レコード・タイトル・バーの下の **Detail level(詳細レベル)** ボタンをクリックして、現れるメニューから、"basic fields"(基礎的フィールド)を選択してください。

## Note

D.4.7.1 What is an Endpoint study record?に記載されているように、IUCLIDではbasic fields(基礎的フィールド)のみか、すべてのフィールド(基礎的フィールド+追加フィールド)のいずれかを表示させるようになっていて、追加フィールドは通常はロバスト研究要約にのみ関連しており、そのフィールド・ラベルはいずれも青色に設定されています。それに対して、基礎的データのフィールドラベルはすべて黒色です。

4. "Administrative Data"(管理データ)パート: Study result type **研究結果タイプ** フィールドで、"experimental study" (実験研究)を選択してください。Study period **研究時期** フィールドに、"1991"を出版が行われたと思われる年として入力してください。そのほかのフィールドはさしあたりは空にしておきます。

5. "Data Source"(データ出典)パート :

- Reference参照フィールドブロックで、スクリーンショットに示されている2つの参照（文献情報）を入力してください：
  - いずれかフィールドからオンラインのコンテキスト・ヘルプを起動してください。そうするにはF1キーを押すか、ツールバー上のHelpボタンを押します。
  - ヘルプ・ウィンドウのサイズを適切にカスタマイズしてください(もしフィールドについてのオンラインヘルプをしばしば見る必要があるのであれば、ヘルプウィンドとIUCLID画面の両者を切り替えて行ったり来たりしなくても見えるように位置を調整するとよいかもしれない。しかしながら、各フィールドに対するコンテキスト・ヘルプはF1キーを押すか、Helpボタンを押すかして明示的に呼び出さなければならない。)
  - 適切に書誌事項データを入力してください。
- フィールドData accessデータ出典で、"data published"(公表データ)を選択してください。

**入力補助:**

publication; Dogerloh M, Miller EM & Murphy L; 1994; Acute toxicity of sampleX to rainbowtrout; J. Aqu. Toxicol. 12:234-237

study report; Dogerloh M; 1992; SampleX - Acute toxicity (96 hours) to rainbowtrout (Oncorhynchus mykiss) in a semi-static test; ; Organic Ltd.; 99999-9; 1992-05-12

6. "Materials and methods"(材料と方法)パート :

- データ出展に記載されているガイドラインを入力してください: Qualifier限定詞フィールドで"according to" (に準拠)を選択してください。使用したガイドラインはピクリストにリストアップされていないので、Guidelineガイドラインフィールドで"other guideline"(その他のガイドライン)を選択し、関連テキストフィールド(associated text field)で"DIN 38412 L15"と入力してください。

- ・このガイドラインがOECDガイドライン203と同等であることを記載してください: この手順を繰返し、下のスクリーンショットの記載に従って、適切な項目をピックアップから選択してください。
- ・GLP compliance **GLP 準拠** フィールドで"yes"を選択してください。

**Materials and methods**

Test guideline

Qualifier	Guideline	Deviations
according to	other guideline: DIN 38412 L15	
equivalent or similar to	OECD Guideline 203 (Fish, Acute Toxicity Test)	

Principles of method if other than guideline

GLP compliance

yes

#### 入力補助:

according to; other guideline: DIN 38412 L15


equivalent or similar to: OECD Guideline 203 (Fish, Acute Toxicity Test)

#### 7. "Test materials"(試験材料)パート:

- ・試験材料の特定に関連しているフィールドはSubstanceデータセットを割り当させた参照物質に基づいて自動的に埋められます。(参照C.3 Creating a dataset for a Substance and assigning a Reference substance章). どんな識別子でも入力できます。

#### Note

もしその研究が申請物質(すなわち参照物質によって特定されている物質)とは別の物質で実施されている場合や読込(read-across)として使用されている場合は、これらのフィールドはそれに応じて更新されなければならないでしょう。

- ・Details on test material **試験材料の詳細** フィールド: フィールドラベルの下のパズルのようなアイコン  をクリックしてください。開いたフリーテキスト・テンプレート・ダイアログボックスで、項目"- Analytical purity:"のみを残し、その他の項目は削除するようにして、フリーテキスト・テンプレートを編集してください。下のスクリーンショットに示すように記載してください。
- ・Analytical monitoring **分析のモニタリング** フィールドに"yes"と、Vehicle **ビヒクル** フィールドに"no"と入力してください。

**Test materials**



Test material equivalent to submission substance identity

yes

Test material identity

Identifier	Identity
CAS number	64-17-5
EC number	200-578-6
IUPAC name	Ethanol

Details on test material

- Analytical purity: 97.2%

Analytical monitoring

yes

Vehicle


no

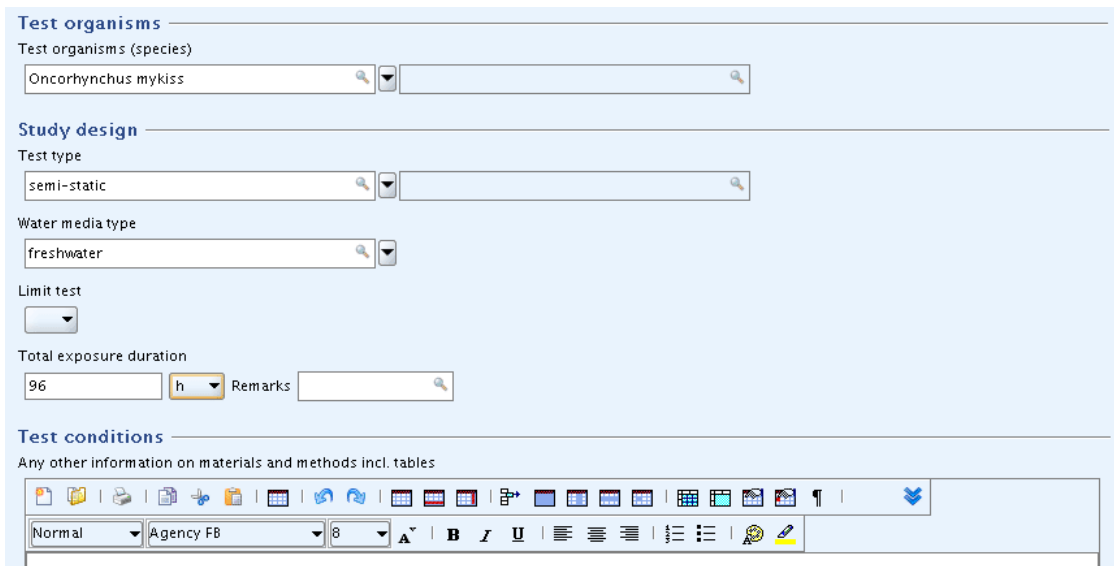
#### 8. "Test organisms"(試験生物)パート、 "Study design"(研究デザイン)パート、 "Test conditions"(試験条件)パート: 下のスク

リーンショットに示されているように基礎的データを入力してください。

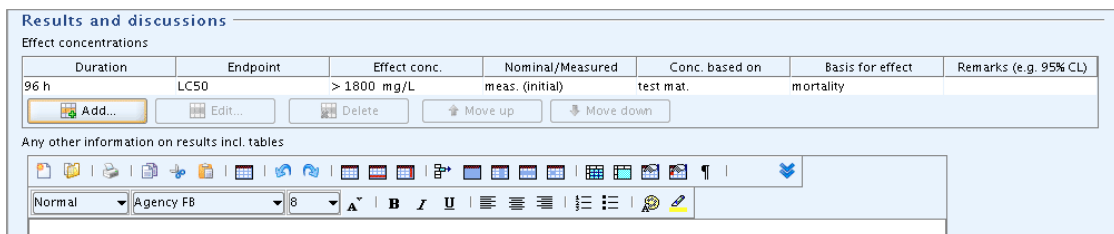
## Tip

ドロップダウン・コンボ・ボックスで提供されている包括的ピックリストの場合、次に記載の方法のいずれかを使用して望む項目を見つけ出すことができます：

- ・ ドロップダウンの矢印をクリックして開くピックリストから、クリックしてFindペイン  に入り、項目の必要十分な部分を入力してください。たとえば、"my"と入力すると直ちにこの文字列を含むすべての項目、たとえば、"Onchorhynchus mykiss"が見つかります。必ずしもワイルドカード(\*)を使用する必要もありません。この迅速な検索(query)はケース・センシティブではありません。
- ・ そのリストのフィールドに、あなたの選択項目を直接入力し始めてください。IUCLIDの自動入力機能(autofill function)によって、あなたが入力した文字で始まる、リスト中の最初の項目が表示されます。たとえば、"O"または"o"と入力すると、"Onchorhynchus gorboscha"が得られるでしょう。そのあとドロップダウンの矢印をクリックすると、その文字(列)で始まるリストの最初の項目が直接表示され、あなたが欲しい項目(例："Onchorhynchus mykiss")をすばやく得ることができます。



9. "Results and discussions"(結果と考察)パート：Effect concentrations **影響濃度** フィールド・ブロックで、Add ボタンをクリックして開くダイアログで、次のスクリーンショットに示されているLD50値とパラメータを入力してください：



10. "Overall remarks, attachments"(総括的要約、添付)パート：この事例の研究では追加するものではありません。
11. "Applicant's summary and conclusion"(申請者による要約と結論)：Validity criteria fulfilled **妥当性の基準が満たされているか**、"yes"を選択し関連するテキスト・フィールドに簡単な説明を追加してください。

## Tip

印刷出力では、リストフィールドに関連する補足的テキストフィールドは区切り文字(デリミタ)で分けられていません。これはテキストの組み合わせで混乱を起すかもしれません



ん。そのため補足的テキストは括弧で括ってリスト項目とそれを分けておくことを推奨します。もしピックアップリストの項目が"other:"のような形でコロンで終わっている場合には必要ありません。

Applicant's summary and conclusion

Validity criteria fulfilled

yes (Criteria of OECD 203: Mortality of controls <1)


Conclusions

Executive summary

Normal Agency F8 8 A B I U

入力補助:

(Criteria of OECD 203: Mortality of controls <1)

12. **Undo(アンドウ、やり直し)機能:** Validity criteria fulfilled 妥当性の基準が満たされているかのフィールドの項目を、空白の項目を選択することによって、削除してください。ツールバー上のUndoボタンをクリックしてください。前に選択したピックアップリスト項目が再表示されますが、関連テキストフィールドは再表示されません。

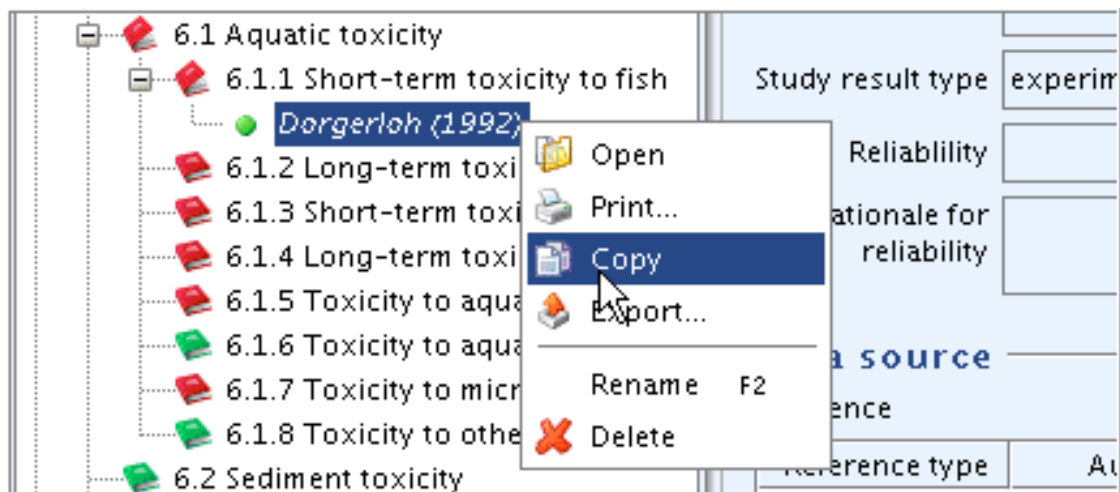
### Note

Undoコマンドを使えば、直近の編集操作をやり直す(Undo)することができますが、上の例で示されたように、これには2,3の例外があります。

## エンドポイント研究レコード


使用する事例：Copy(コピー)機能を実習するために上で使用した事例で作成したエンドポイント研究レコードを拡張してロバスト研究要約を作成するケースを想定します。ただし、最初のドラフトのレコードは保存されているものとします。次の手順にしたがって作業を実施してください：

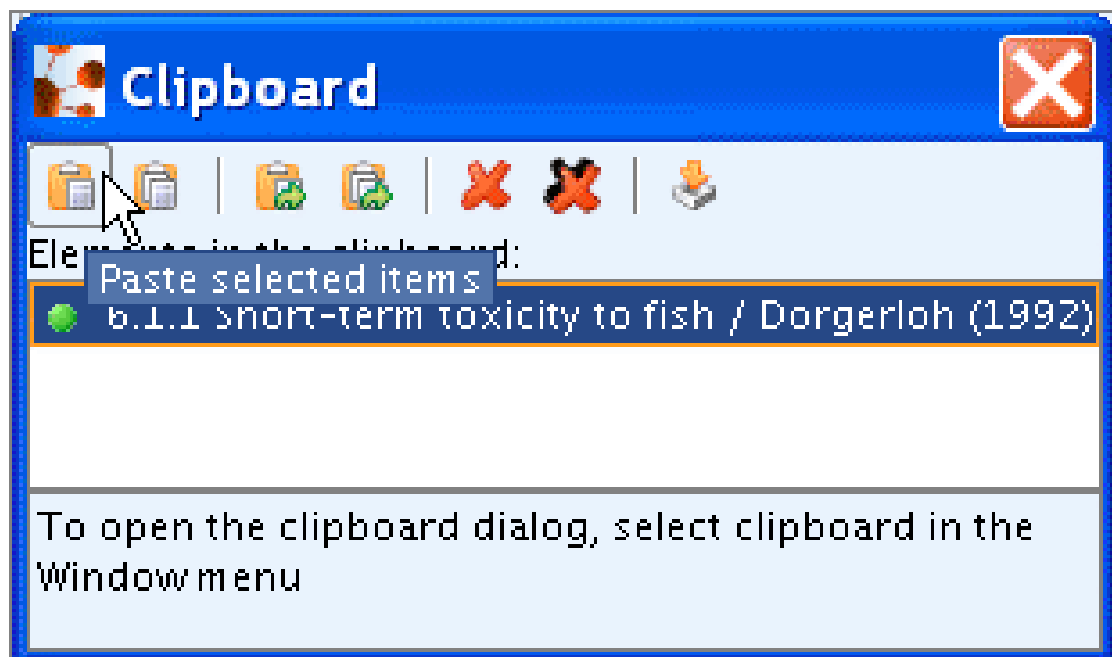
1. セクション・ツリー・ペイン中のレコード"Dorgerloh (1992)"を右クリックして開くメニューからCopyコマンドをクリックしてください。



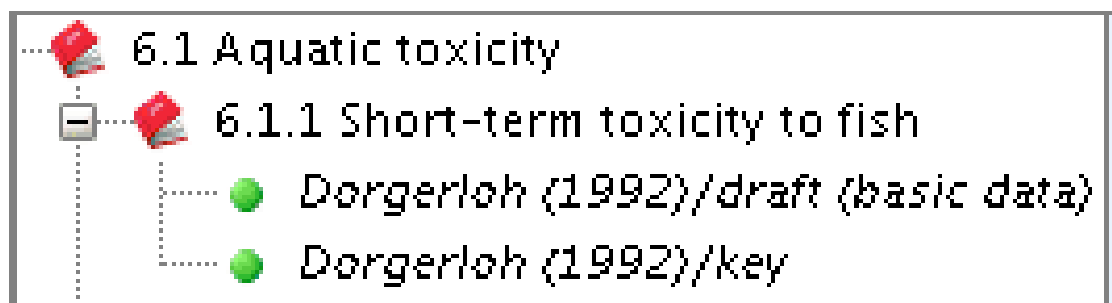
2. クリップボード・マネージャーが開き、コピーしたレコードが表示されます。



- クリップボード中のコピーされたレコードを選択し、反転させて、**Paste selected items**  (選択項目をペーストする) ボタンをクリックしてください。そうするとレコードはオリジナルと同じ名前でセクション・ツリーに現れます。



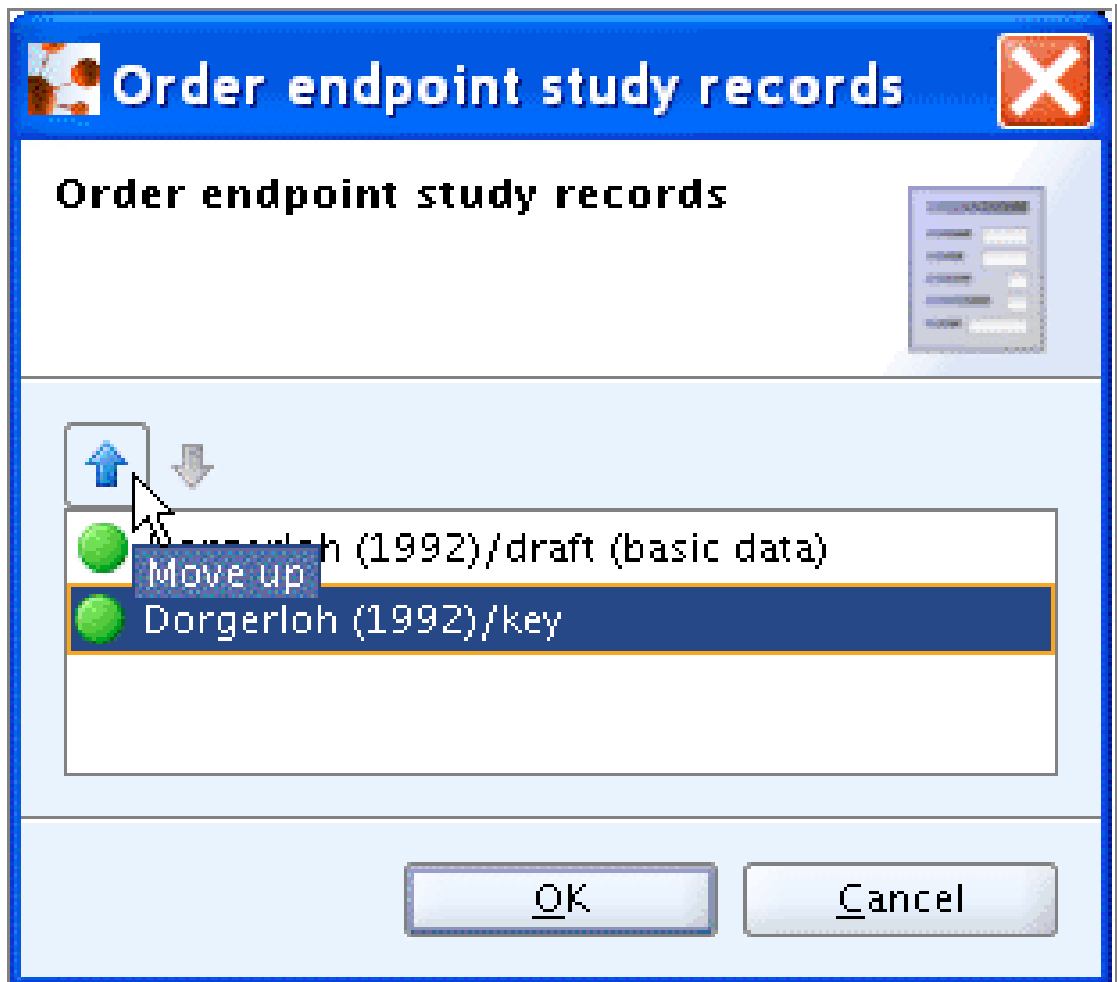
- 一つのレコードの名前を"Dorgerloh (1992)/draft (basic data)"に変更し、いまひとつを"Dorgerloh (1992)/key"に変更してください。



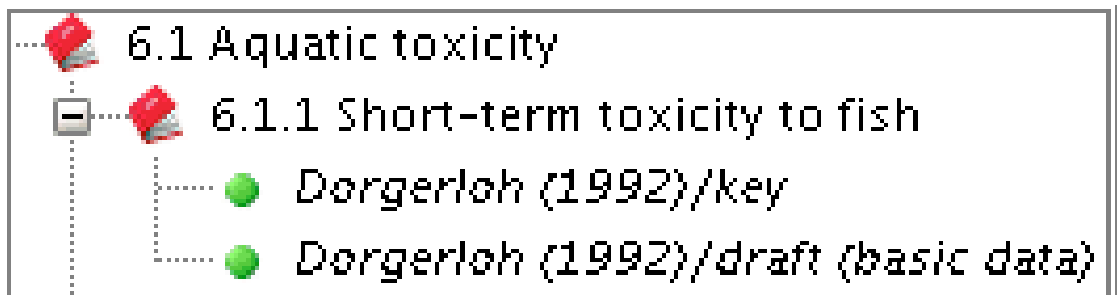
### エンドポイント研究レコードを順に並べる方法

使用する事例：セクション・ツリー中のレコードを並び替えて"key study"(主要研究)が最初に来るようにレコードの位置を変えてください。(エンドポイント・セクションあたりにレコードの数が多いケースで役に立つでしょう)。次の手順に従って作業を実施してください：

- セクション・タイトル6.1.1 *Short-term toxicity to fish* **6.1.1 魚短期毒性**をクリックして開くメニューから**Order records**コマンドをクリックしてください。




2. ダイアログボックス内で"key study"(主要研究)に指定したレコードを反転させてください。続いてMove up arrow (上矢印)をクリックしてそのレコードを先頭に移し、それからOKボタンを押してください。
3. これで主要研究が最初のレコードとなりました。



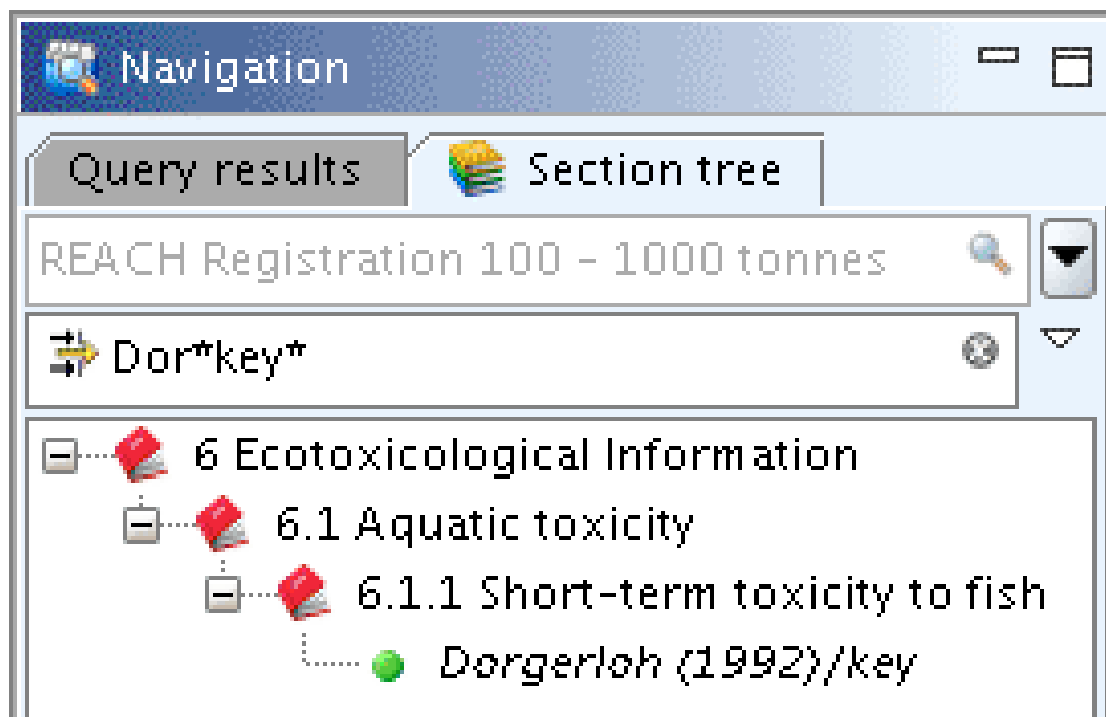
### セクション・ツリー中の特定のエンドポイント研究レコードをすばやく見つける方法

使用事例：もしエンドポイント研究レコードが多数含まれているセクションの場合、そのquery/filter method (検索/篩い分け手法)が特定のレコードをすばやく篩い分けるのに用いられるだろう。

レコードを検索し見つけるために

1. セクション・ツリー・ペインのタイトルバーの下にあるFind or Filter pane  (検索あるいは篩い分けのペイン)をクリックして入る。
2. 見つけたいレコード名の必要十分な部分を入力してください。すると、その名前前の検索語を含むすべてのレコードが篩わけられ直ちに表示されます。たとえば、"Dor"(引用符は不要)はこの文字列で始まるすべてのレコードが

選択されます。【訳注: 実際には「始まる」ではなく「を含む」である】 "Dor\*key"と入力すれば"Dorgerloh (1992)/key"のレコードが見つかります。




### Tip

Use wildcards (\*) for any characters preceding or following a search string.

ワイルドカード(\*)を探したい文字の前後の任意の複数文字として使用してください。

## セクション6.1.1の短期魚毒性 ロバスト研究要約のための追加的なデータの入力方法

使用する事例：完全研究報告が今入手可能であり、ロバスト研究要約を作成するために使用できるとします。この実習で使用する事例では、Detail Level(詳細レベル)"all fields"(全フィールド)について実習し、エンドポイント研究要約の主要部分へのナビゲータ(案内役)リンク、包括的なFreetextテンプレートの使用、フィールドの反復ブロックでの項目の並び替え、リッチテキストフィールドの使用と事前に定義された表のアップロード、そして、その他の編集機能について実習することを狙いとしています。

1. セクションツリー中のレコード"Dorgerloh (1992)/key"を見つけそれをダブルクリックして開いてください。
2. ツールバー上のEditボタンをクリックして、そのレコードを編集可能にしてください。
3. レコード・タイトル・バーの下にあるDetail level(詳細レベル)ボタンをクリックして表示されるメニューから、"all fields"(フィールド全部)を選択してください。
4. "Administrative Data"(管理データ)パート： 下のスクリーンショットの内容に従ってPurpose flag(目的フラグ)フィールドを埋めてください、続いて、"robust study summary"(ロバスト研究要約)チェックボックスを選択し、対応するフィールドの研究時期を入力してください。(注意: Reliability(信頼性)フィールドとRationale for reliability(信頼性の理由)は後で、その研究を評価しロバスト研究要約の入力を終えてから、入力することになります。)

Endpoint study record: Dorgerloh (1992)/key

Detail level: Administrative Data | Data source | Materials and methods

all fields | Results and discussions | Overall remarks, attachments | Applicant's summary and conclusion

**Administrative Data**

Purpose flag: key study  robust study summary  used for classification  used for MSDS

Data waiving:

Justification for data waiving:

Study result type: experimental result Study period: May 12-16, 1999


Reliability:

Rationale for reliability:



**入力補助:**

study period: May 12-16, 1999

5. "Test materials"(試験材料)パート:



- Details on test material **試験材料の詳細** フィールドに追加情報を入力してください。そのフィールドラベルの下のフリーテキスト・テンプレート・アイコン  をクリックしてください。開いたフリーテキスト・テンプレート・ダイアログ・ボックスで、必要な項目を残したまま、その他の項目をすべて削除して、そのフリーテキストテンプレートを編集してください。下のスクリーンショットに示されるように記載してください。
- Confidential details on test material **試験材料の詳細 (機密情報)**: フリーテキスト・テンプレートから "- Lot/batch No.:"の項目を選択し、下のスクリーンショットに示されているようにデータを入力してください。(注意: このフィールドには機密を主張できるような情報(例: 組成、不純物、ロット/バッチ番号)を含めるべきである。なぜなら、これにより任意の印刷出力とエクスポートファイルからそのようなデータを篩い分けることができるからである)。
- Details on properties of test surrogate or analogue material **代わりのあるいは類似の試験材料の性質に関する詳細**: このフィールドは空のままにしてください、というのは、このフィールドは、他の一つの物質、たとえば、類似物質や代理物質から読み込み法(read-across)の場合にのみ使用するのが適切であるからです。

**Details on test material**

 | 



- Analytical purity: 97.2%  
- Stability under test conditions: good  
- Storage condition of test material: room temperature

**Confidential details on test material**

 | 

- Lot/batch No.: 02/03/99

**Details on properties of test surrogate or analogue material**

 | 

**入力補助:**



- Analytical purity: 97.2%  
- Stability under test conditions: good

- Storage condition of test material: room temperature

- Lot/batch No.: 02/03/99




6. "Test organisms"(試験生物)パート、Details on test organisms試験生物の詳細：フリーテキスト・テンプレートを選択肢、次のスクリーンショットに示すように入力してください。

### Tip



フィールドの右上にある**Unfold button**(展開ボタン)  をクリックして、フィールドを展開してください。 **Fold button**(折畳ボタン)  をクリックして、表示領域を最小化してください。

**Test organisms**

Test organisms (species)

Oncorhynchus mykiss   

[Details on test organisms](#)

- Common name: golden orfe
- Source: Commercial Hatchery ABC, Stockton, UK
- Age at study initiation (mean and range, SD): no data
- Length at study initiation (length definition, mean, range and SD): average total length: 8.0 +/- 0.2 cm
- Weight at study initiation (mean and range, SD): 4.3 +/- 0.4 g
- Feeding during test: none

ACCLIMATION

- Acclimation period: 12 days
- Acclimation conditions (same as test or not): yes
- Health during acclimation (any mortality observed): no

### 入力補助:

Oncorhynchus mykiss

- Common name: golden orfe

- Source: Commercial Hatchery ABC, Stockton, UK

- Age at study initiation (mean and range, SD): no data

- Length at study initiation (length definition, mean, range and SD): average total length: 8.0 +/- 0.2 cm

- Weight at study initiation (mean and range, SD): 4.3 +/- 0.4 g

- Feeding during test: none

ACCLIMATION - Acclimation period: 12 days

- Acclimation conditions (same as test or not): yes

- Health during acclimation (any mortality observed): no

7. "Test conditions"(試験条件)パート: 次のスクリーンショットに示されているように、Hardness硬度、Test temperature試験温度、pH、Dissolved oxygen溶存酸素、Nominal and measured concentrations設定濃度と測定濃度を入力してください。

**Test conditions**

**Hardness**  
40-50 mg/L CaCO<sub>3</sub>

**Test temperature**  
20 +/- 1 °C (Temperature in one of the control solutions measured at beginning and end of test)

**pH**  
7.3-7.6 (controls); 6.8 - 7.5 (500, 1000, 1800 mg/L); 3.4-3.6 (3200, 5800 mg/L)

**Dissolved oxygen**  
mg/L O<sub>2</sub>: 8.5-8.7 in all vessels (0 h); 8.1-8.3 at 3200 mg/L (6 h); 6.9-7.6 in all vessels (48 h)

**Salinity**

**Nominal and measured concentrations**  
Nominal: 0, 500, 1000, 1800, 3200, 5800 mg/L; for measured concentrations see Table 1

**入力補助:**

Hardness: 40-50 mg/L CaCO<sub>3</sub>

Test temperature: 20 +/- 1°C(Temperature in one of the control solutions measured at beginning and end of test)

pH: 7.3-7.6 (controls); 6.8-7.5 (500, 1000, 1800 mg/L); 3.4-3.6 (3200, 5800 mg/L)



Dissolved oxygen: mg/L O<sub>2</sub>: 8.5-8.7 in all vessels (0 h); 8.1-8.3 at 3200 mg/L (6 h); 6.9-7.6 in all vessels (48 h)

Salinity:

Nominal and measured concentrations: Nominal: 0, 500, 1000, 1800, 3200, 5800 mg/L; measured concentrations see Table 1

8. "Test conditions"(試験条件)(続き)、Details on test conditions **試験条件の詳細**：次のスクリーンショットの示されるようにフリーテキストを選択して入力して下さい。

**Details on test conditions**


**TEST SYSTEM**

- Test vessel: 10 L all-glass aquaria (30x22x24 cm)
- Type (delete if not applicable): open
- Aeration: slightly aerated
- No. of organisms per vessel: 10
- No. of vessels per concentration (replicates): 2
- No. of vessels per control (replicates): 2
- Biomass loading rate: 3.9 g fish per L test water

**TEST MEDIUM / WATER PARAMETERS**

- Source/preparation of dilution water: synthetic, prepared as described in test guideline
- Alkalinity: 0.8 mmol/L

9. Any other information on materials and methods incl. tables **表を含む材料と方法に関する任意のその他の情報**：前もって定義しておいた表あるいはその他の利用可能な表をアップロードして次のようにリッチテキストフィールドに入力してください:

- ・ リッチテキストエディタのツールバー上の**Open file**(ファイルを開く)ボタン  をクリックしてください。
- ・ 表示される**Open**ダイアログボックスから、あなたがそのフィールドにアップロードしたいファイルを選択して、**Open**ボタンをクリックして下さい。
- ・ 適切に表を編集してください。

Any other information on materials and methods incl. tables

Normal Default font

**Table 1: Nominal and measured concentrations at 0 and 96 h**

Nominal concentr.	Measured concentration (mg/L) results					
	0 (control)	500	1000	1800	3200	5800
Range (min.-max.)		492 - 507.5	987 - 1006	1787 - 1812	n.a.	5712 - 5874
Median						
Mean* ± st. dev.		499.7	996.5	1799.5		5793
% of nominal (ref. to mean)		100	99.7	100		99.8

\*Basis: mean of 0 and 96 h measurements

10. "Results and discussions"(結果と考察)パート: 次の示すスクリーンショットに示されているようにEffect concentrations影響濃度フィールドブロックに追加的な影響濃度データ、Details on results結果の詳細フィールドに詳細を入力してください:

**Results and discussions**

Effect concentrations

Duration	Endpoint	Effect conc.	Nominal/Measured	Conc. based on	Basis for effect	Rem.
96 h	LC50	> 1800 mg/L	meas. (initial)	test mat.	mortality	
96 h	LC0	500 mg/L	nominal	test mat.	mortality	
96 h	ECO	250 mg/L	nominal	test mat.	behaviour (swimming)	

Add... Edit... Delete Move up Move down

**Details on results**

- Effect data: From 10 fishes dies 0 at 500, 1000 mg/L; 2 at 1800 mg/L; 4 at 2500 mg/L
- Behavioural abnormalities: narcotic-like state, tumbling at => 500 mg/L
- Observations on body length and weight: no data
- Other biological observations: no data
- Mortality of control: 0
- Other adverse effects control: none
- Abnormal responses: no data

11. "Administrative Data"(管理データ)パート: Reliability信頼性とRationale for reliability信頼性に対する理由が試験報告書あるいは出版物の本質的な品質に基づいて入力が必要であり、それゆえデータの十分さ(adequacy)に基づいて入力する必要があります。次のように処理してください:

- ・タイトルバーの真下のナビゲーションバーにある"Administrative data"(管理データ)リンクをクリックし、直接そのパートにジャンプしてください。

### Tip

そのナビゲーションバーの上のリンクは、特に、非常に広範なエンドポイント研究レコードの場合に使用すれば役に立ちます。あるいは、もし特定の部分、たとえば、"Results and discussion"(結果と考察)の特定の部分の編集、あるいは、閲覧を始めた場合にも役に立ちます。

- ・ Reliability信頼性フィールドと Rationale for reliability信頼性に対する理由フィールドを、次のスクリーンショットに示されているように入力してください。
- ・ "Applicant's summary and conclusions"(申請者の要約と結論)のリンクをクリックして、そのパーツにジャンプし、処理してください。

Endpoint study record: Dorgerloh (1992)/key

Detail level: Administrative Data | Data source | Materials and methods

all fields | Results and discussions | Overall remarks, attachments | Applicant's summary and conclusion

**Administrative Data**

Purpose flag: key study  robust study summary  used for classification  used for MSDS

Data waiving:

Justification for data waiving:

Study result type: experimental result | Study period: May 12-16, 1999

Reliability: 2 (reliable with restrictions)

Rationale for reliability: Comparable to guideline study with acceptable restrictions: Slightly higher loading (1.2 g/L) than recommended by OECD 203 (1 g/L) not expected to have a major impact on test result.

12. "Applicant's summary and conclusion"(申請者の要約と結論)パート :

**Executive summary**

In a 96-h acute toxicity study, {common name and scientific name} were exposed to {test chemical} at {nominal and measured} concentrations of {0 (control, solvent control),  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  mg a.i./L} under static/flow through conditions. The 96-h  $LC_{50}$  was ..... mg a.i./L. The  $EC_{50}$  and NOEC values, based on mortality/sublethal effects, were ... and ... mg a.i./L, respectively. Sublethal effects of {list effects} were observed in the groups exposed to [list corresponding concentration(s)] of {test material}. Based on the results of this study, {test material} would be classified as {toxicity classification} to {test species} in accordance with the classification system of the U.S. EPA.

This toxicity study is classified as {acceptability classification e.g. acceptable/ unacceptable/supplementary} and {satisfies/does not satisfy} the guideline requirement for [indicate study type and species] toxicity study.

**Results Synopsis**

Test organism size/age (mean wet weight or length):  
 Test Type (Flowthrough, Static, Static Renewal):

$LC_{50}$ : {..... mg a.i./L}                      95% C.I.: {... to ... mg a.i./L}  
 NOEL: {... mg a.i./L}                              Probit Slope: {.....}  
 $EC_{50}$ : {..... mg a.i./L}                      95% C.I.: {... to ... mg a.i./L}  
 Endpoint(s) Effected: {.....}



## C.5. Printing the Substance dataset

The tutorial in this chapter shows how to print

- an Endpoint study record with basic fields only
- an Endpoint study record with all fields
- the complete Substance dataset

### ***Step-by-step guide***

To print the sample Endpoint study record "Dorgerloh (1992)/key" with basic fields only

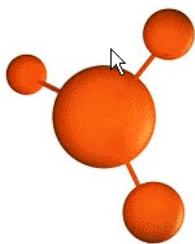
1. Right-click this record in the section tree or select the **Print** command from the **File** menu.
2. The Print assistant comes up and guides you through several steps of a self-explanatory Print dialogue: Verify or change the default properties, for which the record shall be printed. In Step 5, select the detail level "Basic level". Specify output path, file name and other print options, and click the **Finish** button.
3. Open the html file from for viewing it.

To print this record with all fields, follow the same procedure, except for selecting detail level "All fields - including confidential test material information".

To print the complete dataset

1. Double-click any record in sections 0 to 3. Make sure one of the subsections is displayed in the data entry window, e.g. section *1.1 Identification*.
2. Select the **Print** command from the **File** menu.
3. The Print assistant comes up and guides you through several steps of a self-explanatory Print dialogue: Verify or change the default properties, for which the records shall be printed, specify output path, file name and other print options, and click the **Finish** button.

The following screenshot show part of the print-out of the sample Endpoint study record:



**IUCLID 5**  
INTERNATIONAL UNIFORM CHEMICAL INFORMATION DATABASE

Printing Date 2007-03-31 19:21:16 CEST

Restriction of specific regulatory purposes

EU: BPD, EU: PPP, EU: REACH, CA: CEPA, CA: PCPA, JP: CSCL, OECD: HPVC, US: EPA HPVC, US: FIFRA, US: TSCA, other:

Confidentiality

CBI, IP, no PA

Owner ethanol (fictitious sample for IUC5 manual) / ethanol / Ethanol / ethanol / 64-17-5 / LE Sample Company / Hometown / Ireland

Owner legal entity LE Sample Company / Hometown / Ireland

### **Endpoint study record: Dorgerloh (1992)/key**

UUID IUC5-1539298a-0a9c-4e6b-8b7b-7737715156a

Dossier UUID [\[\]](#)

Author IUCLID sample user / LE Sample Company / Hometown / Ireland

Date 2007-03-31 19:08:03 CEST

Remarks

### **Administrative Data**

[\[\]](#)

Purpose flag key study (X) robust study summary ( ) used for classification ( ) used for MSDS

Study result type experimental result experimental result May 12-16, 1999

Reliability 2 (reliable with restrictions)

Rationale for reliability Comparable to guideline study with acceptable restrictions: Slightly higher loading (1.2 g/L) than recommended by OECD 203 (1 g/L) not expected to have a major impact on test result.

### **Data source**

#### **Reference**

Reference type publication  
 Author Dorgerloh M, Miller EM & Murphy L Year 1994  
 Title Acute toxicity of sampleX to rainbow trout  
 Bibliographic source J. Aqu. Toxicol. 12: 234-237  
 Testing laboratory Report no.  
 Owner company  
 Company Report

The complete print-out is shown in chapter [D.4.7.13 Printing Endpoint study records](#).

- ・ [日本語のみ](#)
- ・ [原文付き](#)

## C.6. ドシエ(一式文書)の作成

この章のチュートリアルはドシエの作成方法を示すことです。その方法は印刷する方法とごくにかよっていません。

### 序

ドシエは、Substance dataセットに保存された原データを書き込み禁止でコピーしたものです。所有者保護オプション(Ownership protection option)を設定できて、そうするとドシエとともに提供されたエンドポイント研究・要約レコードをコピーされないようにすることができます。これは、ドシエが別の人に入試可能となっても、申請者がエンドポイント・レコードをコピーさせたくない場合に適した機能です。詳細については[D.8 Dossier \(create Dossier and browse Dossier data\)](#)をご覧ください。

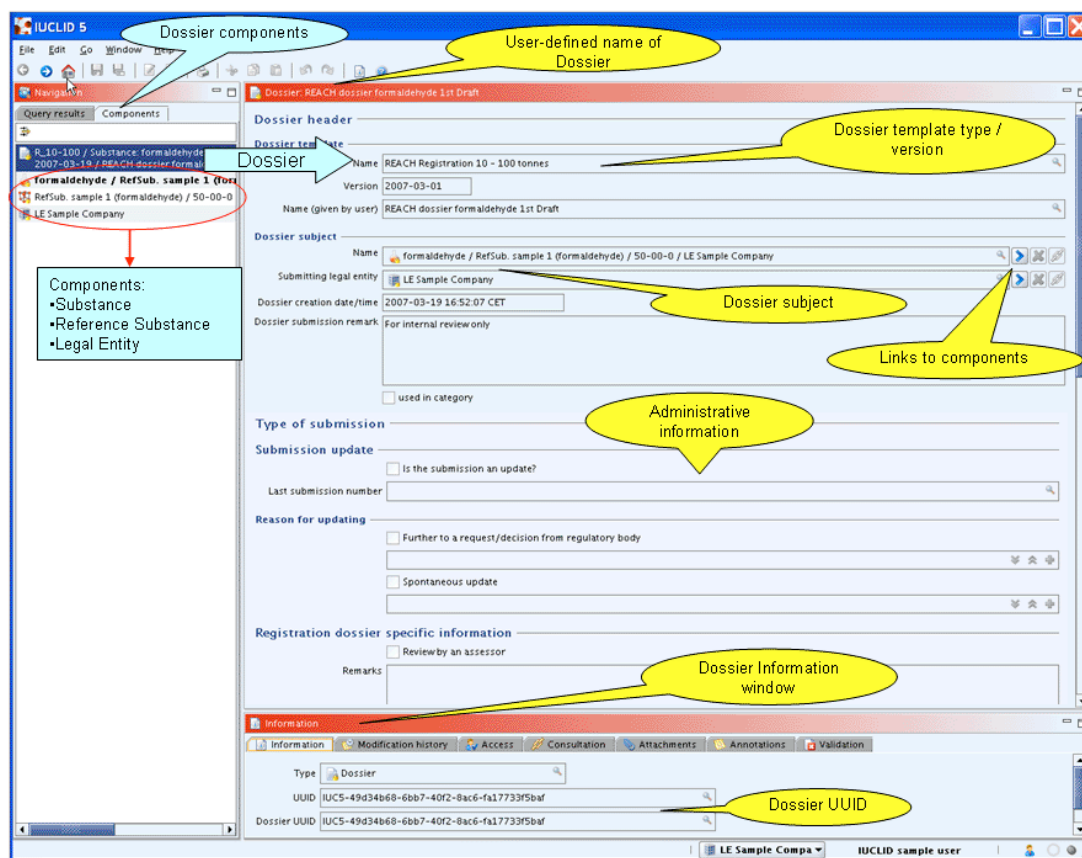
## ステップ・バイ・ステップ ガイド

Substanceデータセットのためのドシエを作成するためには、次の手順に従ってください:

1. もし現在ホーム画面でなければ、Homeホーム🏠に戻ってタスクパネルへ移動してください。
2. **Substance物質** 🧪の下にある、**Update更新**をクリックしてください。
3. **Query results検索結果** ペインでは必要なSubstance(すなわち同じデータセット)を右クリックし、表示されるメニューで、**Create dossier ドシエ作成** コマンドをクリックしてください。
4. Create dossier assistant(ドシエ作成アシスタント) **訳注:Dossier creation wizard** が現れ、数ステップのダイアログを案内してくれます: デフォルト値(すなわち、どのレコードをドシエに含めるべきかを決める値)を確認または変更し、そのドシエ特有の情報を記入して、**Finish完了** ボタンをクリックしてください。
5. 作成したドシエがNavigationナビゲーションウィンドウの新しいタブ(タブ名称はComponents**構成**)に現れます。すなわち:
  - ・ ドシエそれ自身:
    - ドシエ・タイトルには、ドシエのテンプレートタイプ、Substance/参照物質名、CAS番号、Legal entity**法人**、日付、それに、ユーザ定義名が含まれています。
    - ドシエ作成過程で入力したドシエ情報がDat entry window **データ・エントリ・ウィンドウ**に表示されます。この情報はリードオンリー(読み取り専用)です。直接Dossier subject **ドシエ主題**に直接移動可能です。下のスクリーンショットをご覧ください。
    - ドシエ関連の情報ウィンドウ
  - ・ ドシエ作成の原になったSubstanceデータセット。

- Substance物質に関連しているReference substance参照物質。
- Substance物質が割り当てているLegal entity。

次のスクリーンショットにはDossier componentsドシエ構成とDossier informationドシエ情報の例を示している。



© 2008 日本化学工業協会

## C.7. Exporting the Substance dataset

The tutorial in this chapter shows how to export a complete Substance dataset or individual records.

### *Step-by-step guide*

To export the complete Substance dataset

1. Click the Query results pane if it is not already active or select the command **Update Substance** from the IUCLID Task panel.
2. Select the Substance dataset to be exported:
  - Either right-click it and from the menu displayed, click the **Export** command.
  - Or click it and then select the **Export** command from the **File** menu.
3. The Export assistant comes up and guides you through a several steps Export dialogue: Verify or change the default properties, for which the records shall be exported, specify output path, file name and other options, and click the **Finish** button.

To export individual record(s) of a Substance dataset

1. Right-click the record name in the section tree and from the menu displayed, click the **Export** command..
2. The Export assistant comes up and guides you through a several steps Export dialogue: Verify or change the default properties, for which the records shall be exported, specify output path, file name and other options, and click the **Finish** button.

For more information, see chapter [D.4.7.14 Exporting Endpoint study records](#).



## C.8. Importing the Substance dataset

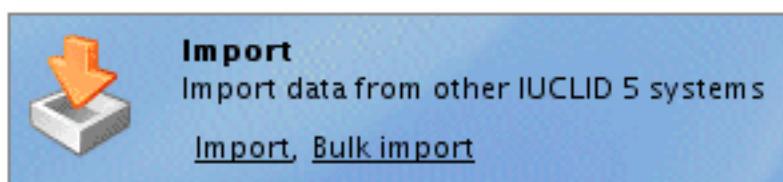
The tutorial in this chapter shows how to import a complete Substance dataset or individual records.

Prerequisite is that you have a IUCLID export file stored on your computer, e.g. as created in the preceding exercise (see chapter [C.7 Exporting the Substance dataset](#)). If you import an already existing Substance dataset, any identical records will be automatically deselected by default. To test the import of a Substance dataset that is not yet available on your IUCLID installation, you may delete the Substance dataset after exporting it (right-click it in the Query results pane and select the **Delete** command).

### *Step-by-step guide*

To import a IUCLID export file of a Substance dataset

1. Go Home  to the Task panel if you are not already there.
2. Under **Import** , click **Import**.



3. The Import assistant comes up and guides you through a several steps Import dialogue: Select the input path and file name; verify or change the default properties, for which the records shall be imported, select/deselect all or individual records to be imported, and click the **Finish** button.

For more information, see chapter [D.14 Import \(import data from other IUCLID 5 systems\)](#).

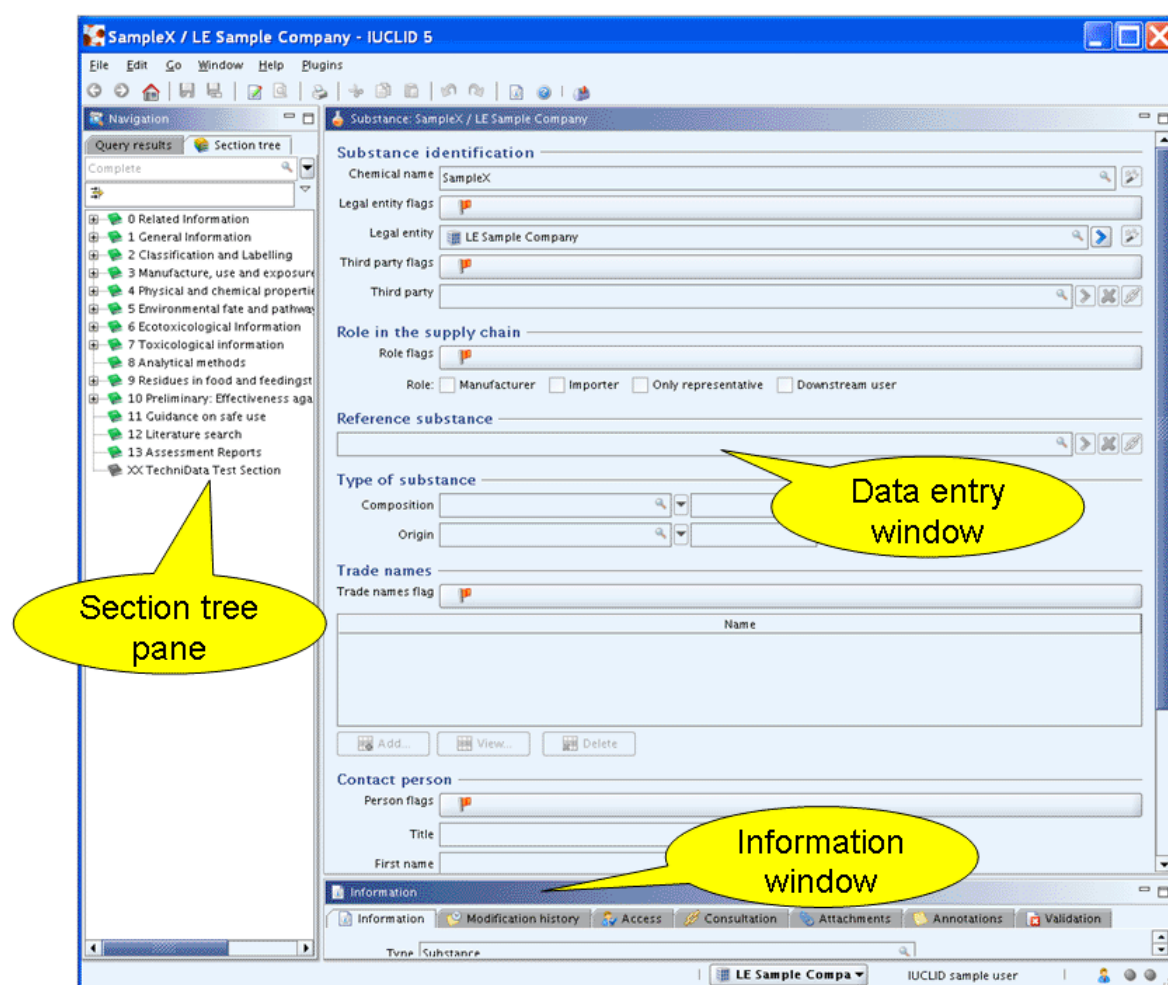
## C.9. Making annotations

The tutorial in this chapter shows how to make annotations on records on the raw data level and on records provided with a Dossier.



### Introduction

The Annotations feature is primarily designed for the use by regulatory authorities, e.g. the European Chemicals Agency or Competent Authorities of the Member States, when evaluating the data submitted by the applicant. However, it may also be used by the Legal entity compiling a Substance dataset, for example, in the context of the internal review process.

The Annotations feature can be found on the Annotations tab of the Information window, which is provided just below the Data entry window, as shown in the following screenshot:



### Tip

You can minimise / maximise the Information window by clicking the respective **Minimise**  or **Maximise**  button in the upper right corner of the title bar of this window.

An annotation record consists of the following three tabs:

- Data: Constitutes the actual annotation entry screen.
- Information: Contains general technical information:
  - Record ID: Displays the UUID (**U**niversal **U**nique **I**dentifier) assigned to the annotation record.
  - Linked record ID: Displays the UUID assigned to the record the annotation record refer to.
  - Linked record type: Displays the type of the linked record.
  - Linked record date: Displays the date of the linked record.
- Modification: Shows the modification history of the current annotation document.

Annotations can be created for any IUCLID element. As a general rule, the Annotations tab provided in the Information window is related to the very record displayed in the above Data entry window. This can be the Dossier, an Endpoint study or summary record of any Substance contained in the Dossier, the Legal entity or the Legal entity site, etc.

For more information, see chapter [D.4.9 How to use the Information window](#).



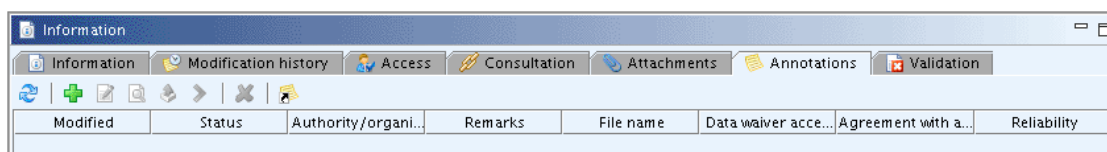
## C.9.1. Annotating raw data


Although sections 0 to 3 of a Substance dataset are technically handled as one record in IUCLID (see chapter [D.4.6.1 Differences between sections 0 - 3 and sections 4 - 13](#)), individual annotations can be created for each subsection. The following hands-on example demonstrates how to manage an annotation record for an Endpoint study record. The same principles apply for annotating any other IUCLID element, except that the Annotation template for Endpoint study records provides additional endpoint-related annotation fields.

### Step-by-step guide

To add an annotation related to the sample Endpoint study record

1. Find the record "Dorgerloh (1992)/key" in the section tree and double-click it to open it.
2. In the Information window, click the Annotations tab to access this feature.



3. On the Annotations toolbar, click the **Add** button .
4. In the Annotation template appearing, complete the appropriate fields, as shown in the screenshot below. In the fields *Conclusions* and *Executive summary*, the submitter's proposal may be adopted or revised as appropriate.
5. Click the **Save** or **Save with comment** button if you wish to add any comment, which will appear in the modification history only.

**Annotation** [X]

Edit the annotation

Information [ ] Modification history [ ]

Name of authority/organisation: LE Sample Company / Hometown / Ireland

Annotation status: draft

Agreement with applicant's summary

Data waiver acceptable: [ ]

Reliability: 2 reliable with restrictions

Remarks: Freetext Template (delete/add elements and edit text set in [...] (if any) as appropriate):

MATERIALS AND METHODS  
- Details on test conditions: Minor comment: The slightly higher loading (1.2 g/L) than recommended by OECD 203 (1 g/L) is not expected to have a major impact on the test result.

Crossreference to other study: [ ]

Conclusions: [ ]

Executive summary: [ ]

Attached regulatory authorities' evaluation: [ ]

[ Save with comment... ] [ Save ] [ Cancel ]

After clicking the **Save** button, the annotation record is displayed in table-view as follows:

Information [ ]

Information [ ] Modification history [ ] Access [ ] Consultation [ ] Attachments [ ] Annotations [ ] Validation [ ]

Modified	Status	Authority/org...	Remarks	File name	Data waiver acce...	Agreement with a...	Reliability
2007-04-01 18:...	draft	LE Sample Comp...	MATERIALS AND ...			<input checked="" type="checkbox"/>	2 reliable with re...

## C.9.2. Annotating a Dossier

The Annotations feature can also be used to make annotations on any Dossier component and any record withing each component. As a general rule, the Annotations tab provided in the Information window is related to the very record displayed in the Data entry window.



This can be the Dossier, an Endpoint study or summary record of any Substance contained in the Dossier, the Legal entity or the Legal entity site etc.

### **Important**

Any annotations made on raw data are not included in Dossiers. Vice versa, any annotations made on Dossier data are confined to the Dossier and are not related to the corresponding raw data records.

### **Step-by-step guide**

First the Dossier needs to be opened as follows:

1. Go Home  to the Task panel if you are not already there.
2. Under **Dossier** , click **View**. A screen comes up with empty windows on the right side and a **Query results** pane on the left (below the title bar **Navigation**) showing all Dossiers available in your local IUCLID installation or the network you are connected to.
3. Double-click the desired Dossier to display it in the Components pane together with all its components, as shown in the screenshot below.
4. If there is a large number of Dossiers listed, run a query as described for Substances in chapter [D.4.3.2 Querying for a Substance in the Query results pane](#).
5. When the desired Dossier has been selected, it is displayed in the Components pane together with all its components, i.e.:
  - The Dossier itself:
    - The Dossier title includes the Dossier template type, the name of the Substance / Reference substance, the CAS No., Legal entity, date and the user-defined name.
    - The Dossier information entered during the process of Dossier creation is displayed (read-only) in the Data entry window.
    - The Dossier-related Information window including the Annotations tab.
  - The source Substance dataset (in **bold**).
  - The Reference substance referred to in the Substance.
  - The Legal entity the Substance is assigned to.

The screenshot displays the IUCLID 5 software interface. The main window shows a dossier titled "Dossier: Sample dossier (IUCLID Manual)". The dossier details are as follows:

- Dossier header:**
  - Dossier template:**
    - Name: REACH Registration 100 - 1000 tonnes
    - Version: 2007-03-01
    - Name (given by user): Sample dossier (IUCLID Manual)
  - Dossier subject:**
    - Name: ethanol (fictitious sample for IUC5 manual) / ethanol / Ethanol / ethanol / 64-17-5
    - Submitting legal entity: LE Sample Company / Hometown / Ireland
    - Dossier creation date/time: 2007-04-01 19:01:54 CEST
    - Dossier submission remark: (empty text area)
    - used in category
- Type of substance:** (empty dropdown menu)
- Information:**
  - Access, Consultation, Attachments, Annotations, Validation
  - Information, Modification history
  - Table with columns: Modified, Status, Authority/organisation, Remarks, File name

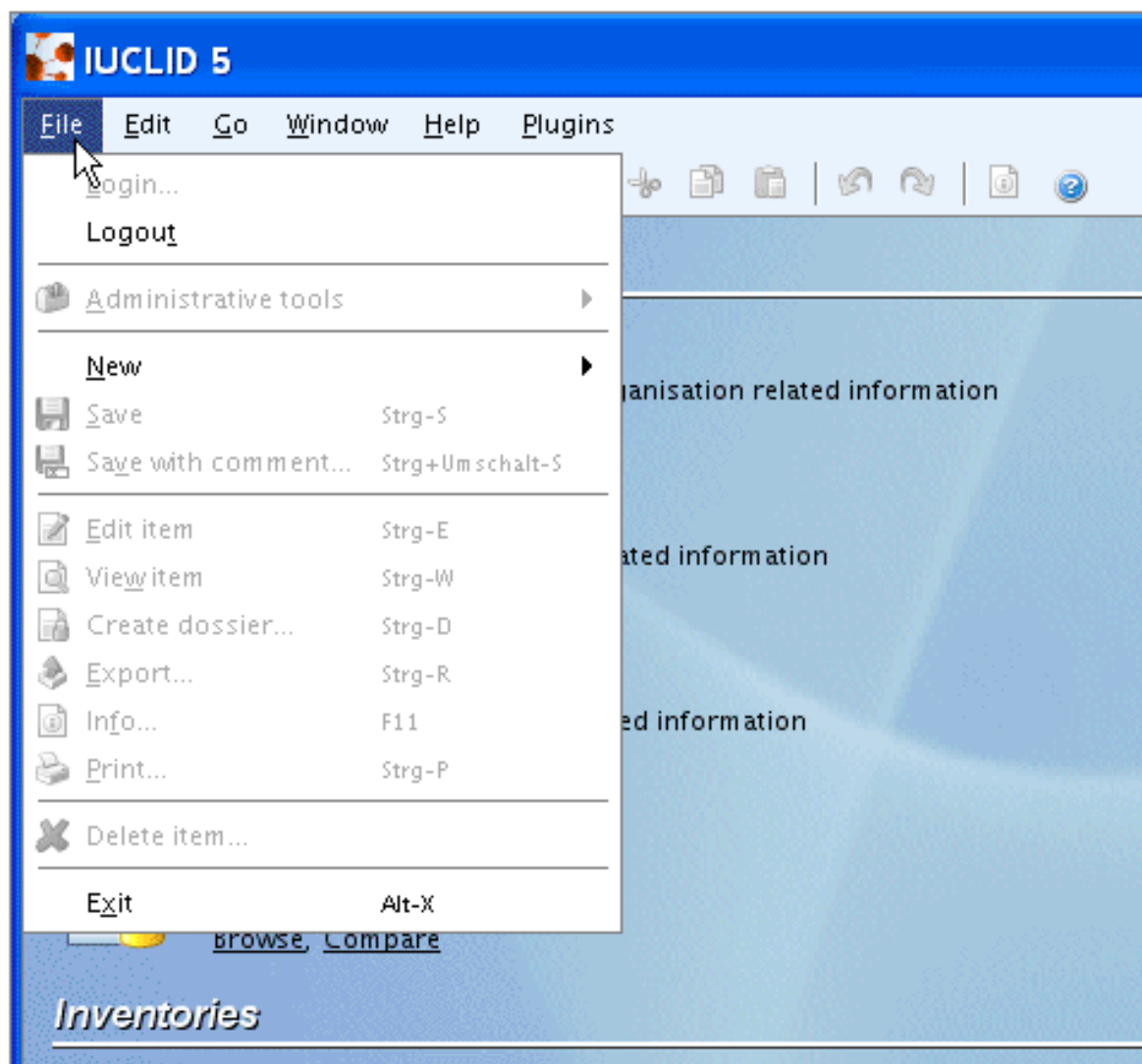
Modified	Status	Authority/organisation	Remarks	File name
2007-04-01 19:03:14 C...	final	LE Sample Company / H...	dummy remarks	

The bottom status bar shows the current location: "LE Sample Company / Hometown / Ir" and the user: "IUCLID sample user".

To add annotations to the Dossier, open the desired Dossier component and navigate to the element where you wish to comment on. For example, add an annotation to the Dossier itself or open the Substance dataset, navigate to Endpoint record(s) and add annotations related to these records. As to how to create annotations see the [preceding exercise](#).


## C.10. Logging out

To log out from your user account or exit IUCLID, select the respective **Logout** or **Exit** command from the File menu.



## Chapter E. Specific Guidance on Content of IUCLID Sections

This chapter provides specific guidance on the content of all IUCLID sections and subsections, which includes guidance on all data entry fields. The instructions on Endpoint study records of sections 4 to 10 are completely based on the help texts provided with the OECD Harmonised Templates (see chapter **D.4.7.1 What is an Endpoint study record?**).

All help texts are accessible as context-sensitive online Help by selecting the Help button  on the toolbar or pressing the F1 key on the keyboard (see chapter **A.3 Online Help**).

### Note

Section *0 Related information* is actually not a data entry section, but gives an indication of all associations existing between a Substance dataset and Templates, Categories and Mixtures. In Substance datasets, the following subsections are provided:

- Section *0.1 Templates*: So-called Inherit Templates can be added to a dataset and are then indicated as links (i.e. Template datasets serving as containers for Endpoint records which are "inherited" to a dataset). In addition, Endpoint records can be copied

from so-called Copy Templates. For detailed guidance, see chapter **D.5 Template (Create and update Template related information)**.

- Section *0.2 Categories*: Links to all Categories are provided which the Substance dataset under consideration is related to as member of these chemical categories. For detailed guidance, see chapter **D.6 Category (Create and update Category related information)**.
- Section *0.3 Mixtures*: Links to all Mixture datasets are provided which the Substance dataset under consideration is related to as a component.

In Mixture datasets, the following subsections are provided only:

- Section *0.1 Templates*: as above.
- Section *0.4 Related Substances*: Substance datasets related to the Mixture as components can be added and are then indicated as links. For detailed guidance, see chapter **D.7 Mixture (Create and update mixture related**

**information).**

For more information, see chapter **D.4.6 How to manage sections 0 - 3.**



## E.2. [2] Classification and Labelling

The classification and labelling is divided into two subsections:

1. Subsection **2.1 GHS** contains the classification and labelling information according to the Globally Harmonized System of classification and labelling of chemicals (GHS).
1. Subsection **2.2 DSD – DPD** contains the classification and labelling information according to the European directive 67/548/EEC for classification and labelling of substances and according to the European directive 1999/45/EC for classification and labelling of preparations.

The European directive 67/548/EEC for classification and labelling of substances is also known as the Dangerous Substances Directive (DSD). The European directive 1999/45/EC for classification and labelling of preparations is also known as the Dangerous Preparations Directive (DPD). The implementation of this section is done in a generic way, i.e. the same section is used both for preparations (mixtures) and substances. Therefore the name given to the section is also generic and includes both directives.


### **Caution**

Mixtures (also known as Preparations) and their classification and labelling information should be entered in the dataset specially dedicated to Mixtures. See chapter [D.7.2 Creating and populating a Mixture dataset](#) for more information on mixtures and their implementation in IUCLID.

A Substance may have multiple classification and labelling records, for instance in the case the substance contains an impurity having specific hazard properties leading to a specific impact on the classification. A Mixture can also have multiple classification and labelling records for instance in the case of different compositions.

IUCLID offers the possibility to store these multiple records whatever the system used, i.e. GHS or DSD – DPD, by using the repeatable block functionality (see chapter [D.4.5.5.3 Repeatable blocks of fields](#)).

## E.2.1. GHS

**GHS is a repeatable block section.** Click the green **Plus** button  to open the repeatable block. The data entry screen appears and an empty block is now ready to be filled in. Add a new block for each individual classification and labelling you may have.

Set the confidentiality/regulatory purpose information for each individual record created. For a description of these flags see chapter [D.4.5.7 Flags used for filtering data](#).

### **General information**

**Name :** When a Substance or a Mixture has more than one classification and labelling record it is recommended to specify a name for each individual record so that they can be easily identified (e.g. "classification with more/equal 0.1% of substance C" and "classification with less than 0.1% of substance C").

**Not classified:** Check this box if your Substance or Mixture is not classified.

**Implementation:** The GHS implementation can be different depending on certain regions (e.g. EU, Japan, Australia). Specify the Implementation by selecting from the drop-down list. If none of the pre-defined items applies, select **other:**. A text field is then activated next to the list field in which you can enter any freetext. If you wish to record a GHS for another region, add a new block.

**Remarks:** If necessary provide any additional comments here.

**Remaining fields:** To define the classification and labelling of your Substance or Mixture as required in the GHS, fill in the fields included in the following sections.

### **Classification**

Physical hazards

Health hazards

Germ cell mutagenicity (repeatable block subsection)

Carcinogenicity

Specific target organ toxicity - single (repeatable block subsection)

Specific target organ toxicity - repeated (repeatable block subsection)

Environmental hazards

Additional hazard classes

## **Labelling**

Hazard statements (repeatable block subsection)

Additional precautionary statements (repeatable block subsection)

Additional labelling requirements (repeatable block subsection)


Specific concentration limits (repeatable block subsection)

Hazard categories (repeatable block subsections)

Notes

## E.2.2. DSD-DPD

The **Classification and Labelling under European directives 67/548/EEC (DSD) and 1999/45/EC (DPD)** is a repeatable block section.

Click the green **Plus** button  to open the repeatable block. The data entry screen appears and an empty block is now ready to be filled in. Add a new block for each individual classification and labelling you may have.

Set the confidentiality/regulatory purpose information for each individual record created. For a description of these flags see chapter [D.4.5.7 Flags used for filtering data](#).

### General information

**Name** : When a Substance or a Mixture has more than one classification and labelling record it is recommended to specify a name for each individual record so that they can be easily identified (e.g. "classification with more than 0.1% of substance C" and "classification with less than 0.1% of substance C").

**Not classified** : Select this checkbox if your Substance or Mixture is not classified.

**Status** : Select from the drop-down list to indicate whether the classification record was based on the Annex I of Council Directive 67/548/EEC or on self classification following the criteria specified in Annex VI of Council Directive 67/548/EEC. If none of the pre-defined items applies, select other:. A text field is then activated next to the list field in which you can enter any free text.

**Index number** : Indicate the index number if the substance is classified in Annex I of 67/548/EEC.

**ATP inserted** : Indicate the first insertion in the Adaptation to Technical Progress (ATP) of Council Directive 67/548/EEC.

**ATP last update** : Indicate the last update to the Adaptation to Technical Progress (ATP) of Council Directive 67/548/EEC.

**Remarks** : If necessary provide any additional comments here.

**Remaining fields**: To define the classification and labelling of your Substance or Mixture required by DSD-DPD, fill in the fields included in the following sections.

### Note

If the classification and labelling is defined for a REACH dossier, according to Annex VI, of the REACH regulation, for each entry, the reasons why no classification is given for an endpoint should be provided (i.e. if data are lacking, inconclusive, or conclusive but not sufficient for classification).

## **Classification**

---

Indicate the classification or the reason for no classification selecting the corresponding checkbox(es) (or entries) in the related drop-down list boxes or drop-down combo-boxes:

Explosiveness

Oxidising properties

Flammability

Thermal stability

Acute toxicity

Acute toxicity - irreversible damage after single exposure

Repeated dose toxicity

Irritation / Corrosion

Sensitisation

Carcinogenicity

Mutagenicity - Genetic Toxicity

Toxicity to reproduction - fertility

Toxicity to reproduction - development

Toxicity to reproduction - breastfed babies

Environment

## **Labelling**

---

Indication of danger (repeatable block subsection)

Risk phrases (repeatable block subsection)

Safety phrases (repeatable block subsection)

Specific concentration limits (repeatable block subsection)

Indication of danger (symbols) (repeatable block subsection)

Notes (repeatable block subsection)

## E.2.2. sup.01 補足 危険物分類

JCNEW社のEthanolのデータセットを完成するために、Ethanolが67/548/EECでどのように分類されているか調べましょう。

Consumer Products Safety & Quality (CPS&Q) Unitのサイトを開いてください。Consumer Products Safety & Quality (CPS&Q) Unitは以前はEuropean Chemicals Bureau (ECB)と呼ばれていた、EU JRCの7つの研究所のうちの一つで、Health and Consumer Protection (IHCP)に関する研究所に属しています。

The screenshot shows the website for the Consumer Products Safety & Quality Unit. The header includes the European Commission logo and the text 'European Commission Joint Research Centre Institute for Health and Consumer Protection'. The main heading is 'Consumer Products Safety & Quality'. A search bar is located in the top right. On the left, there is a navigation menu with categories like 'Activities', 'EDEXIM', 'ESIS', 'Contacts', 'Documentation', 'Legislation', 'Links', 'Newsletter', 'Search', 'Site Map', and 'What's New'. The main content area features the ECB logo and a paragraph of text: 'The Consumer Products Safety & Quality (CPS&Q) Unit, formerly known as European Chemicals Bureau (ECB), is part of the Institute for Health and Consumer Protection (IHCP), which is one of the seven scientific institutes in the European Commission's Joint Research Centre (JRC). Our mission is to provide scientific and technical support to the conception, development, implementation and monitoring of EU policies on chemicals and consumer products. This includes managing the risk assessment process, the development of guidance documents and tools in support of the REACH (Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals) Regulation, the Testing Methods Regulation, the Global Harmonised System (GHS) for the classification and labelling of hazardous chemicals and the Biocides Product Directive. Our work also focuses on the benefit and risk assessment of nanomaterials, the development of methodology for the future Regulation on the Prioritisation of Chemical Substances and its corresponding environmental quality standards (EQS) and harmonisation of testing methods and non-testing methods (e.g. QSARs). For any information concerning the Unit, please contact the Acting Head of Unit: [Ana Pinyó-Pérez](#) the Website, please contact the IT Manager: [Rafael Abancou](#)

そのサイトの左のカラムのclassification & Labellingをクリックしてください。注意してもらいたい箇所があります。開いた画面で、Overview欄の第5番目の段落をお読みください:

Annex I, the published list of substances with a harmonised classification and labelling at present contains approximately 2 700 existing and 1 100 new substance entries (covering approximately 8 000 substances). If a dangerous substance not yet included in Annex I is put on the market (as such or contained in a preparation), manufacturers / importers / distributors have to self-classify it according to the criteria in Annex VI. The classification and labelling of preparations subject to Directive 1999/45/EC also uses the criteria set up in Annex VI.

現時点で調和された分類と表示(harmonised classification and labelling)を持つ物質の公開リストである付属書Iには、約2700の既存物質と約1100の新規物質のエントリ(約8000物質)が含まれている。付属書Iにまだ含まれていない危険な物質が、その物としてあるいは調剤に含まれた形で上市される場合には、製造業者/輸入業者/デストリビュータは、付属書VIにしたがって、それを自身で分類(self-classify)しなければならない。指令1999/45/ECにしたがって実施される調剤の分類と表示においても付属書VIIに規定された基準が使用される。

ここでAnnex IもAnnex VIも指令67/548/EEC(いわゆる危険物指令 DSD)の付属書で、Annex IIはいわゆる危険物リストです。このリストに記載されている物質の分類と表示に関する情報はCPS&Q > Classification & Labelling > Search CLASSLABで検索できます。

### 【課題1】

では、そのページでEthanolを検索し、欧州ではどのように分類されているかを調べ、さらに、Rフレーズ、Sフレーズを調べてくださ

い。その結果をIUCLIDのセクション2.2に入力して見ましょう。

【課題2】

次にThalidomide(サリドマイド)(CAS: 50-35-1)はどう分類されるか考えて見ましょう。調べてみてください。

サリドマイドについてご存じない方は次のページをご参照ください。[厚生労働省サリドマイド製剤承認についてのパブリックコメント募集](#) > [サリドマイド製剤安全管理基準書\(案\)](#)あるいは、[Wikipedia](#) > [サリドマイド](#)

---

© 2008 日本化学工業協会



### **E.3. [3] Manufacture, Use and Exposure**

This section covers:

- Description of the technological process(es) used in production.
- Volume information for production, import, own use of the substance and volumes used as intermediates.
- Location of the production and own use sites.
- Availability of the substance in the supply chain.
- Uses and exposure scenarios, exposure estimates.
- Information on waste, biocide product types.
- Specific information for application for authorisation of certain uses of the substance.

## **E.3.5. Identified uses and exposure scenarios**

This section enables to provide:

- Information on exposure: The main use category, the significant route(s) of exposure and the pattern of exposure can be specified.

### **Note**

In the REACH regulation (section 6 of Annex VI), this information is required for substances registered in quantities between 1 and 10 tonnes per year per Manufacturer or Importer. For substances above 10 tonnes, it is not sufficient and exposure scenarios must be prepared.

- Information on the identified uses: This part offers a multi-level structured system enabling to categorise the type of use of the Substance by using standard descriptors instead of free text information. The combination of the four levels of descriptors represents the brief description of use as required in the REACH regulation in section 3.5 of Annex VI and can also be considered as the short title of the exposure scenario that needs to be prepared for substances above 10 tonnes.

### **Caution**

This short title for an exposure scenario and/or the brief general description of a use cannot replace the exposure scenario itself because the exposure scenario provides, where required, a more detailed and quantifiable description of the conditions of use ensuring adequate control of risk. Therefore the short title and/or the brief general description of a use, as provided in IUCLID should rather be seen as a way to describe a use in general in the registration dossier as required in Annex VI of REACH. For more information on exposure scenario and standard descriptors, see "Technical Guidance Document on preparing the Chemical Safety Report (CSR)". For more information see chapter [A.4.1](#) Other technical manuals.

## **Uses and exposure**

---

## ***Overall use and exposure***

---

Enter the information on exposure using the overall use and exposure schema.

## ***Main use category***

---

Select the corresponding main use category per manufacturer or importer. If necessary, more than one checkbox can be selected.

- Industrial use
- Professional use
- Consumer use

## ***Specification for industrial and professional use***

---

Specify how the substance is used during its life-cycle. If necessary, more than one checkbox can be selected.

- Used in closed system
- Use resulting in inclusion into or onto matrix
- Non-dispersive use
- Dispersive use

## ***Significant routes of exposure***

---

### ***Human exposure***

---

Specify the route(s) of exposure. If necessary, more than one checkbox can be selected.

- Oral
- Dermal
- By inhalation

### ***Environmental exposure***

---

Specify the environment compartment. If necessary, more than one checkbox can be selected.

- Water
- Air
- Solid waste
- Soil

### ***Pattern of exposure***

---

Specify the pattern of exposure. If necessary, more than one checkbox can be selected.

- Accidental/infrequent
- Occasional
- Continuous/frequent

### ***Identified uses and exposure scenarios***

---

#### ***Identified use***

---

The Identified use is structured in a hierarchical way aiming at facilitating the indication of "brief general description of use(s)". There are several levels of descriptors:

- The first level concerns the Application technique or process. No standard descriptors have been developed yet, therefore this field is a free text field. Refer to further progress on this aspect in the context of the "Technical Guidance Document on preparing the Chemical Safety Report (CSR)" to use appropriate terminology. For more information see chapter [A.4.1 Other technical manuals](#).
- The second level concerns the use category. Under each Application technique one or more Use category for each type of product (substance as such or in mixture) can be specified for defining further its technical function (e.g. dispersant, polishes and wax blends, etc.). The standard descriptors are based on the UC 55 picklist of the current TGD, the UCN codes applied in the Nordic product registering systems and the ECETOC TRA product category approach. For more detail, refer to the "Technical Guidance Document on preparing the Chemical Safety Report (CSR)". For more information see chapter

#### A.4.1 Other technical manuals.

- The third level concerns the Industry category. Under each Use category, one or more Industry category (i.e. the sector where the Substance or Mixture is applied (e.g. manufacture of textiles) can be specified. The standard descriptors are based on a selection of the most relevant NACE codes. In case of Articles, it is possible to further categorise at that level the type of Article, (e.g. plastic products: toys / rubber products: tyres, etc).


### **Note**

In case of intermediates, i.e. substances that are used only for transformation into another substance, the exclusive use of industry process descriptors might not be appropriate. As the system of standard-descriptors can be expanded with new descriptors, you can always refer to the updated list and write in the freetext field the appropriate.


Click the green **Plus** button  to open the repeatable block to enter information on each identified use. An empty block is now ready to be filled in.

**Brief description:** Enter a description of the identified use of your substance.

### **Caution**

This field is not sufficient for REACH registrations. It is useful for quickly identifying the use as the information entered in this field appears in the title bar when the repeatable block is in condensed format (by using the **Fold** button ). Nevertheless, the hierarchical system of standard descriptors has to be used to properly describe the identified use as required in REACH.

## ***Application technique level***


Click the green **Plus** button  to open the second level repeatable block and enter information on the Application technique/activity. An empty block is now ready to be filled in.

**Application technique/Activity:** Refer to guidance provided in the "Technical Guidance Document on preparing the Chemical Safety Report (CSR)" to enter the appropriate terminology to specify the

Application technique or process in this free text field. For more information on guidance manuals see chapter [A.4.1](#)

[Other technical manuals.](#)

### **Use category level**

Click the green **Plus** button  to open the third level repeatable block and enter information on the Use category. An empty block is now ready to be filled in. If more than one Use category for the same Application technique has to be specified, add a new block for each one.

**Use category:** Select a Use category descriptor in the picklist to indicate the technical function/purpose of the Substance or the Mixture (e.g. coatings, lubricants, adhesives, inks, textile finishing chemicals, alloys) in which the substance is applied for end-use.

#### **Note**

The picklist is divided in two different categories of uses and each item in the list is made of two parts:

1. Technical function of substance: this category describes the function of the substance itself (e.g. || adhesion promoter || technical function of substance).
2. Substances and Preparations for final use: this category describes the type of final product (e.g. || adhesives, sealants || substances and preparations for final use).

If none of the pre-defined descriptor applies, select **other:**. A text field is then activated next to the list field in which you can enter any free text..


#### **Tip**

It is preferable to define the || **other:** || option using the terminology employed in UCN (<http://www.arbejdstilsynet.dk/sw12578.asp#afsa>) or TARIC system. If you need to include an innovative descriptor, use the freetext to describe it.

**Available as substance:** For each entered Use category, select this checkbox to indicate whether the use refers to the substance as such.

Available in mixture: For each entered Use category, select this checkbox to indicate whether the use refers to the substance in a mixture.

### **Industry category level**

Click the green **Plus** button  to open the fourth level repeatable block and enter information on the Industry category. An empty block is now ready to be filled in. If more than one Industry category for the same Use category has to be specified, add a new block for each one.

Industry category: Select an Industry category descriptor in the picklist to indicate in which sectors of economy (including private households, public domain) the Substance or Article is used.

#### **Note**

As mentioned above, this picklist is based on the NACE system nomenclature (statistical classification of economic sectors. See [http://ec.europa.eu/eurostat/ramon/index.cfm?TargetUrl=DSP\\_PUB\\_WELC](http://ec.europa.eu/eurostat/ramon/index.cfm?TargetUrl=DSP_PUB_WELC)), Each Industry category picklist descriptor has three levels of information. See the structure of the following picklist item: || C19 - manufacturing: manufacture of coke and refined petroleum products:||

- C19 : NACE code 2007.
- manufacturing : fist hierarchy level of NACE 2007.
- manufacture of coke and refined petroleum products: detailed level of the manufacture of chemicals (or chemical product).

If none of the pre-defined descriptor applies, select **other**:. A text field is then activated next to the list field in which you can enter any free text.

#### **Tip**

It is preferable to define the ||**other**:|| option using the terminology employed in the NACE system. If you need to include an innovative descriptor, use the freetext to describe it.

Type of article: Select one or more values in the picklist to further describe the type of Articles if appropriate.

## Note

This picklist is linked to the combination of Application technique / Use category / Industry category provided upfront. If the use described by using those picklists results in the incorporation of the Substance in an Article, this should be indicated by using the Article picklist. The picklist covers Article types from which the substance can be intentionally released and Article types from which the substance will not be released or released unintentionally.

No intended release descriptors are based on the product categories used in the Targeted Risk Assessment tool developed by ECETOC (Targeted Risk Assessment, Technical Report 93, December 2004). Intended release descriptors are based on an indicative list of examples discussed in the framework of the TGD for requirements for substances in articles.

## Tip

Each Article type picklist descriptor has several levels of information: the TRA category code (when applicable), the descriptor itself and the information of no intended release and intended release. See the structure of the following picklist item: || C06 - Fabrics, textiles and apparel: bedding and clothing (no intended release):

- C06 : indicates the TRA category (ECETOC's Targeted Risk Assessment Method).
- Fabrics, textiles and apparel: bedding and clothing: Article type descriptor.
- (no intended release): the substance is not released or unintentionally released.

If none of the pre-defined descriptor applies, select **other**. A text field is then activated next to the list field in which you can enter any free text.



### **Tip**

It is preferable to define the || **other**: || option using the terminology employed in the NACE system or the TARIC system. If you need to include an innovative descriptor, use the freetext to describe it.

## **Exposure scenario**



A short title of the exposure scenario can be provided and/or it is possible to attach the exposure scenario document.

### **Note**

For REACH registration dossiers, the exposure scenario has to be included in any case (for substances above 10 tonnes) in the Chemical Safety Report. This IUCLID section offers a repository to attach the exposure scenario related to each identified use for better traceability of your information.

Click the green **Plus** button  to open the repeatable block and enter information on the exposure scenario. An empty block is now ready to be filled in. If more than one exposure scenario has to be specified, add a new block for each one.

**Description** : Enter the short title of the exposure scenario. It can be the combination Application technique / Use category / Industry category (Article types if appropriate).


**Document** : Attach the exposure scenario by clicking the **Attachment** button  and green **Plus** button  from the context menu appearing. Specify the path and the name of the file to be inserted and indicate any remarks if appropriate in the Properties window.

## ***E.3.6. Uses advised against***

This section enables to provide information on use(s) advised against as specified in the REACH regulation (section 3.7 of Annex VI).

The hierarchical structure of this section is similar to the structure of the Part Identified use in the previous section. Moreover the standard descriptor system is strictly the same as for the Identified uses. Please refer to all indications described in chapter [E.3.5. Identified uses and exposure scenarios](#) to fill-in the required information.

## ***E.3.7. Waste from production and use***

This section is a repeatable block section enabling to provide information on waste quantities and composition of the waste resulting from the production and identified use(s) as specified in the REACH regulation (section 3.6 of Annex VI). Click the green **Plus** button  to open the repeatable block and enter information on the waste. An empty block is now ready to be filled in. If more than one type of waste needs to be specified, add a new block for each one.

Set the confidentiality flag and regulatory purpose. For a description of these flags see chapter [D.4.5.7 Flags used for filtering data](#).

**Estimated quantities** : Enter the estimated quantities of waste resulting from the production as well as the identified use(s).

**Composition** : Enter a description of the composition of the waste resulting from the production as well as the identified use(s).

**Remarks** : If necessary provide any additional comment here. (i.e. justify why the information is not available although it is requested by the regulatory programme).

## **E.3.8. Exposure estimates**

This section enables to provide information on the exposure estimates related to production and use.

Set the confidentiality flag and regulatory purpose. For a description of these flags see chapter [D.4.5.7 Flags used for filtering data](#).

### **Exposure related to production**

**Working environment** : The most relevant moments of exposure related to production should be described (for instance during filling, weighing, cleaning activities, sampling for quality and process control, in case of irregularities, etc...). Also, the likely pattern of control (if requested by the legislation) could be provided here.

**Indirect exposure to humans** : Provide the information of the activities of workers related to the processes and the duration and frequency of their exposure to the substance (if available, enter details concerning the number of workers involved, level, route and duration and frequency of exposure, could be provided for both during the working period, and averaged over a longer period during working life). Also, the likely pattern of control (if requested by the legislation) could be provided here.

**Environment** : Describe the duration and frequency of emissions, of the substance to the different environmental compartments, and sewage treatment systems. The dilution in the receiving environmental compartment should be provided. Also, the likely pattern of control (if requested by the legislation) could be provided here.

### **Exposure related to use**

**Working environment** : The most relevant moments of exposure related to the use should be described, for instance, during filling, weighing, cleaning activities, sampling for quality and process control, in case of irregularities, etc. Also, the likely pattern of control should be provided.

















**Consumers** : The most relevant moments of exposure related to the final consumers should be described. Also, the likely pattern of control (if requested by the legislation) could be provided here.


**Indirect exposure to humans** : The most relevant moments of indirect exposure related to humans of the substance (i.e. along the supply chain) should be described. Also, the likely pattern of control (if requested by the legislation) could be provided here.

**Environment :** Describe the duration and frequency of emissions, of the substance to the different environmental compartments, and sewage treatment systems derived from the use of the substance. Also, the likely pattern of control (if requested by the legislation) could be provided here.

## 付録

## IUCLID5のアイコン

アイコン		アイコン	
	Legal Entity		Substance
	Template		Dossier
	Mixture		Category
	Legal entity site		Literature reference
	Reference substance		Manage users, roles, preferences, etc
	Import		Migrate data
	Pre-registration plugin		
	Endpoint study record		Endpoint study summary

	home		Freetext template
	fold		unfold
	link		goto

---

© 2008 日本化学工業協会

付録

IUCLID入力画面の概要

The screenshot shows the IUCLID 5 web application interface for entering data for ethanol. The interface is annotated with several Japanese labels:

- ナビゲータ・ウィンドウ** (Navigator window): Points to the left-hand navigation pane showing a section tree.
- ツール・バー** (Tool bar): Points to the top toolbar of the main content area.
- データ・エントリ・ウィンドウ** (Data entry window): Points to the main form fields for substance identification.
- タブ** (Tab): Points to the 'Reference substance' section header.
- リンク作成** (Link creation): Points to the 'Link creation' icon (two interlocking rings).
- セクション・ツリー・ペイン** (Section tree pane): Points to the left-hand navigation pane.
- リンク・レコードへ移動** (Move to link record): Points to the blue arrow icon.
- 情報ウィンドウ** (Information window): Points to the bottom 'Information' window.
- ステータス・バー** (Status bar): Points to the bottom status bar.

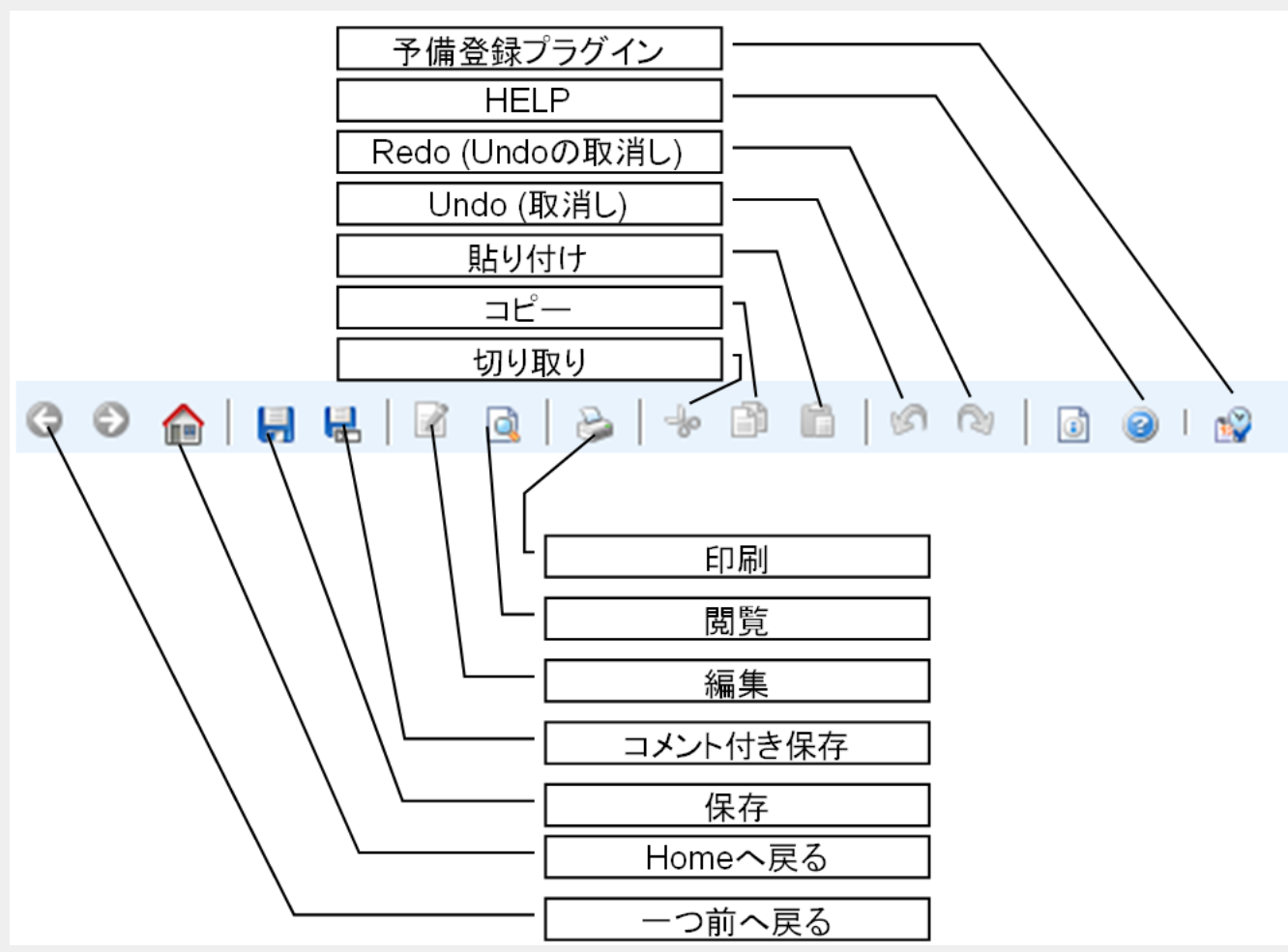
The main form fields visible include:

- Substance identification:** Chemical name (Ethanol), Legal entity flags, Legal entity (Japan Chemical Industry Association / Tokyo / Japan), Third party flags, Third party.
- Role in the supply chain:** Role flags, Role (Manufacturer, Importer, Only representative).
- Reference substance:** ethanol / ethanol / 64-17-5.
- EC number / EC name:** 200-578-6 / ethanol.
- CAS number / CAS name:** 64-17-5 / ethanol.
- IUPAC name:** ethanol.
- Type of substance:** Composition (mono constituent substance), Origin (organic).
- Trade names:** Trade names flag ([CBI] EU: REACH), Spirit.
- Contact person:** Person flags.
- Information window:** Information, Modification history, Access, Consultation, Attachments, Annotations, Validation.



付録

**IUCLID toolbar**



## 謝辞

この資料はECHA発行のIUCLID End User Manual  
および経済産業省発行の同部分訳を活用させて  
いただいております。

2008年10月06日発行 © 日本化学工業協会