

IUCLID 4

ガイダンス文書

2004年8月5日

分冊(Part)：チャプター0 - 緒言

作成者(Prepared by)

**Fraunhofer Institute of Toxicology and Experimental Medicine
(Fraunhofer ITEM)**

Department of Chemical Risk Assessment (化学物質リスク評価部門)

Nikolai-Fuchs-Str. 1

30625 Hannover, Germany

作成依頼者(on behalf of the)

EUROPEAN COMMISSION (欧州委員会)

Institute for Health and Consumer Protection (保健・消費者保護研究所)

European Chemicals Bureau (ECB ; 欧州化学品局)

Via E. Fermi I

I-21020 Ispra (VA), Italy

および

European Chemical Industry Council (CEFIC ; 欧州化学工業連盟)

Avenue Van Nieuwenhuysse, 4 Box 1

B-1160 Brussels, Belgium

協力

Organisation for Economic Co-operation and Development
(OECD ; 経済協力開発機構)

Environment, Health and Safety Division (環境・保健・安全性部門)

2 rue Andre Pascal

75775 Paris Cedex 16, France

プロジェクト概要

文書の表題：	IUCLID 4 ガイダンス文書
日付：	2004年8月5日 注：本版は、2004年1月28日付けドラフトの改訂版である。新たにチャプター0.2が追加された。また、チャプター0.2.3および0.5.4.2.2には、OECDのダウンロードサイトが挿入された。それ以外は些細な編集上の修正や誤植の修正が行われただけである。
依頼者（スポンサー）：	EUROPEAN COMMISSION（欧州委員会） Institute for Health and Consumer Protection（保健・消費者保護研究所）、European Chemicals Bureau（ECB；欧州化学品局） および European Chemical Industry Council（CEFIC；欧州化学工業連盟）
契約機関：	Fraunhofer Institute of Toxicology and Experimental Medicine（Fraunhofer ITEM） Dpt. of Chemical Risk Assessment（化学物質リスク評価部門）（責任者：Inge Mangelsdorf） Nikolai-Fuchs-Str. 1 30625 Hannover, Germany
作成者：	Gerhard Rosner（Fraunhofer ITEM 社顧問） （電子メール：rosner@toxconsult.de）
ファイル名 （注：ダウンロードサイトでは異なるファイル名となっている可能性がある）	IUC4-Chap0-05AUG2004.pdf: チャプター0（緒言） IUC4-Chap1-05AUG2004.pdf: IUCLID チャプター1 IUC4-Chap2-05AUG2004.pdf: IUCLID チャプター2 IUC4-Chap3-05AUG2004.pdf: IUCLID チャプター3 IUC4-Chap4-05AUG2004.pdf: IUCLID チャプター4 IUC4-Chap5-05AUG2004.pdf: IUCLID チャプター5 IUC4-Chap6-10-05AUG2004.pdf: IUCLID チャプター6～10

注：

本ガイダンス文書は通常、オリジナルのレイアウトと画像を保持するため、**Portable Data Format (pdf)**形式) で提供されている。本ファイルを表示させるには、**Version 5.0**以上の**Acrobat(R) Reader**が必要である。**Acrobat(R) Reader**はいつでも**Adobe**社ホームページ (<http://www.adobe.com>) からダウンロードしてインストールすることができる。

序 文

IUCLID ガイダンス文書の初回ドラフトは 2000 年 12 月に発表されている。この初回ドラフト文書も、欧州化学工業連盟 (CEFIC) を代表して Fraunhofer Institute of Toxicology and Experimental Medicine (Fraunhofer ITEM) が欧州委員会の欧州化学品局 (ECB) の協力のもとに作成したものである。初回ドラフト文書には、ICCA の HPV イニシアチブ (HPV initiative) と米国 EPA の HPV 化学物質チャレンジプログラム (HPV Chemical Challenge Programme) の各々に規定された要件を反映して、ほぼすべての SIDS 項目が網羅されていた。初回ドラフト文書は IUCLID version 3.1.1 に対応したものであった。version 4.0 の IUCLID ソフトウェアでは、改訂後のガイダンス文書が利用可能となっていなかったため、暫定措置として初回ドラフト文書がオンラインヘルプ機能に搭載されていた。

本 IUCLID 4 ガイダンス文書は、上記のドラフトを全面的に改訂・拡張したものである。IUCLID version 4.0 で行われた IUCLID サブチャプター入力フォームの変更に完全に対応している。また、本ガイダンス文書では、SIDS に該当しない全項目のサブチャプターや Biocidal Products Directive 98/8/EC (BPD ; 殺生物性製品指令 98/8/EC) の関連から重要とされる「殺生物剤 (biocides)」サブチャプターを含め、すべての IUCLID サブチャプターが網羅されている。

本ガイダンス文書では、IUCLID の技術的な機能や特徴に関する手引きは最小限に留められている。代替として、ECB/Technidata のマニュアルの参照箇所が提示されている。ただし、本ガイダンス文書の付録 3 に掲載した手引きは例外である。この手引きは、IUCLID データセットの作成方法、インポート方法、エクスポート方法、マージ方法に関する詳細なテクニカルガイダンスの提供を目的として OECD のために作成されたものである。その他の 2 つの文書、すなわち付録 1 の「化学物質カテゴリー」と付録 2 の「混合物」は、これらの物質の特殊な提出状況について具体的な手引きを与えるものである。

改訂前の IUCLID ガイダンス文書では、ASCII 形式の電子ファイルとして提供された、体系化されたフリーテキスト用テンプレートの利用が推奨されていた。このようなフリーテキスト用テンプレートは、Robust Study Summary の作成において重要であるため、改訂後の本ガイダンス文書でもフリーテキスト用テンプレートの利用に関する一般的な手引きは提供されている。しかし、サブチャプター別のテンプレートは本ガイダンス文書では提供しない。代替として、改訂後のテンプレートや新たに作成されたテンプレートを OECD のウェブサイトからダウンロードして高生産量 (HPV) 化学物質プログラムに使用できるようにする予定である。この方式の利点は、テンプレートをいつでも更新・補正することができ、しかもテンプレートの修正によって IUCLID 4 ガイダンス文書が陳腐化することがないことである。また、必要に応じ、その他の化学物質プログラムが、そのプログラム用に改変したテンプレートを提供できるようになる (ただし、このようなテンプレートは、合意されたデータフォーマットにできる限り基づいたものであることが望ましい)。

この間、論点は IUCLID version 5 の作成に置かれてきた。新しい版を一般に配布して利用できるようになるまでは、現行の IUCLID version 4 を利用する必要がある。そのため、本ガイダンス文書は、IUCLID ユーザーによるデータセットの収集・編纂を支援するものとなる。しかし、IUCLID ソフトウェアを利用する必要がなく、単に IUCLID データ入力フォームの概要を把握する必要があるだけの人にも有用であると思われる。

目 次

0	緒 言	9
0.1	目 的	9
0.2	本ガイダンス文書の使用法	9
0.3	その他の文書	10
0.3.1	IUCLID 4.0 のオンラインヘルプシステム	10
0.3.2	IUCLIDのテクニカルマニュアル	10
0.3.3	本IUCLID 4 ガイダンス文書の付録	10
0.4	IUCLIDに入力する必要がある情報の種類	11
0.4.1	Study Summary	11
0.4.2	Robust Study Summaryおよびキースタディアプローチ	11
0.4.2.1	HPVCに対するOECDアプローチ	12
0.4.2.2	殺生物剤に関するEUのアプローチ	13
0.5	すべてのIUCLIDサブチャプターに共通する機能についての説明	14
0.5.1	プログラム特異的なサブチャプターの表示モード選択	14
0.5.2	データ入力フォーム (画面)	16
0.5.3	定義済みフィールドへのデータの入力	17
0.5.3.1	ガイダンスの基本方針とフォーマット	18
0.5.3.2	大部分のIUCLIDサブチャプターに共通する定義済みフィールドに関する手引き	19
0.5.3.2.1	「Last Changes (最終変更)」フィールド	19
0.5.3.2.2	「Order Number (整理番号)」フィールド	19
0.5.3.2.3	「Reliabilities (信頼性)」フィールド	20
0.5.3.2.4	「Year (年)」フィールド	20
0.5.3.2.5	「GLP」フィールド	20
0.5.3.2.6	「Test Substance (被験物質)」フィールド	21
0.5.3.2.7	ピックリストフィールドの記入に関する一般的な手引き	22
0.5.3.2.8	テキスト (英数字) フィールドの入力に関する一般的な手引き	23
0.5.3.2.9	数字フィールドの入力に関する一般的な手引き	23
0.5.3.2.10	複数入力フィールドの入力に関する一般的な手引き	24
0.5.3.2.11	数字範囲フィールドの入力に関する一般的な手引き	24
0.5.4	フリーテキストフィールドへのデータの入力	25
0.5.4.1	異なるフリーテキストタイプの利用	25
0.5.4.1.1	フリーテキストタイプ「TS - Test substance (被験物質)」	27
0.5.4.1.2	フリーテキストタイプ「ME - Method (方法)」	27
0.5.4.1.3	フリーテキストタイプ「TC - Test conditions (試験条件)」	28
0.5.4.1.4	フリーテキストタイプ「RS - Results (結果)」	29
0.5.4.1.5	フリーテキストタイプ「RL - Reliabilities (信頼性)」	31
0.5.4.1.6	フリーテキストタイプ「CL - Conclusion (結論)」	33
0.5.4.1.7	フリーテキストタイプ「RM - Remarks (特記事項)」	34

0.5.4.1.8	フリーテキストタイプ「AD - Attached document (添付文書)」	34
0.5.4.1.9	フリーテキストタイプ「RE - Reference (参考文献)」	35
0.5.4.1.10	フリーテキストタイプ「SO - Source (情報源)」	37
0.5.4.1.11	フリーテキストタイプ「CT - Country (国)」	37
0.5.4.2	フリーテキスト用テンプレートのアップロード	37
0.5.4.2.1	改訂前のIUCLIDガイダンス文書のフリーテキスト用テンプレート	37
0.5.4.2.2	最新のフリーテキスト用テンプレートの入手性	38
0.5.4.2.3	フリーテキスト用テンプレートのアップロード法および使用法に関する手引き	38
0.5.5	記録のフラグ付け	39
1	CHAPTER: 一般的情報	32
1.0	IUCLID の見出しなし	32
1.0.1	Applicant and Company Information (申請者および企業に関する情報)	32
1.0.2	Location of Production Site, Importer or Formulator (製造施設、輸入業者、配合業者の所在地)	34
1.0.3	Identity of Recipients (受領者の識別情報)	36
1.0.4	Details on Category/Template (カテゴリー/テンプレートに関する詳細)	37
1.1	IUCLID の見出しなし	38
1.1.1	Substance Identification (物質の識別情報)	38
1.1.2	General Substance Information (一般的な物質情報)	40
1.1.3	Spectra (スペクトル)	41
1.2	Synonyms and Tradenames (同意語および商品名)	43
1.3	Impurities (不純物)	44
1.4	Additives (添加剤)	46
1.5	Total Quantity (総量)	47
1.6	IUCLID の見出しなし	48
1.6.1	Labelling (ラベル表示)	48
1.6.2	Classification (分類)	51
1.6.3	Packaging (包装)	53
1.7	Use Pattern (用途)	54
1.7.1	Detailed Use Pattern (詳細な用途)	56
1.7.2	Methods of Manufacture (製造方法)	58
1.8	Regulatory Measures (規制措置)	59
1.8.1	Occupational Exposure Limit Values (職業上の暴露限界)	60
1.8.2	Acceptable Residues Levels (許容残留レベル)	61
1.8.3	Water Pollution (水質汚染)	62
1.8.4	Major Accident Hazards (重大な偶発事故の有害性)	64
1.8.5	Air Pollution (大気汚染)	65
1.8.6	Listings e.g. Chemical Inventories (リスト [化学物質インベントリーなど])	66
1.9	IUCLID の見出しなし	67

1.9.1	Degradation / Transformation Products (分解生成物)	67
1.9.2	Components (成分)	68
1.10	Source of Exposure (暴露源)	69
1.11	Additional Remarks (追加の特記事項)	71
1.12	Last Literature Search (最新の文献検索)	72
1.13	Reviews (レビュー)	73
2	チャプター：物理化学データ	75
2.1	Melting Point (融点)	75
2.2	Boiling Point (沸点)	77
2.3	Density (密度)	78
2.3.1	Granulometry (粒度分布)	80
2.4	Vapour Pressure (蒸気圧)	82
2.5	Partition Coefficient (分配係数)	83
2.6	IUCLID の見出しなし	85
2.6.1	Solubility in Different Media (異なる媒質における溶解度)	85
2.6.2	Surface Tension (表面張力)	88
2.7	Flash Point (引火点)	89
2.8	Auto Flammability (自然発火性)	91
2.9	Flammability (引火性)	92
2.10	Explosive Properties (爆発性)	94
2.11	Oxidising Properties (酸化特性)	95
2.12	Dissociation Constant (解離定数)	96
2.13	Viscosity (粘度)	98
2.14	Additional Remarks (追加の特記事項)	99
3	チャプター：環境中運命および経路	101
3.1	IUCLID の見出しなし	101
3.1.1	Photodegradation (光分解性)	101
3.1.2	Stability in Water (水中安定性)	105
3.1.3	Stability in Soil (土壌中での安定性)	107
3.2	IUCLID の見出しなし	110
3.2.1	Monitoring Data (Environment) (モニタリングデータ [環境])	110
3.2.2	Field Studies (フィールド試験)	111
3.3	IUCLID の見出しなし	112
3.3.1	Transport between Environ. Compart. (環境区画間の移動)	112
3.4	Mode of Degradation in Actual Use (実際の使用における分解様式)	115
3.5	Biodegradation (生分解)	116
3.6	BOD5, COD or BOD5/COD Ratio (BOD(5)、COD、または BOD(5)/COD 比)	119
3.7	Bioaccumulation (生物蓄積性)	121

3.8	Additional Remarks (追加の特記事項)	122
4	チャプター：生態毒性	124
4.1	Acute/Prolonged Toxicity to Fish (魚類に対する急性/延長毒性)	124
4.2	Acute Toxicity to Aquatic Invertebrates (水生無脊椎動物に対する急性毒性)	127
4.3	Toxicity to Aquatic Plants e.g. Algae (水生植物に対する毒性 [藻類など])	129
4.4	Toxicity to Microorganisms e.g. Bacteria (微生物に対する毒性 [細菌など])	132
4.5	IUCLID の見出しなし	134
4.5.1	Chronic Toxicity to Fish (魚類に対する慢性毒性)	134
4.5.2	Chronic Toxicity to Aquatic Invertebrates (水生無脊椎動物に対する慢性毒性)	136
4.6	IUCLID の見出しなし	138
4.6.1	Toxicity to Sediment Dwelling Organisms (底質中の生物に対する毒性)	138
4.6.2	Toxicity to Terrestrial Plants (陸生植物に対する毒性)	140
4.6.3	Toxicity to Soil Dwelling Organisms (土壌生物に対する毒性)	142
4.6.4	Toxicity to Other Non-mammalian Terrestrial Species (哺乳動物以外のその他の陸生種に対する毒性)	145
4.7	Biological Effects Monitoring (生物学的影響のモニタリング)	147
4.8	Biotransformation and Kinetics (バイオトランスフォーメーションおよびカイネティクス)	148
4.9	Additional Remarks (追加の特記事項)	149
5	チャプター：毒性	151
5.0	Toxicokinetics, Metabolism and Distribution (トキシコキネティクス、代謝、および分布)	151
5.1	IUCLID の見出しなし	154
5.1.1	Acute Oral Toxicity (急性経口毒性)	154
5.1.2	Acute Inhalation Toxicity (急性吸入毒性)	156
5.1.3	Acute Dermal Toxicity (急性経皮毒性)	158
5.1.4	Acute Toxicity, other Routes (急性毒性、その他の経路)	160
5.2	IUCLID の見出しなし	162
5.2.1	(皮膚刺激性)	162
5.2.2	Eye Irritation (眼刺激性)	164
5.3	Sensitization (感作性)	166
5.4	(反復投与毒性)	168
5.5	Genetic Toxicity 'in Vitro' (in vitro 遺伝毒性)	170
5.6	Genetic Toxicity 'in Vivo' (in vivo 遺伝毒性)	172
5.7	Carcinogenicity (発がん性)	174
5.8	IUCLID の見出しなし	176
5.8.1	Toxicity to Fertility (受胎能に対する毒性)	176
5.8.2	Developmental Toxicity/Teratogenicity (発生毒性/催奇形性)	179
5.8.3	Toxicity to Reproduction, Other Studies (生殖毒性、その他の試験)	182

5.9	Specific Investigations (特異的検討)	184
5.10	Exposure Experience (暴露経験)	186
5.11	Additional Remarks (追加の特記事項)	188
6	CHAPTER: 検出・同定のための分析法	190
6.1	Analytical Methods (分析法)	190
6.2	Detection and Identification (検出・同定)	191
7	CHAPTER: 標的生物・用途に対する有効性	193
7.1	Function (機能)	193
7.2	Effects on Organisms to be Controlled (制御対象生物に対する作用)	195
7.3	Organisms to be Protected (保護対象生物)	197
7.4	User (ユーザー)	199
7.5	Resistance (耐性)	200
8	CHAPTER: ヒト・動物・環境の保護に必要な措置	201
8.1	Methods Handling and Storing (取り扱いおよび貯蔵の方法)	201
8.2	Fire Guidance (火災に関する手引き)	203
8.3	Emergency Measures (緊急措置)	205
8.4	Possib. of Rendering Subst. Harmless (無害な物質が精製される可能性)	206
8.5	Waste Management (廃棄物の管理)	207
8.6	Side-effects Detection (副作用の検出)	209
8.7	Substance Registered as Dangerous for Ground Water (地下水にとり有害として登録されている物質)	210
8.8	Reactivity towards Container Material (容器の材質に対する反応性)	213
9	内部(Internal)CHAPTER: 参考資料	214
10	CHAPTER: 要約および評価	215
10.1	End Point Summary (エンドポイントの要約)	215
10.2	Hazard Summary (有害性の要約)	217
10.3	Risk Assessment (リスク評価)	219

0 緒言

0.1 目的

本ガイダンス文書は、IUCLID ソフトウェア version 4.0.x を用いて Study Summary を作成する人を対象としたものであるが、有害性・リスク評価の実施根拠として IUCLID データセットを利用する人も対象としている。本ガイダンス文書は、元々は ICCA の HPV イニシアチブと米国の EPA HPV 化学物質チャレンジプログラムを背景に作成されたものである。しかし、本ガイダンス文書は、IUCLID データセットを使用するその他のプログラム（特に、EU の Biocidal Products Directive [BPD]）にも適用可能なものとなっている。

本 IUCLID 4 ガイダンス文書の目的は次のとおりである。

- IUCLID のさまざまなタイプのフィールドに関し、入力すべき情報の種類について一般的な手引きを提供すること。
- すべての IUCLID サブチャプターの入力フォームについて、詳細な手引きを提供すること。
- 調和された方法による Robust Study Summary の作成（フリーテキスト用テンプレートの使用を含む）について、一般的な手引きを提供すること。

本マニュアルは、指示を与えること(to be prescriptive)を意図したものではない点に留意する必要がある。むしろ、データの要件に関しては、それぞれの化学物質プログラムの関連ガイダンス文書を参照することが望ましい。

0.2 本ガイダンス文書の使用法

本ガイダンス文書は、下記に示す導入チャプター：

チャプター0 緒言（(Robust) Study Summary の定義および原則、すべての IUCLID サブチャプターに共通する機能およびフィールドの一般的な使用法についての説明）

と、Study Summaryの入力に関する具体的な手引き、ならびにIUCLIDの各チャプターにおけるその他の情報が記載されている下記の各チャプターから構成されている¹。

- チャプター1 一般的情報
- チャプター2 物理化学データ
- チャプター3 環境中運命および経路
- チャプター4 生態毒性
- チャプター5 毒性

¹注：チャプター9 は本当のIUCLIDのチャプターではなく、全参考文献の出典を保存するために内部使用されるものである。しかし、フィールドエディタ（FED）ではチャプター9として扱うことができる（テクニカルマニュアル、チャプター0.3.1を参照）

- CHAPTER 6 検出・同定のための分析法
- CHAPTER 7 標的生物・用途に対する有効性
- CHAPTER 8 ヒト・動物・環境の保護に必要な措置
- CHAPTER 10 要約および評価

0.3 その他の文書

0.3.1 IUCLID 4.0 のオンラインヘルプシステム

IUCLID 4.0.x においてインストールされるオンラインヘルプ (Help) システムでは、IUCLID version 3.1.1 に対応した古いガイダンス文書が参照される恐れがあるので注意が必要である。ECB のウェブサイト (<http://ecb.ei.jrc.it>) および/または TECHNIDATA 社のウェブサイト (<http://www.technidata.de>) をチェックしてパッチをあてるか、このマニュアルを保存したフォルダから開く必要がある。

0.3.2 IUCLID のテクニカルマニュアル

本ガイダンス文書は、IUCLID 4.0.x ソフトウェアに添付されているテクニカルマニュアルに取って代わるものではない。必要に応じ、TECHNIDATA 社が欧州委員会²に代わって作成した下記文書も参照することが望ましい：

- IUCLID 4.0 - Getting Started (基本的な使用法 ; Help ボタンからも参照可能)
- IUCLID 4.0 - Reference Manual (参照マニュアル ; Help ボタンからも参照可能)
- IUCLID 4.0 - Data Structure (データの構造)
- IUCLID 4.0 - Frequently Asked Questions (よくある質問)
- IUCLID 4.0 - New Features (新機能)
- IUCLID 4.0 - The IUCLID WWI Report Generator (IUCLID WWI 報告書作成プログラム)
- IUCLID 4.0 - Installation Manual (インストールマニュアル)
- IUCLID 4.0 - Installation - Single User (インストール - 単一ユーザー)

0.3.3 本 IUCLID 4 ガイダンス文書の付録

序文でも触れたとおり、具体的な手引きが必要となる場合は OECD 用に作成された下記付録文書を参照することが望ましい。

付録 1 : 化学物質カテゴリー

付録 2 : 混合物

付録 3 : データセットの作成・インポート・エクスポート・マージ

²注：通常、これらのマニュアルは、IUCLID Installation CD ROM (IUCLIDインストール用CD-ROM) に同梱されている。改訂版や追加文書に関しては、ECBのウェブサイト (<http://ecb.ei.jrc.it>) およびTECHNIDATA社のウェブサイト (<http://www.technidata.de>) を参照のこと。

これらの文書は、OECD の既存化学物質プログラムの公開ウェブサイトからダウンロードできる。現在の URL は次のとおりである：

http://www.oecd.org/document/7/0,2340,en_2649_34379_1947463_1_1_1_37465,00.html

0.4 IUCLID に入力する必要がある情報の種類

0.4.1 Study Summary

OECD スクリーニング用情報データセット (SIDS) や化学物質に関するその他の Dossier で収集される有害性データには、通常、電子化された完全な試験報告書が掲載されることはない。その代わり完全な試験報告書についての要約が作成され、IUCLID データベースにはこれらの要約が掲載される。

本ガイダンス文書では、「Study Summary」という用語には下記の定義が適用される。

- 「Study Summary」という用語は、IUCLID の記録に入力された試験報告書やその他の種類の情報についての要約的記述を意味する。
- Study summary は、きわめて要約的なものでもよく、きわめて詳細なものでもよい。言い換えると、「Study Summary」という用語は、大部分の重要な試験要素の観点から見て文書の完全性を示すものではない。
- きわめて詳細な Study Summary を Robust Study Summary と称する。Robust Study Summary は、いわゆるキースタディを記録する目的で作成が必要となるものであるが、特殊な状況においてはキースタディ以外の試験についても作成することが望ましい。Robust Study Summary とキースタディアプローチ(key study approaches)は、次項で説明するとおり、HPVC プログラムと EU の Biocidal Products Directive のもとで作成される殺生物剤 Dossier の双方において原則的に同等である。

0.4.2 Robust Study Summary およびキースタディアプローチ

キースタディやその他の重要試験に関しては、さまざまな化学物質プログラムによって、所定の「robustness (頑健性)」を備えた Study Summary を作成するよう義務づけられている。しかし、IUCLID データ入力フォーム内の既存の定義済みフィールドで規定される詳細情報のレベルは、試験（有害性およびまたはリスク評価の根拠とするためのもの）について適切に説明するには一般に不十分である。したがって、フリーテキストフィールドに追加情報を入力する必要があるが生じる。特に、生態毒性、環境中運命、毒性に関するデータの場合にはこのことが当てはまる。

 注：OECD SIDS プログラムにおいても、EU の Biocidal Products Directive のもとで作成される Dossier においても、たとえ不十分な試験であっても記録するよう義務づけられている。これは、そのような試験が特定の状況では重要となる可能性があるためのみならず、入手可能なすべてのデータに対して評価者(evaluators) (監督官庁など) が独立して評価できるようにするためでもある。IUCLID 4 のデータ入力フォームで利用できる定義済みフィールドの数は限られているが、そのような試験の

基本情報を収載するには十分であると考えられる。しかし、試験方法の基本方針や重要な試験結果を提示するのに適した定義済みフィールドが存在しない場合には、妥当性のあるフリーテキスト情報を追加することが望ましいケースもある。

0.4.2.1 HPVC に対する OECD アプローチ

OECD³/US EPA⁴の定義によると、Robust Study Summaryは下記の点を特徴とする。

- 「Robust Summary」という用語は、実験または試験を適切に記載するうえで必要とされる専門的情報がすべて盛り込まれた要約に使用される。
- したがって、Robust Study Summary は、完全な試験報告書の目的、方法、結果、結論を適切に反映している。
- 「Robust」という用語は、データのレビュー担当者(data reviewer)が作成した評価コメントのほかに、さまざまな試験項目やパラメーターについて網羅的な記述が必要であるとの事実に基づいている。
- Robust Study Summary の目的は、専門的な有資格者が完全な試験報告書に戻って読み直す必要なく Robust Study Summary だけから当該試験報告書を評価できるだけの、また提案された試験計画を評価できるだけの、十分な情報を提供することである。

SIDS Dossier においては、有害性評価上重要または重要である可能性がある試験を適切に提示するうえで、Robust Study Summary が特に重要である。一般に「キースタディ」にはこのことが当てはまる。しかし、キースタディ以外の試験でも、重要な試験となり得る場合には詳細な記載が求められる場合もある。

キースタディの基準と、詳細度を定義するためのデシジョンツリーは、OECD のマニュアルに記載されている。Robust Study Summary とキースタディという2つの用語は、時に同意語として用いられることもあるが、本来同意語ではない点に注意を要する。キースタディは一般に、特定の項目または特定のサブチャプター (IUCLID の場合) に関するもつとも十分性、信頼性、重要性の高い試験とされる。一般に、キースタディの記載は、常に Robust Study Summary アプローチに準拠して行う必要がある。しかし、欠陥があるものの重要な結果が示されている試験については、試験の短所について焦点を当てた Robust Study Summary を作成する必要もある。

OECD は、SIDS の観点から Robust Study Summary の作成に関する手引きを既に提供済みである。さまざまな SIDS 項目について一連のテンプレートが提供されている。これらの Robust Study Summary 用テンプレートでは、収載すべき情報のタイプに対するプロンプト(prompts)が提示されている。これら

³注：OECD (2002) OECD Manual for Investigation of HPV Chemicals (OECD 高生産量 (HPV) 化学物質点検マニュアル) . SIDS, the SIDS Plan and the SIDS Dossier; Chapter 2.4.3 Robust study summaries (『SIDS、SIDS計画、およびSIDS Dossier』の2.4.3項『Robust Study Summary』) . Organisation for Economic Co-operation and Development, Paris (出典：URL：<http://webdomino1.oecd-org/connet/env/tf-ec.nsf>)

⁴注：US EPA (1999) Draft guidance on developing robust summaries. Office of Pollution Prevention and Toxics, United States Environmental Protection Agency, October 22, 1999 (出典：URL：<http://epa.gov/chemrtk/robsumgd.htm>)。

のプロンプトは、IUCLID の定義済みフィールドに対応したものであるか、もしくはフリーテキストフィールドに入力すべき項目を示している。これらのテンプレートは WORD 形式または pdf 形式で提供されており、電子ツールとして使用することを意図したものではなく、IUCLID の構造的データ入力の基盤として機能することを意図したものである点に注意が必要である。しかし、提示されている構造や項目は、対応する IUCLID サブチャプターの様式を厳密に反映しているわけではない。

0.4.2.2 殺生物剤に関する EU のアプローチ

殺生物剤の Dossier で提供する必要がある Study Summary で求められる詳細情報のレベルは、Technical Notes for Guidance (TNsG) on Dossier Preparation (Dossier 作成に関する手引きのテクニカルノート [TNsG])⁵に記載されている。この殺生物剤の Dossier 作成に関する手引きでは、実際には「Study Summary」という用語が「Robust Study Summary」と同義で使用されている点に注意を要する。BPD Practicalities Guidelines として知られる TNsG の予備的ドラフトでは、Study Summary は Biocidal Products Directive で義務づけられているデータおよび情報を収集・編纂するだけでよいことが示唆されている。これらについては、Biocidal Products Directive は演繹的に(a priori)「実施された試験および用いられた方法またはそれらの方法に関する参考文献についての詳細かつ完全な記載」を義務づけている。

TNsG on Dossier Preparation では、「キースタディ」に関する項が設けられた。この項は、前章で述べた OECD のアプローチに大筋に沿ったものとなっている。しかし、IUCLID の使用に関しては顕著な相違点がある。OECD アプローチを用いる場合以外は、キースタディおよびその他の関連試験の Robust Summary は TNsG on Dossier Preparation で提供されている WORD 標準フォーマットを使用して作成することとされている。また、変異原性、発がん性、催奇形性のエンドポイントで「陽性 (positive)」所見が認められたすべての試験は、これらのテンプレートを用いて要約しなければならない。さらに、実施したすべての試験の簡単な要約（主要な結果と妥当性の証拠などを記載）を IUCLID データベースに収載しなければならない。IUCLID 5 が利用可能となるまでの過渡期には、このツートラック (two-track) アプローチを利用するものとする。

 注：有効な殺生物性物質の通知を目的とした提出には、IUCLID ソフトウェアの利用が必須であるが、データの inputs は定義済みの IUCLID フィールドにある程度限定されている。

⁵注：ECB (2002) Technical Notes for Guidance (TNsG) on Dossier Preparation including Preparation and Evaluation of Study Summaries under Directive 98/8/EC. European Chemicals Bureau (出典：URL：<http://ecb.ei.jrc.it/biocides> リンク：Documents)。

0.5 すべての IUCLID サブチャプターに共通する機能についての説明

このチャプターでは、全サブチャプターまたは大部分のサブチャプターに共通する定義済みフィールド、フリーテキストフィールド、フラグ、およびそれらの特徴について説明する。(電子)フリーテキスト用テンプレートの利用に関する一般的な手引きも示す。

すべてのIUCLIDサブチャプター入力フォームに関する詳細な手引きは、チャプター1~8 と、チャプター9⁶に掲載されている。これらのチャプター（またはサブチャプター）の順番と番号は、IUCLID 4での順番・番号と厳密に一致させてある。

0.5.1 プログラム特異的なサブチャプターの表示モード選択

IUCLID version 4.0 では表示モードオプションが導入され、下図（図1）のスクリーンショットに示すとおり、すべてのサブチャプターを選択することも、特定の化学物質プログラムに関連するサブチャプターだけを選択することもできるようになった。

表示モードは、IUCLID の起動時に表示されるスプラッシュスクリーンから選択することができる（注：スプラッシュスクリーンが表示されない場合は、メニュー機能[Options: Show Overview on Start-up]をアクティブにする必要がある）。表示モードをいったん選択すると、変更するまではその表示モードがアクティブなままとなる。

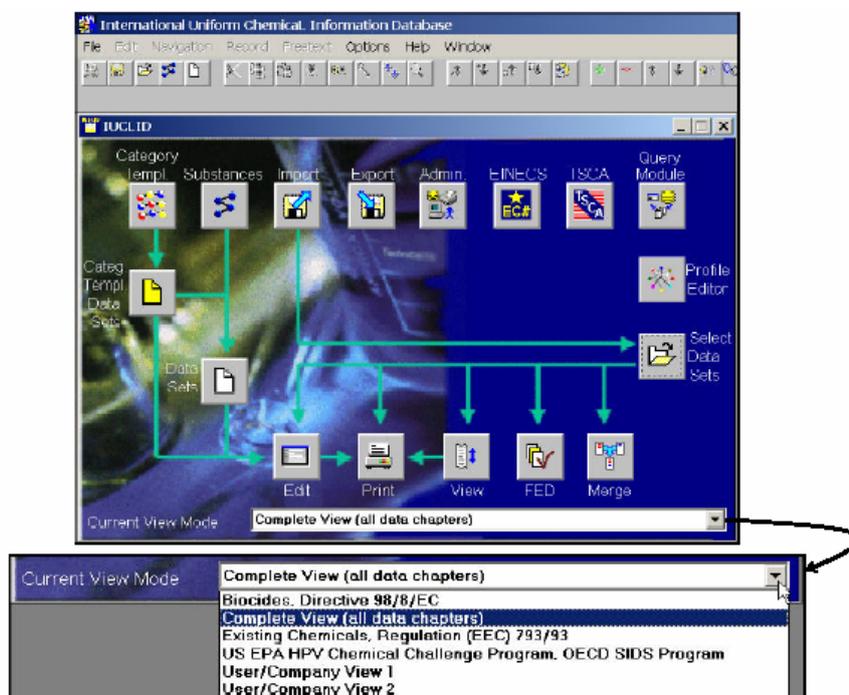


図1. スプラッシュスクリーン（IUCLIDの起動時）で利用可能な表示モードのドロップダウン式リストボックス

⁶注:チャプター9は真のIUCLIDのチャプターではなく、全参考文献の出典を保存するため内部使用されるものである。しかし、フィールドエディタ（FED）ではチャプター9として扱うことができる（テクニカルマニュアル、チャプター0.3.1を参照）。

本ガイダンス文書では、各 IUCLID サブチャプターの手引きに先立って、どの表示モードでサブチャプター入力フォームが入手可能であるのかを示すチェックボックス様インジケータが表示される。下記に例を示す。

このサブチャプターは下記の☑の表示モードで表示される。

<input checked="" type="checkbox"/> EU Biocides	<input checked="" type="checkbox"/> Complete view	<input checked="" type="checkbox"/> EU Existing Chem.	<input type="checkbox"/> OECD / US EPA HPVC
(EU の殺生物剤)	(完全な表示)	(EU 既存化学物質)	(OECD/米国 EPA の HPVC)

 注：

OECD の SIDS マニュアルチャプター2 (2002 年 5 月版) によると、SIDS に該当しない項目番号についても、入手可能なデータは報告することが望ましいとされている。たとえば、皮膚/眼刺激性および皮膚感作性に関するデータを収載することはきわめて一般的に行われている。しかし、表示モード「OECD SIDS」では、表示されるのは厳密に SIDS 項目に限られており、下記のサブチャプターは OECD の SIDS マニュアルで取り上げられているにもかかわらず表示されない。

- 1.6.1 Labelling (ラベル表示)
- 1.6.2 Classification (分類)
- 2.6.2 Surface Tension (表面張力)
- 2.7 Flash Point (引火点)
- 2.8 Auto Flammability (自然発火性)
- 2.9 Flammability (引火性)
- 2.10 Explosive Properties (爆発性)
- 3.1.3 Stability in Soil (土壌中での安定性)
- 3.2.1 Monitoring Data (Environment) (モニタリングデータ [環境])
- 3.6 BOD5, COD or BOD5/COD Ratio (BOD⁵、COD、またはBOD⁵/COD比)
- 3.7 Bioaccumulation (生物蓄積性)
- 4.4 Toxicity to Microorganisms e.g. Bacteria (微生物に対する毒性 [細菌など])
- 4.5.1 Chronic Toxicity to Fish (魚類に対する慢性毒性)
- 4.7 Biological Effects Monitoring (生物学的影響のモニタリング)
- 4.8 Biotransformation and Kinetics (バイオトランスフォーメーションおよびカイネティクス)
- 5.2.1 Skin Irritation (皮膚刺激性)
- 5.2.2 Eye Irritation (眼刺激性)
- 5.3 Sensitization (感作性)
- 5.9 Specific Investigations (特異的検討(Specific Investigations))

上記サブチャプターのいずれか 1 つでもデータを入力する必要がある場合は、表示モードとして「Complete view (完全な表示)」を選択する必要がある。もう一つの方法は、Profile Editor (プロファイルエディタ) においてチャプターのプロファイルを変更することであるが (TECHNIDATA 社の

Reference Manual (参照マニュアル)を参照)、この場合、使用しているIUCLIDインストール環境(IUCLID installation)だけでしか有効ではない⁷。

0.5.2 データ入力フォーム (画面)

各 IUCLID サブチャプターの詳細入力フォームや画面には、汎用のフラグ (Flag) やフリーテキストボックスも設けられているが、大部分はサブチャプター特異的な定義済みフィールドから構成されている。一例として、下記にスクリーンショット (図2) を示す。

データの入力・編集・削除方法、サブチャプター内およびサブチャプター間の移動、データの検索などの手引きに関しては、テクニカルマニュアルを参照することが望ましい(チャプター0.3.2を参照)。

International Uniform Chemical Information Database - [EDIT: 5 Chapter Toxicity]

Enter the number of animals per dose

コメント表示ライン

CAS No. 9999-99-9 EINECS Nam test Locked no
 Substance name Simplex IU Status
 Source 24-JUL-2002 - F or Toxicolog Memo Guidance Doc.

5.1.1 Acute Oral Toxicity Hits 1 5 5

Last Changes 30-JUL-2003 Order Number 1 Reliability 2

Flags
 Critical study for SIDS endpoi

Free texts
 RE Haarmann & Reime 1
 HL Study well docume 1
 RS MORTALITY: I- Tim 1
 TC ADMINISTRATION: 1
 SO Bayer AG Leverkusen

Type LD50
 Value = 2602 mg/kg bw
 Species rat
 Strain Wistar
 Sex female
 No. of animals Doses: 10
 Vehicle peanut oil
 Doses 2000, 2500, 3000, 3500 mg/kg bw
 Method other Year 1974
 GLP no Test Substance other TS: purity 98%

FRM-50016: Legal characters are 0-9 +- E
 Count: 1

エラーメッセージ表示ライン

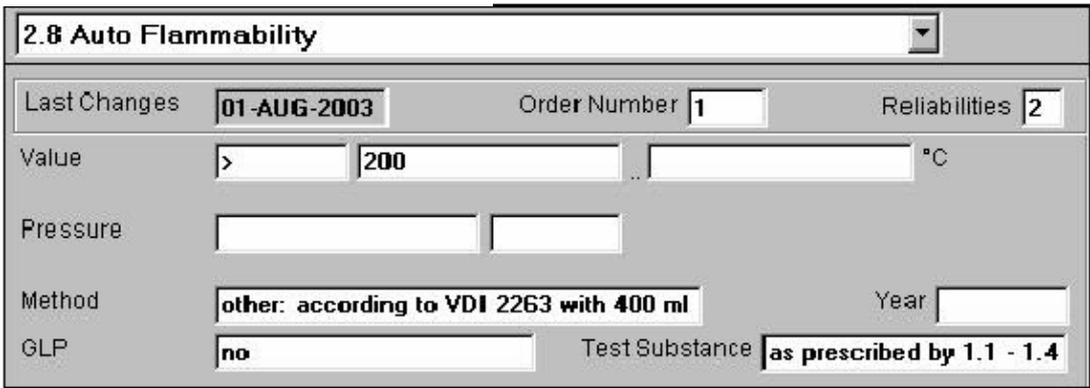
定義済みフィールド フラグ / フリーテキストフィールド

図2. データ入力フォーム (画面) の例: サブチャプター5.1.1「急性経口毒性」

本ガイダンス文書で提示するスクリーンショットの例では、定義済み入力フィールドの部分しか掲載しないが、これは、フラグやフリーテキスト部分のレイアウトはすべてのサブチャプターで共通しているためである。例示の目的のため、スクリーンショットは図3のように実際の例を示している。

⁷注: 表示モードをしかるべく変更できるパッチの開発が示唆されている。TECHNIDATAのウェブサイト (<http://www.technidata.de>) を確認のこと。

データ入力フォーム（画面の例）



2.8 Auto Flammability			
Last Changes	01-AUG-2003	Order Number	1
		Reliabilities	2
Value	>	200	°C
Pressure			
Method	other: according to VDI 2263 with 400 ml		Year
GLP	no	Test Substance	as prescribed by 1.1 - 1.4

図 3. 本ガイダンス文書に提示するデータ入力フォーム（画面）のスクリーンショットの例

0.5.3 定義済みフィールドへのデータの入力

定義済み入力フィールドには、「Type or No. of animals（動物の種類または数）」のような定義済みフィールド名が付与されており、特異的な情報の入力が促される。

フィールドに入力できるのが固定値のみであるか否かによって、定義済み入力フィールドは次の2つの種類に分類することができる。

- **リストフィールド (LIST FIELDS)** : プルダウン式用語リスト（本文書ではピクリストと称する）から、固定された値または項目を選択することによって入力するフィールド。
- **非リストフィールド (NON-LIST FIELDS)** : 予め定義されていないテキストまたは数字を入力するフィールド。通常、入力可能な文字の数と種類（数字、英数字など）だけが制限されている。

IUCLID で設定されているフィールド定義が、定義済み入力フィールドのタイプを規定する。IUCLID は、フィールドタイプに関しては限定的な指示しか行わない。

- 入力フィールドにポインタ（カーソル）を合わせると、データセットのヘッダーの上に**コメント表示ライン**が表示される（図 2 の上の矢印を参照）。コメントの前に「(L)」が付いている場合、そのフィールドがリストフィールドであることを意味する。残念ながら、数字フィールドの場合にはこのような表示はない。したがって、「(L)」がついていないコメントは、その入力フィールドが特定のフィールド制限がある数字フィールドまたは英数字フィールドであることを意味する。
- 許可されていないデータを入力しようとすると、画面下部に**エラーメッセージ**が表示される（図 2 の下の矢印を参照）。

0.5.3.1 ガイダンスの基本方針とフォーマット

本ガイダンス文書では、下例のように、各データ入力フォームの全定義済みフィールドを一覧表示して説明する。

定義済みフィールド			
番号	フィールド名	フィールドタイプ	ガイダンスノート
4	Type (種類)	ピックリスト	試験 (エンドポイント) の種類を選択する: [LD0 / LD100 / LD50 / LDLo] または [other: <テキストを入力>]、たとえば [other: dose 4 g/kg bw]
5	Value (値): a) Precision (精度) b) Lower (下限) c) Upper (上限) d) Unit (単位)	- ピックリスト - 数字 - 数字 - ピックリスト	エンドポイントの値を入力: - サブフィールド a): 選択: [</<=/=/>/>=/ca.] - サブフィールド b): 値を入力。範囲の場合には下限を入力 - サブフィールド c): 範囲の場合には上限を入力 - サブフィールド d): 選択: [mg/kg bw; ml/kg bw] (注: 左記以外の単位の場合は変換すること)
6	Species (生物種)	ピックリスト	選択、たとえば [rat / etc.] または [other: <テキストを入力>]。
7	Strain	ピックリスト	選択、たとえば [Wistar / etc.] または [other: <テキストを入力>]。
8	性別	ピックリスト	選択: [female / male / male/female / no data]
9	動物数	数字	数字を入力する。詳細事項 (性別および/または用量別の動物数の相違など) をフリーテキストタイプ「TC」に記載する。

フィールドタイプおよびフィールドに入力が予想されるデータの種類の両方について説明する。一般に、ガイダンスノートは下記の方式で提示する。

■第1列「番号」: データ入力画面に表示されるとおりの連番が各フィールドに付与される。これらのフィールド番号は、基盤となっている ORACLE テーブル (通常はユーザーによってアクセスされない) で各フィールドに割り当てられている番号とは一致しない点に注意を要する。

■第2列「フィールド名」: データ入力画面に表示されるとおりのフィールド名が付与される。

■第3列「フィールドタイプ」: 下記のフィールドタイプから1つが表示される。

- 日付: 所定のフォーマットにしたがった日付の入力用
- 数字: 数字入力用
- ピックリスト: ピックリストからの値 (項目) の選択用
- テキスト: 数字を含む文字データ (ASCII 形式の文字) の入力用

- 第 4 列「ガイダンスノート」：当該フィールドに入力が予想されるデータの種類について説明する：
 - リストフィールドの場合、ピックリストから値または項目を選択するよう指示される。選択可能なすべての選択肢が表示されるか、より包括的なリストの場合は一部の項目の例のみが表示される。ピックリストの項目は、角括弧に入れて表示する（例： [ambiguous / no / yes]）。
 - 非リストフィールドの場合、数字データと英数字データのどちらが入力可能であるのか表示する。フィールド名から自明でない限り、入力方法と入力例も提示する。

- 複数入力フィールドは、1つのフィールド名から複数の入力フィールドが参照されるフィールド。これらの入力フィールドには連続するアルファベット（a、b、c）などで副次的な番号が付与される（上例のフィールド#5を参照）。

- フリーテキストフィールドの特異的な使用は、明らかにそうすることが賢明であると思われる場合のみに限ることが推奨される。そうでない時には、利用可能な定義済みフィールドが存在しない場合やフィールド上の制約のため情報を定義済みフィールドに入力できない場合に、追加情報入力用の適切なフリーテキストを使用することが望ましい。フリーテキストフィールドの利用方法の詳細についてはチャプター0.5.4を参照のこと。

0.5.3.2 大部分の IUCLID サブチャプターに共通する定義済みフィールドに関する手引き

下記の定義済みフィールドは、ほとんどすべての IUCLID サブチャプターに共通する。最初の 3つのフィールド、すなわち (1) Last Changes（最終変更）、(2) Order Number（整理番号）、(3) Reliabilities（信頼性）の配置はすべてのサブチャプター様式を通じて一定であるが、その他フィールドの番号はサブチャプターによって異なる場合がある点に注意すること。

0.5.3.2.1 「Last Changes（最終変更）」フィールド

番号	フィールド名	フィールドタイプ	ガイダンスノート
1	Last Changes（最終変更）	日付	各 IUCLID サブチャプター画面の最初のフィールド。現在の記録に変更を加えた最後の日付を示す。このフィールドは網掛け表示となっている。これは、このフィールドが自動的に生成され、編集できないことを示している。

0.5.3.2.2 「Order Number（整理番号）」フィールド

番号	フィールド名	フィールドタイプ	ガイダンスノート
2	Order Number（整理番号）	数字	データセット内および報告書内の記録の順番をユーザーが定義する（たとえば、キースタディが必ず最初に表示されるようにする）ために用いる、任意の整理番号（数字 1、2、n）入力用。整理番号が入力されていない記録は、整理番号が入力されている記録の後に表示される。整理番号が全く割り当てられていない場合は、論理的なパターンではソートされない場合がある。 ヒント：整理番号を 10 番おきに割り当てる方法が有用である場合がある。こうしておけば、追加の記録をあとから挿入することが可能となる。IUCLID の番号再割り当て（Re-numeration）機能を用いることもできる（メニューバー：[Edit: Renum Sort]。この機能を用いれば、サブチャプターのすべての整理番号を 10 番おきに割り当てなおすこ

とができる。

注：IUCLID では、データセットをマージした場合にソースデータセットに由来する記録の整理番号が自動的に調整されることはない。それどころか、マージにより整理番号の重複が起こり得る。希望する順序に記録を配列するには、予めソースデータセットとターゲットデータセットの双方に適切な整理番号を割り当てておくか、マージ作業後にターゲットデータセットの編集を行う必要がある。化学物質カテゴリー（付録 1 を参照）や混合物（付録 2 を参照）を扱う場合には、この点はもっとも重要な事項となる場合がある。

0.5.3.2.3 「Reliabilities (信頼性)」フィールド

番号	フィールド名	フィールドタイプ	ガイダンスノート
3	Reliabilities (信頼性)	ピックリスト	このフィールドでは、次の信頼性コードの 1 つを割り当てることによりデータの信頼性を提示する：[1/2/3/4]。これらのコードは、それぞれ次の説明に該当する：(1) 妥当性あり（無制限） / (2) 妥当性あり（制限付き） / (3) 妥当性なし / (4) 分類不能。 フリーテキストタイプ「RL」に、各化学物質プログラムの要件に応じて詳細な説明を記入することが望ましい（0.5.4.1.5 を参照）。

0.5.3.2.4 「Year (年)」フィールド

番号	フィールド名	フィールドタイプ	ガイダンスノート
#	Year (年)	日付	OECD の HPVC プログラムおよび EU の Biocidal Products Directive のテクニカルマニュアルではどちらも、「試験が完了した年 (Year of study completion)」を入力することが望ましいとされている。 このフィールドの本来の意味は、IUCLID のヘルプ表示ラインが推奨するとおり、「使用した方法の発表年または更新年 (Year of publication or update of the method used)」である。したがって、まさしくこの意味での「Year (年)」は、使用したテストガイドラインに委ねられている。これが本フィールドの正確な意味であることを示す間接的エビデンスとして、「Method (方法)」フィールドが 2 つあるという理由から「Year」フィールドが 2 つ設けられている IUCLID サブチャプターがいくつか存在する点が挙げられる (3.1.3、3.6 など)。

*) 「#」は、フィールド番号がサブチャプターの入力フォームごとに異なる可能性があることを意味する。

0.5.3.2.5 「GLP」フィールド

番号	フィールド名	フィールドタイプ	ガイダンスノート
#	GLP	ピックリスト	優良試験所基準 (Good Laboratory Practices ; GLP) に準拠したか否かを提示する。ピックリストから適切な選択肢を選択する：[no / no data / yes (非準拠 / データなし / 準拠)] GLP に準拠していない場合、フリーテキストタイプ「ME」に詳細な説明を記入することができる (0.5.4.1.2 を参照)。

*) 「#」は、フィールド番号がサブチャプターの入力フォームごとに異なる可能性があることを意味する。

0.5.3.2.6 「Test Substance (被験物質)」 フィールド

番号	フィールド名	フィールドタイプ	ガイダンスノート
# *)	Test Substance (被験物質)	ピックリスト	<p>このフィールドは、ピックリスト式のフィールドとしてチャプター2～5 (具体的な試験または研究で使用した被験物質の識別情報の提示を目的としたチャプター) で使用することができる。ピックリストから下記の選択肢を選択することが可能である。</p> <ul style="list-style-type: none"> - [as prescribed by 1.1 - 1.4 (1.1～1.4 で規定)]。次の説明が付記されている : [The properties of the substance used for testing are described in chapter 1 "General Information" (試験で使用した物質の性状はチャプター1「一般的情報」に記載されている) - [no data (データなし)] - [other TS (その他の TS)]。次の説明が付記されている : [use freetext type TS and indicate the substance used. Indicate e.g. purity, impurities, solvents, vehicle and formulation (フリーテキストタイプ「TS」を使用し、使用した物質を提示する。純度、不純物、溶剤、溶媒、配合などを記載すること)] <p>[other TS (その他の TS)] を選択した場合、コロン (:) を挿入することにより、続いて説明文を入力することができる。特に、文字数が定義済みフィールドの制限字数である 255 字を超える場合は、被験物質の (追加) 情報をフリーテキストタイプ「TS」に記入することが望ましい (チャプター0.5.4.1.1 を参照)。</p> <p>ヒント : このフィールドのピックリストは、本来 EU 既存化学物質プログラムの要件に適合するようにデザインされたものであるが、すでに最新版ではなくなっている。真に「no data (データなし)」の選択肢が該当する場合を除き、被験物質の識別情報や規格は必ず明示するよう検討することが望ましい。これらの IUCLID サブチャプター1.1～1.4 に記載されている規格が、その試験で使用されている規格と全く同一であることは稀であるため、ピックリストの選択肢のうち「as prescribed by 1.1 - 1.4 (1.1～1.4 で規定)」の使用は避ける。チャプター1 は機密情報を含んでいる場合や、その他のチャプターとは独立して作成されている場合があるため、毒性などのデータを入力した人や審査担当者は、サブチャプター1.1～1.4 に記載されている情報を把握できていないことさえある。</p> <p>化学物質カテゴリー (付録 1 を参照) または混合物 (付録 2 を参照) に関連するデータセットをマージしようとする場合には、使用された被験物質の明確な表示がもっとも重要な事項となる。仮想上の物質「Samplex IU」に関する IUCLID データセットで要約された任意の試験において使用された被験物質の記載例を次に示す。</p> <ul style="list-style-type: none"> - 「other TS: Samplex IU, purity not stated (その他の TS : Samplex IU、純度の記載なし) - 「other TS: Samplex IU, purified commercial product (その他の TS : Samplex IU、精製された市販製品) - 「other TS: Samplex IU, purity >99% (その他の TS : Samplex IU、純度 >99%) - 「other TS: Product xyz (min. 95% samplex IU, white crystals, heavy metals not detectable; impurities: x% substance A (CAS No. xy), x% substance B (CAS No. xy); no other data) (その他の TS : 製品 xyz (samplex IU 95%以上、白色結晶、重金属未検出; 不純物: 物質 A x% (CAS 番号 xy)、物質 B x% (CAS 番号 xy); その他のデータなし) <p>注 : 情報がきわめて詳細な場合、すなわち 255 字の制限字数を越える場合は、規格に関する追加の詳細情報をフリーテキストタイプ「TS (被験物質)」に記入すること (0.5.4.1.1 を参照)。</p>

*) 「#」は、フィールド番号がサブチャプターの入力フォームごとに異なる可能性があることを意味する。

0.5.3.2.7 ピックリストフィールドの記入に関する一般的な手引き

ピックリスト式のフィールドでは、固定された値や項目をプルダウン式のピックリスト（用語リスト）から選択しなければならない。テクニカルマニュアルでも IUCLID の機能に関して説明が行われているが（チャプター0.3.2を参照）、下記のヒントも有用と思われる。

- ピックリストを開くには、フィールドをダブルクリックするか、<F7>キーを押すか、ツールバー上の対応するアイコンをクリックする。
- 各ピックリストの第二 column には説明が記載されている場合があるが、一部しか表示されない時がある。このような場合は、ホットキー[CTRL]+[e]を押すだけで説明文の全文を表示させることができる（図4を参照）。
- クローズド・ピックリストでは、テキストを追加入力することができない。特定の入力項目が利用できない場合は、そのフィールドは空欄のままとし、かわりに適切なフリーテキストタイプに情報を入力する。
- オープン・ピックリストの場合は、ピックリストにない項目を入力したり、説明を入力したりすることができるよう、「generic（汎用的な）」選択肢 [other（その他）] が用意されている。この選択肢は、[other (calculated)（その他（算出））] や、[other (measured)（その他（測定））] の場合もある。
- 「other（その他）」の選択肢に入力したテキストは、「other」の後にコロンが挿入されている場合に限り有効である（例：「other: no guidelines available（その他：利用可能なガイドラインなし）」）。
- 「other」の入力は、直接編集することができる。また、ホットキー[CTRL]+[e]を押してエディタを開くことにより、編集することもできる（図5を参照）。編集モードでは、キャリッジリターン/ラインフィードを挿入することもできる。ダブルクリック+<F7>キーでプルダウンリストが開く。

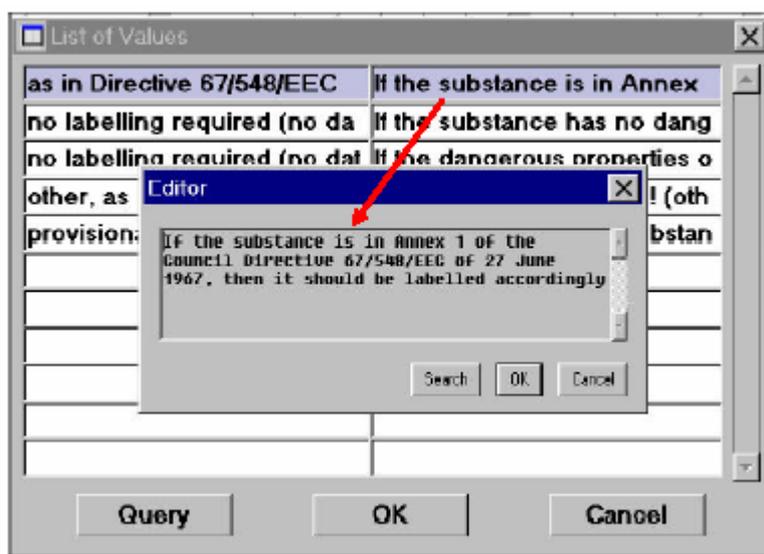


図4. エディタを開いて説明文を全文表示させたピックリストのスクリーンショット例

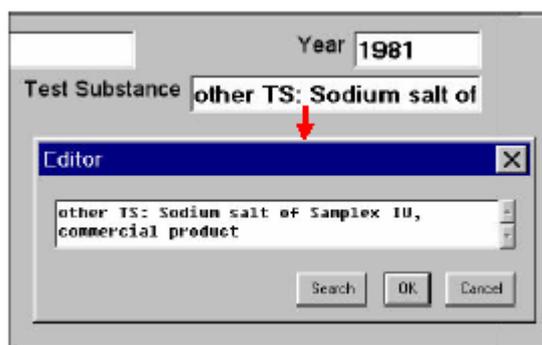


図 5. テキストエディタで表示された「other TS (その他の TS)」
入力事項のスクリーンショット例

0.5.3.2.8 テキスト (英数字) フィールドの入力に関する一般的な手引き

定義済みフィールド (本ガイダンス文書ではテキスト入力式フィールドを指す) には、任意のテキストや数字を入力することができる。通常、制限されるのはフィールドの入力文字数だけである (最長 255 文字)。ただし、太字や下線のような書式設定を行うことはできない。入力できるのはプレーンな ASCII テキストだけである。キーボードから入力可能な特殊文字 (μ 、²、³など) も、通常、入力可能な ASCII テキストに該当する。

英数字フィールドの入力内容をすべて表示させるには、フィールドをダブルクリックするか、<F7> キーを押すか、ツールバー上の対応するアイコンをクリックするか、ホットキー[CTRL]+[e]を押す。編集モードでは、キャリッジリターン/ラインフィードを入力することができ、読みやすくすることができる。

0.5.3.2.9 数字フィールドの入力に関する一般的な手引き

数字フィールドに入力できるのは数字だけである。基本となるバリデーションルール (underlying validation rule) によっては、制限を受ける場合がある。したがって、IUCLID が入力を受け付けなかった場合は、IUCLID の画面下部に表示されるエラーメッセージを読む必要がある。たとえば、数字フィールドにテキストを入力した場合、下記のメッセージが表示される：

「FRM-50016: Legal characters are 0-9 -+ E (FRM-50016 : 入力可能な文字は 0~9、-、+、E のみ)」

つまり、入力が可能なのは 0~9 の数字と、10 の累乗の指数部 (任意) のみである。「E」は次のように入力する：2E2 (2×10^2 を意味する)。数字フィールドの基本となるバリデーションルールは、必ずしも合理的 (plausible) ではない点に注意が必要である。たとえば、「No. of animals (動物数)」のフィールドでは、指数の入力は (負の値が認められているにもかかわらず)、ほとんどの場合必要ない。

適宜、数字の前にマイナス記号を入力することが可能である。

1 つの数字しか入力できないという厳格な制約は、定義済みフィールドにデータを入力できないため代わりにフリーテキストに入力するという煩わしさの原因となる場合もよくある。たとえば、動物数は雌雄で匹数が異なる場合がある。また、範囲で示される場合もある。このような場合は、「Males: 10; females: 8 (雄 : 10 匹 ; 雌 : 8 匹)」、「5-10 (5~10)」などと記載する。

0.5.3.2.10 複数入力フィールドの入力に関する一般的な手引き

複数入力フィールドは、複数のサブフィールドから構成されている。IUCLID の入力フォームでは、1 つのフィールド名だけが表示される。本ガイダンス文書では、すべてのサブフィールドに追加のフィールド名が割り当ててある。

下記に、複数入力フィールドに関する手引きの例を示す。

番号	フィールド名	フィールドタイプ	ガイダンスノート
6	Concentration 1 st (濃度 1)		最初の測定値について、投与の種類、濃度、投与経路を入力する :
	a) Treatm. (投与の種類)	- ピックリスト	- サブフィールド a) : 投与の種類を選択 : [Induction / Challenge]
	b) Conc. (濃度)	- 数字	- サブフィールド b) : 数値
	c) Unit (単位)	- ピックリスト	- サブフィールド c) : 選択 : [% / % active substance / undiluted / no data] または [other: <テキストを入力>]
	d) Applic. (投与経路)	- ピックリスト	- サブフィールド d) : 投与経路を選択 (例 : [intracutaneous / occlusive epicutaneous / etc.] または [other: <テキストを入力>])。]

0.5.3.2.11 数字範囲フィールドの入力に関する一般的な手引き

数字範囲フィールドは、複数入力フィールドの一種である (上記を参照)。数字範囲フィールドの代表的な構成を下記に示す。

- サブフィールド「Precision (精度)」: IUCLID 文書では「Scope (スコープ)」と称する。関連シンボル (「<」、「<=」など) 選択のためのピックリストを伴う。
- サブフィールド「Lower (下限)」: 使用可能な単一の数値を入力するか、範囲の下限を入力する (該当する場合)。
- サブフィールド「Upper (上限)」: 範囲の上限のみを入力する (該当する場合)。範囲を提示する必要がない場合は、このサブフィールドは空欄のままとすること。
- サブフィールド「Unit (単位)」: このサブフィールドを伴う場合が多い。

下記に、数字範囲フィールドに関する手引きの例を示す。

番号	フィールド名	フィールドタイプ	ガイダンスノート
#	Value (値) :		エンドポイントの値を入力 :
	a) Precision (精度) -	ピックリスト	- サブフィールド a) : 選択 : [$</<=</>/>=</ca.</math>]$
	b) Lower (下限) -	数字	- サブフィールド b) : 値を入力。範囲の場合には下限を入力
	c) Upper (上限) -	数字	- サブフィールド c) : 範囲の場合に上限を入力
	d) Unit (単位) -	ピックリスト	- サブフィールド d) : 選択 : [mg/kg bw; ml/kg bw] (注 : 左記以外の単位の場合は変換すること)

0.5.4 フリーテキストフィールドへのデータの入力

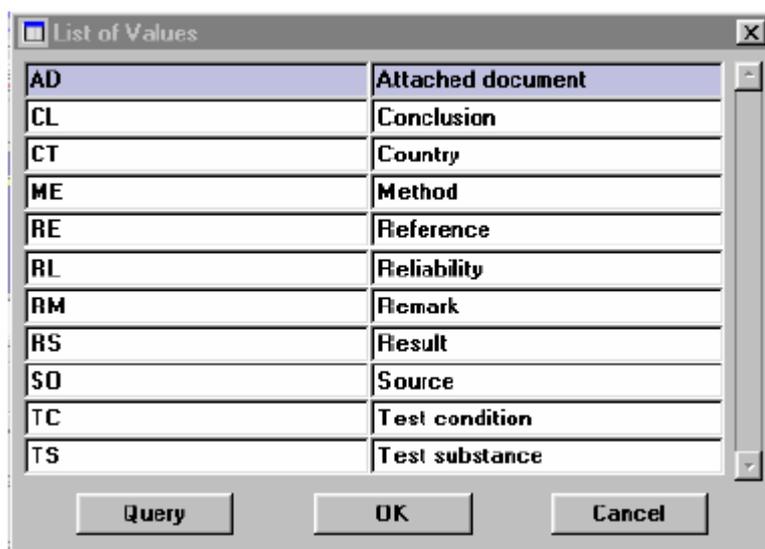
フリーテキスト機能を用いることにより、定義済みフィールドに入力した情報に加えて、任意の情報を記録することができる。この機能は、利用可能な定義済みフィールドが存在しないデータに使用するためのものである。しかし、フィールドの制約のため既存の定義済みフィールドへ入力できないデータにも適用できる。特に、Robust Study Summary の場合にはこれが当てはまる (チャプター0.4.2を参照)。

フリーテキストフィールドでは、予め定義された様式や構造に配慮することなく情報を文字どおり「自由 (free)」なテキストとして入力することができる。これは、現在までに作成されてきた IUCLID データセットの大部分に共通する、いわば「conventional (従来の)」のフリーテキスト入力法である。IUCLID データセットを作成した人によって、体系化されていないきわめて長文のテキストが記載されている場合もあれば、多少なりとも体系化された見だし付きのフリーテキストや、簡単なキーワードだけが記載されている場合もある。

フリーテキストの入力方法には原則として何ら規則がないが、下記のサブチャプターで説明するとおり、ある程度調和された様式で体系化されたフリーテキスト入力を行う方法は存在する。

0.5.4.1 異なるフリーテキストタイプの利用

フリーテキストに入力する前に、適切なフリーテキストタイプをまず選択しなければならない。フリーテキストタイプは、下記のプルダウンリストから選択するか、種類を示すコード (「RE」など) をタイプすることにより選択する。



サブチャプターによっては、すべてのフリーテキストタイプを利用できない場合もある。フリーテキスト機能の利用に関する詳しい技術的引きは、テクニカルマニュアル（チャプター0.3.2）を参照のこと。

下記の場合には、異なるフリーテキストタイプを使用する必要がある。

- Study Summary の主要部（すなわち、被験物質、方法、試験条件、結果、結論、参考文献）が反映されるようなフリーテキストの基本構成を実現する場合。
- 試験の信頼性に関する説明的情報を、フリーテキストタイプ「RL - Reliabilities（信頼性）」に別途記載する場合。
- フリーテキストタイプ「RM - Remarks（特記事項）」に特記事項を追加記入する場合。
- フリーテキストタイプ「AD - Attached document（添付文書）」を利用して、添付文書を個別に扱う場合。
- [Navigation: by freetext] 機能を利用してフリーテキストの検索を促進する場合。

 注：同じ種類のフリーテキストを、無制限に複数使用することができる。たとえば、特定の Study Summary についての複数の参考文献を、それぞれ個別のフリーテキストに入力することができる。これは、同じ種類の複数のフリーテキストに、きわめて包括的な情報を入力する際にも有用である（「TC - Test Conditions（試験条件）」など）。IUCLID サブチャプターに複数の文書を添付する場合、「AD - Attached Document（添付文書）」のフリーテキストを複数作成することは義務でさえある。そうしない場合、保存されている文書が上書きされることになる。

異なるフリーテキストタイプへの情報入力方法に関する下記の説明は、一般に、これらのフリーテキストタイプの使用が許可されている IUCLID サブチャプターに適用される。

0.5.4.1.1 フリーテキストタイプ「TS - Test substance (被験物質)」

当該試験で使用された被験物質の識別情報および規格を提示することが望ましい。チャプター0.5.3.2.6に概説したとおり、ほとんどの場合は、定義済みフィールド「Test substance (被験物質)」に短く記載するだけで十分である。より詳細な情報は、フリーテキストタイプ「TS」に下記の構成にしたがって体系的に記入することができる。

キーワード案	ガイダンスノートおよび例
IDENTITY (識別情報) :	対応する定義済みフィールド「Test substance (被験物質)」に入力した情報に追加
PURITY (純度) :	% w/w、% v/v、g/kg などの単位で記載
IMPURITY (不純物) /ADDITIVE (添加剤) /その他 :	不純物、添加剤、溶剤などについて、それぞれ適切な識別情報を明記
Common name (一般名)	
- IUPAC name (IUPAC 名) :	
- CAS number (CAS 番号) :	
- EINECS name (EINECS での名称) :	欧州化学物質プログラム (European Chemicals Programme) などで義務づけられている場合
- EINECS number (EINECS 番号) :	欧州化学物質プログラム (European Chemicals Programme) などで義務づけられている場合
- IUCLID identification number (IUCLID 識別番号) :	当該化学物質が IUCLID システムに収載されている場合
- その他の番号 / 名称 :	具体的に記載
- Concentration in test substance (被験物質中の濃度) :	% w/w、% v/v、g/kg などの単位で記載
- Function (機能) :	開始物質の不純物、合成副生成物、消泡剤、安定化剤など
ANY OTHER INFORMATION (その他の情報) :	化学物質プログラムで義務づけられている場合は、LOT/BATCH NUMBER (ロット/バッチ番号) などを明記

0.5.4.1.2 フリーテキストタイプ「ME - Method (方法)」

フリーテキストタイプ「ME - Method (方法)」および「TS - Test conditions (試験条件)」は、どちらも使用した方法に関するものである。本ガイダンス文書では、下記の慣例(conventions)が提唱されている。

- フリーテキストタイプ「TC - Test conditions (試験条件)」は、広い意味で試験条件 (試験条件、供試動物、試験手順などの試験系) に関連する重要情報の記入に供することが望ましい。これは、OECD の Robust Study Summary 用テンプレートで提案されている「Remarks field for Test Conditions (試験条件に関する特記事項フィールド)」に沿ったものである (チャプター0.4.2.1 を参照)。
- フリーテキストタイプ「ME - Method (方法)」は、定義済みフィールド「Method (方法)」に対応するフィールドと見なす。テストガイドラインに準拠していない場合や、対応する定義済みフィールドのピックアップにないテストガイドラインに準拠した場合に、使用した方法について、より一般的な説明を記載する目的のみに使用することが望ましい。認知されたテストガイドラインが使用されている場合、試験の信頼性やデータの解釈に重大な影響を及ぼす恐れがある逸脱が

あれば、その点について記載することが望ましい。逸脱の詳細については、フリーテキストタイプ「TS」にも記載することが望ましい。

キーワードを使用することにより、フリーテキストの入力をより体系的に行うことができる。フリーテキスト「ME」の記入例を下記に示す。

キーワード案	ガイダンスノートおよび例
METHOD FOLLOWED (準拠した方法) :	<p>[試験は一般に受け入れられている科学的原則に則って実施された]</p> <p>[フリーテキスト「TC」に記載した詳細事項を除き、方法は原則的にガイドライン ...に等しい]</p> <p>[計算方法は...に準拠]</p> <p>比較できる特定のテストガイドラインがない場合は、下例のような簡単な説明を記載する。</p> <p>[光化学的に生成されたヒドロキシルラジカルを伴う物質 X の蒸気相の反応に関する速度定数は、Atkinson (1994 年) に準じて算出]</p> <p>[Mackay、レベル III、Syracuse Research Center の Epiwin Version 3.05 に準じて算出]</p> <p>[物質 X の生分解は、モデル通気汚水貯留池(model aerated sewage lagoon)で検討]</p> <p>[密閉フラスコを用いた半止水式試験 ; 48 時間後に被験溶液を交換]</p> <p>[全身暴露法(whole-body method)により、ラットに物質 X のガスを 4 時間単回暴露した]</p>
DEVIATIONS FROM GUIDELINE (ガイドラインからの逸脱) :	<p>[なし]</p> <p>[動物数 ; 症状観察]</p>
GLP :	<p>GLP に準拠していない場合、下記のように正当性を提示する。</p> <p>[試験は GLP の作業条件下に実施されたが、まだ証明されていない]</p> <p>[GLP は試験実施時には義務づけられていなかった]</p> <p>[GLP の精神(Spirit)に準拠]</p>

0.5.4.1.3 フリーテキストタイプ「TC - Test conditions (試験条件)」

このフリーテキストタイプには、特に下記のような場合に詳細な説明を記載することができる。

- 定義済みの IUCLID フィールドでは、試験手順に関連するすべての重要情報を入力するには不十分である場合。
- テストガイドラインからの重要なプロトコールの逸脱について詳細に記載する必要がある場合 (ガイドライン試験の場合)。

- 準拠したテストガイドラインには（厳密な）定義が行われていないため、特異的な試験パラメーターについて記載する必要がある場合。
- 標準的なテストガイドラインに準拠して実施されていないため、試験方法について完全かつ詳細な記載が義務づけられる場合。

Robust Study Summary ではない場合、フリーテキストの記載は最小限の範囲で構わない。しかし、適切な定義済みフィールドがないため、フリーテキストに記録するしかない試験を包含するサブチャプターもある（チャプター3.3.2 の吸脱着試験など）。

Robust Study Summary の場合、フリーテキスト「TC」に入力する情報は、OECD の Robust Study Summary 用テンプレートなどで示されているように、キーワードや見出し（または小見出し）を用いて体系的に記載することが望ましい。IUCLID version 3.1.1 に対する以前の IUCLID ガイダンス文書では、ASCII 形式の電子ファイル（いわゆるサンプルフリーテキスト）として提供された、体系化されたフリーテキスト用テンプレートの使用が奨励され、このようなテンプレートの使用実績が積み重ねられてきた。チャプター0.5.4.2.2 で説明するとおり、改訂後のテンプレートや新たに作成されたテンプレートを、OECD のウェブサイトからダウンロードできるようにする予定である。

水生無脊椎動物に対する急性毒性に関する Robust Study Summary における下記のフリーテキスト入力例は、このような定義済みのテンプレートを使用して作成したものである。提示されている見出し（または小見出し）はいずれも OECD の HPVC プログラムでは必須とされていない点に注目する必要がある。

Test condition (試験条件)	: TEST ORGANISMS (供試生物) - Source/supplier (供給源/供給者) : NIES - Feeding (給餌) : <i>Chlorella vulgaris</i> , 0.1~0.2 mgC/day/individual STOCK AND TEST SOLUTION AND THEIR PREPARATION (ストック溶液および被験溶液、ならびにその調製) - Vehicle, solvent (溶媒、溶剤) : 溶剤は非使用 DILUTION WATER (希釈水) - Source (供給源) : 脱塩素した水道水 - Hardness (硬度) : CaCO ₃ として 65 mg/L 試験系 - Renewal of test solution (被験溶液の交換) : 週 3 回 - Exposure vessel type (暴露に用いた容器の種類) : 1000 ml ガラスビーカーに 800 ml の被験溶液を充填 (開放系) - Number of replicates/individuals per replicate (連数/1 連あたりの個体数) : 4 連 / 10 匹 - Test temperature (試験温度) : 19.5~20.7°C - Dissolved oxygen (溶存酸素) : 6.1~8.2 mg/L - pH : 7.5~8.0 - Intensity of irradiation (照明強度) : < 1000 lx - Photoperiod (光周期) : 16 時間 : 8 時間の明暗周期 TEST PARAMETER (試験パラメーター) : 1 成体あたりの平均累積産出幼体数 (繁殖) MONITORING OF TEST SUBSTANCE CONCENTRATION (被験物質濃度のモニタリング) : GC で週 2~3 回測定 (試験水の交換前後)
------------------------------	--

0.5.4.1.4 フリーテキストタイプ「RS - Results (結果)」

少なくとも Robust Study Summary の場合は、定義済み入力フィールドに入力可能な情報のほかに、信頼性および使用に関するデータの評価に必要なその他の情報をフリーテキスト様式に記載することが望ましい。

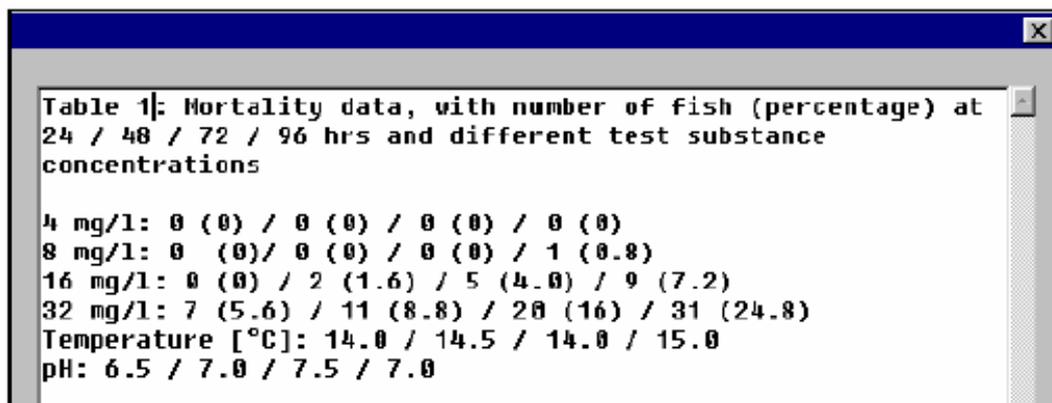
水生無脊椎動物に対する急性毒性に関する Robust Study Summary における下記のフリーテキスト入力例は、定義済みのテンプレートを使用して作成したものである（チャプター0.5.4.2.1 を参照）。提示されている見出し（または小見出し）はいずれも OECD の HPVC プログラムでは必須とされていない点に注目する必要がある。

Result (結果)	: RESULTS (結果) : EXPOSED (暴露) - Nominal/measured concentrations (名目/実測濃度) : 0/<0.4 mg/L (対照区) ; 100/80~97.4 mg/L (試験区) ; (調製時は名目濃度の 84~97% ; 試験水の交換直前は名目濃度の 80~97%) - Effect data (Immobilisation) (影響に関するデータ [不動化]) : 定義済みフィールドを参照 - Biological observations (生物学的所見) : Cumulative numbers of dead parental Daphnia (親ミジンコの累積死亡数) : 対照区 : 1 (死亡率 : 3%)、100 mg/l : 1 (死亡率 : 3%) Time of the first production of young (最初の幼体産出までの期間) : 8 日 Mean cumulative numbers of young produced per adult (1 成体あたりの平均累積産出幼体数) : 対照区 : 29.4 (14 日目)、85.7 (21 日目) ; 100 mg/l : 31.8 (14 日目)、80.4 (21 日目) - Other effects (その他の影響) : 親ミジンコの LC50 (14/21 日目) : >100/>100 mg/L (名目濃度に基づいて算出) RESULTS CONTROL (対照区の結果) : 対照区と 100 mg/l 試験区のデータの間に統計学的に有意な差は認められなかった。対照区の反応は適切(satisfactory)であった。
--------------------	---

結果のデータを表形式で提示することが有用な場合もある。表形式での提示方法には次の 2 つの方法がある。

■フリーテキストフィールド内に単純な表を挿入：

大きな問題の 1 つは、上記の WWI Report Generator⁸ で作成した場合、入力画面では等幅フォントで表示されるにもかかわらず、印字すると通常プロポーショナルフォントで出力される点である。したがって、作成する表は、図 6 に示すように、非常に単純な表や擬似的な表(quasi-tables) (タブ位置を固定する代わりにスラッシュを使用した表など) に限った方が有用と思われる。



⁸注：建て前としては、WWI report generatorは所定のサブチャプター-の特定のフリーテキストタイプにおける等幅間隔の定義に対応するためのものである。しかし、WWI report generatorは、このフリーテキストタイプに入力されるあらゆるテキストに適用される。

図 6. フリーテキストフィールド内に入力した単純な表の例

WORD 文書または EXCEL 文書として表を添付：

より複雑な表や数字を盛り込むには、フリーテキストタイプ「AD - Attached document (添付文書)」を使ってワープロファイルやワークシートファイルを添付することができる。この機能の欠点は、添付した文書が報告書中には表示されず、個別に出力しなければならない点である。一方で、データの表示という意味では明らかな利点がある。

0.5.4.1.5 フリーテキストタイプ「RL - Reliabilities (信頼性)」

データの質の判定については他所で提供されている手引きを検討することが望ましい。SIDS Dossier の場合、いわゆる Klimisch アプローチおよび米国 EPA のアプローチについて、OECD⁹により手引きが提供されている。

米国 EPA の HPV チャレンジプログラムの一環として開発されたアプローチは、データの信頼性に関する初期スクリーニング基準に基づいている。たとえば、溶媒を使用した場合、その試験は溶媒対照についてチェックされる。原則として、方法および/または報告の欠陥について評価が行われる。使用する基準は、Klimisch アプローチで適用される基準と同等であるが、包括的な信頼性コードは割り当てられない。

Klimisch¹⁰は、定義済みの IUCLID のフィールド「Reliability (信頼性)」で選択可能なコードと原則として一致する下記のスコアリングシステムを提案している。

⁹ OECD (2002) OECD Manual for Investigation of HPV Chemicals (OECD 高生産量 (HPV) 化学物質点検マニュアル) . SIDS, the SIDS Plan and the SIDS Dossier; Chapter 3.1 Guidance for determining the quality of data for SIDS dossiers: (reliability, relevance and adequacy) (『SIDS、SIDS計画、およびSIDS Dossier』の 3.1 項『SIDS Dossiers用データの質判定の手引き (信頼性、妥当性、十分性)』) . Organisation for Economic Co-operation and Development, Paris (出典：URL：<http://webdomino1.oecd-org/comnet/env/tf-ec.nsf>)

¹⁰ Klimisch H.-J., Andreae M. & Tillmann U. (1997) A systematic approach for evaluating the quality of experimental toxicological and ecotoxicological data. Reg. Toxicol. Pharmacol. 25: 1-5

- **1 (信頼性あり (無条件))** : 短いフリーテキストを入力する。下記に例を示す。
 - ガイドライン試験 (OECD など)
 - ガイドライン試験と同等
 - 国内基準 (DIN など) に準拠した試験手順

(IUCLID で用いられている表現 : 1 = 妥当性あり (無制限))

- **2 (信頼性あり (制限付き))** : 短いフリーテキストを入力する。下記に例を示す。
 - 容認可能な、詳細に記録された出版物/試験報告書であり、基本的な科学的原則を満たしている
 - 提示された基本的データ : ガイドライン/基準と同等
 - ガイドライン試験と同等であり、制約は容認できる

(IUCLID で用いられている表現 : 2 = 妥当性あり (制限付き))

- **3 (信頼性なし)** : より詳細なフリーテキストが必要。下記に例を示す。
 - 方法はバリデーション済みでない
 - 評価を行うには記録が不十分
 - 現行の標準的方法の重要な基準を満たしていない
 - 重要な方法上の欠陥
 - 不適切な試験系

(IUCLID で用いられている表現 : 3 = 妥当性なし)

- **4 (分類不能)** : 短いフリーテキストを入力する。下記に例を示す。
 - 短い抄録しか入手できない
 - 二次文献 (総説、表、書籍など) しか入手できない

(IUCLID で用いられている表現 : 4 = 分類不能)

定義済みフィールド「Reliabilities (信頼性)」に信頼性コードを入力した場合 (0.5.3.2.3 を参照)、選択した信頼性コードの理論的根拠をフリーテキストタイプ「RL - Reliabilities (信頼性)」に記載することができる。このようなフリーテキストの記載は、米国 EPA の妥当性基準および/または上記の Klimisch の基準に基づくことが可能である。化学物質プログラムに応じて、その他の基準を適用してもよい。

Klimisch らが提示している上記のフリーテキスト記載例のうち 1 つを単に記入することが慣例となっている (「Relevant methodological deficiencies (重要な方法上の欠陥)」など)。一目瞭然である場合にはこれで十分かもしれないが、提出物の評価者らは、所定の理論的根拠の根底にある事実について具体的に記載することを提唱している。特に、信頼性コード 2 または 3 が割り当てられた試験の場合には、関連する重要な制約や欠陥を記載することが望ましい。フリーテキストの入力例を下記に示す。

- [方法は、テストガイドラインのもとに包含できないものの、詳細に記録されており、科学的に容認できる]

- [方法は容認できない：溶媒対照が使用されていないか、報告されていない；投与群と比較して、対照群の生存期間が著しく長い]
- [国内の標準的ガイドラインに準拠した試験；物質の濃度について分析的モニタリングが行われていないが、別途実施した静水(standing water)での安定性試験結果から、96 時間の暴露期間中に被験物質の有意な損失は生じないことが示されているため、本試験は妥当であると考えられる]
- [現行の基準と同等の方法であり、詳細な記録も行われているが、重大な欠陥がある：被験物質の濃度について分析的モニタリングが行われていない；被験物質には分解の可能性がある；試験期間も長いことから、有効濃度は当初の名目濃度とは著しく異なる可能性がある]
- [評価を行うには記録が不十分]

0.5.4.1.6 フリーテキストタイプ「CL - Conclusion（結論）」

試験の結論が提示されている場合には、Study Summary を作成した企業のコメントとともに記載することが望ましい。結論についての簡単なフリーテキスト記載は、多くの場合、定義済みの IUCLID フィールドに記載した結論のいかんにかかわらず有用である。これは、定義済みフィールドに記載されたデータは特異的な影響に関連したものでない場合が多いためである。たとえば、定義済みフィールドに NOAEL が提示されていたとしても、それが何に基づいたものであるのかは明確ではない。また、性別特異的な差は、通常フリーテキストを通じて提示することしかできない。

結論の例：

- [肝臓の組織病理的影響（肝海綿状変性(spongiosis hepatis)）に関連するもっとも低い LOAEL は、200 ppm（16 mg/kg/d - 雄のみ）である]
- [111 ppm での組織病理所見に基づくと、NOAEL は 11 ppm であり、これは 1.1 mg/kg bw/d（雄）および 1.2 mg/kg bw/d（雌）に相当する]
- [試験結果は被験物質の易生分解性を示している]

下記を区別する必要がある。

- 試験結果から導かれる結論：フリーテキストタイプ「CL - Conclusion（結論）」に記載する。
- 試験の信頼性に関する結論：フリーテキストタイプ「RL - Reliabilities（信頼性）」に記載する。
- 十分性（すなわち、有害性/リスク評価の目的におけるデータの有用性）に関する結論：適切なフラグ（チャプター0.5.5 を参照）を用いて提示する。追加の説明をフリーテキストタイプ「RM - Remarks（特記事項）」に記載してもよい。

 注：フリーテキストタイプ「AD」（下記参照）を除くと、タイプ「CL」は文書を添付できる唯一のフリーテキストタイプである。監督官庁が IUCLID の Study Summary を評価し、その評価を IUCLID のデータセットに収載したいと考えた場合などにこのフリーテキストタイプは有用である。

0.5.4.1.7 フリーテキストタイプ「RM - Remarks (特記事項)」

このフリーテキストタイプは、説明を要するその他の任意のコメントに使用することができ、**Robust Study Summary** に該当しない場合にも利用できる。たとえば、複数の試験の結果が一致していることに言及することができる。エンドポイントに対するキースタディが存在せず、多少なりとも妥当性がある複数の試験をプールすることにより「**weight-of-evidence analysis** (証拠の重み分析)」を行うことができる場合に、このフリーテキストタイプが重要となる可能性がある。

0.5.4.1.8 フリーテキストタイプ「AD - Attached document (添付文書)」

このフリーテキストタイプは、IUCLID の記録またはデータセットに任意の文書を添付する際に使用する (WORD 文書または EXCEL 文書など)。オリジナルの試験報告書を、pdf ファイルや bmp ファイルの形式で添付することも原則として可能である。添付文書機能に関する詳細な技術的手引きは、本ガイダンス文書の範囲外である。しかし、この機能を利用する際には、下記のヒントを念頭におくことが望ましい。

- 報告書に自動的に組み込まれるのは画像ファイルタイプのみであるが、WinWord report generator を使用した場合に限られる。デフォルトでは、表示されるのはビットマップ (bitmap) ファイル (拡張子: .bmp) だけである。しかし、www.ini ファイルに画像タイプを記述すれば、ビットマップ以外の画像ファイルタイプも表示することができる (Technidata 社の Reference Manual、チャプター8.2 を参照)。
- bmp タイプのファイルは非常に大きい記録容量を必要とするため、記録容量が小さい jpeg ファイル形式 (拡張子: .jpg) を利用することを推奨する。
- 画像ファイル以外の添付ファイルタイプは、報告書と一緒に出力されない。つまり、個別のファイル管理が必要となり、非常に不便な場合がある。
- IUCLID の内部ファイル管理では、オリジナルのファイル名は使用されず、各添付文書に内部名が割り当てられる。IUCLID データセットをエクスポートする場合には、添付文書もすべてエクスポートされるが、その際、添付文書には内部 IUCLID 名が付与される。
- タイプ「AD」のフリーテキストフィールドに何らかの入力が行われていることが、すなわち文書が添付されていることを自動的に意味するわけではない。文書が添付されていることを示す厳密な標識は存在しない。
- 添付されている文書を削除し、代わりに別の文書を添付するには、まず説明文が記載されたフリーテキストをすべて削除してから、新しいフリーテキストを記入する必要がある！
- 逆に、文書を添付する際に、IUCLID によって自動的に入力されたオリジナルのファイル名を削除することも可能である。しかし、添付されていた文書はそのまま残存することとなる。
- 添付文書の編集は、次に示すような深刻な問題を引き起こす可能性がある：添付された WORD 文書は「display (表示)」コマンドで開くことができ、しかも (!) 外見上は編集・保存することができる。IUCLID は、あたかも編集が可能ないようにふるまい、直接的な編集が不可能であることを指摘する手引きやエラーメッセージは一切表示されない！しかし、当該文書を再度表示させると、変更した箇所は全く反映されていない。これは、AD を IUCLID がその内部データベース

に保存しているからである。いったん保存されると、AD は編集することができない。表示ボタンを押しても、テンポラリーファイルが作成されるのみである。

■AD の編集方法には原則として次の2つの方法がある。

- (i) 添付文書を削除し、オリジナルの文書を編集したのち、新たに添付しなおす。
- (ii) データセットをエクスポートし、添付文書ファイルを編集したのち (IUCLID はオリジナルのファイル名を変更してしまうため、ファイルを探し出すのは容易ではない!)、AD を含むエクスポートファイルを再インポートする。

0.5.4.1.9 フリーテキストタイプ「RE - Reference (参考文献)」

このフリーテキストタイプは、Study Summary の完全な参考文献の出典を示すためのものである。各記録ごとに、著者、年、標題、試験施設名、試験施設の報告書番号、報告日を入力することにより参考文献を特定する (出版されている場合はジャーナル名、巻：ページを列挙する)。Robust Study Summary の場合は、試験完了日も記載することが望ましい。試験報告書はのちに書き直されたものであるが、試験自体は何年も前に実施されている場合には、この点は特に重要である。IUCLID の定義済みフィールド「Year (年)」の意味についてはチャプター0.5.3.2.4 も参照のこと。

特定の試験について記載する際に利用可能な参考文献が複数存在する場合は (オリジナルの試験報告書や発表文献など)、これらすべての参考文献を、個別の「RE」フリーテキストフィールドに入力することが望ましい。

一部のサブチャプター (特にチャプター1 の一部サブチャプター) では、参考文献を提示する必要はない。

現在までのところ、IUCLID のデータセットに入力する参考文献に関しては調和された様式は用いられていない。多くの場合、参考文献は情報源からカット&ペースト操作によりコピーされており、したがって様式も転写されている。

化学物質プログラムによって特異的な規則が定められていない限り、下記の慣例を尊重することが推奨される。

- 全著者名およびイニシャル；頭文字は大文字記載
- 報告年または発表年
- 文献または試験報告書の完全な標題
- 試験報告書の場合：試験施設名、試験施設の報告書番号
- 発表文献の場合：ジャーナル名 (International Serials Data System [ISDS] に準拠して略記)、巻番号 (太字)、最初と最後のページ番号
- 書籍、会議議事録などの場合：編集者、会議の正式名称 (該当する場合)、会議の開催場所および日付 (該当する場合)、出版地、巻番号 (該当する場合)、ページ番号
- 括弧内：企業の報告書等の場合は「(unpublished) (未発表)」。

例：

Watanabe I, Parker KL, Paul JP (1990) Residue analysis of synthetic pyrethroids. Pure Appl. Chem. **62**: 522-526

Parker EM, Smiles HP, Miller P (1989) Substance x: test of sensitizing effect on guinea pig (Maximization test according to Magnusson and Kligman). General Laboratories Inc., Report No: 2778 (unpublished)

Budavari S, ed. (1986) The Merck Index: an encyclopedia of chemicals, drugs and biologicals. 12th ed., Merck Co. Inc., New Jersey, p. 577

 ヒント： [Freetext: List freetext of same type]機能を使用することにより、データセットに入力済みの参考文献をコピーすることができる。フィールドエディタ（FED）を使って重複を解消することも可能である。

 ヒント： 次の方法により、記録に付記された番号の代わりに完全な参考文献の出典を出力することができる。

IUCLID 4 では、出典（参考文献）番号のみが記録と一緒に出力される。したがって、特定の出典番号にどのような参考文献が割り当てられているのか探し出すには、報告書中を行ったり来たりしながら読む必要が生じる。報告書のレイアウトをカスタマイズして、報告書末尾の参考文献リストのほかに完全な参考文献の出典も記録と一緒に出力されるようにすることが可能である。デフォルトレイアウトの場合には比較的簡単であるが、Winword 報告書レイアウトの場合にはかなり複雑である。報告書のレイアウトの調整は、使用している IUCLID インストール環境だけでしか有効でない点を十分認識しておく必要がある。

下記の手順によりデフォルトレイアウトを調整することができる。

- 任意のテキストエディタを使用して「field default.rtf」を開く（フォルダー-X : ¥IUCLID4¥Layout¥engにある）。
- 「RE」を検索して（大文字の「RE」だけが検索されるようにに「Match case」オプションにチェックを入れる）、「CRE」に置換する。
- 「RB」を検索して（大文字の「RB」だけが検索されるようにに「Match case」オプションにチェックを入れる）、「CRB」に置換する。
- 以上！

2つの参考文献の最初の250字が全く同一の書誌データであるという稀なケースでは、誤った出典が出力される恐れがあるため注意が必要である。IUCLID は次いでそれらを重複と見なし、参考文献を記録の最初に出力する。明瞭な書誌データを使用することにより、このような落とし穴を避けることができる。

0.5.4.1.10 フリーテキストタイプ「SO - Source (情報源)」

通常、データセットをマージする場合にこのフィールドが重要となる。データセットをマージする際に、ターゲット側の(destination)データセットの「Source (情報源)」フリーテキストフィールドにソースデータセットの企業名が自動的に入力される。このフリーテキストタイプは、手動による情報入力に用いるべきでない。特に、このフリーテキストタイプに参考文献を入力してはならない（過去にこのような例が散見された）。

0.5.4.1.11 フリーテキストタイプ「CT - Country (国)」

このフリーテキストタイプは、特定の国を示すために用いることができる。これは、IUCLID データセットのチャプター1で、特定の規制がどの国に適用されているのか示す際に最適と思われる。

0.5.4.2 フリーテキスト用テンプレートのアップロード

0.5.4.2.1 改訂前の IUCLID ガイダンス文書のフリーテキスト用テンプレート

IUCLID version 3.1.1 に対する改訂前の IUCLID ガイダンス文書では、体系化されたフリーテキスト用テンプレート（いわゆるサンプルフリーテキスト）の使用が奨励されており、一部の IUCLID サブチャプター（特に SIDS 項目）についてはフリーテキストタイプ「TC」および「RS」のテンプレートが提供されていた。その意図は、サブチャプター特異的な項目（見出し）を備えたフリーテキスト用テンプレートをアップロードすることにより、Robust Study Summary の作成を標準化することにあつた。これらは特定のデータのプロンプトとして機能する。このテンプレートは、情報の強制的な入力の指示を意図したものではない。むしろ、Study Summary の作成者が、提供された見出しを採用・修正、あるいは削除することが望ましい。必要な場合は、項目の追加も行う必要がある。

改訂前の IUCLID ガイダンス文書で提供されていたフリーテキスト用テンプレートは、OECD の Robust Study Summary 用テンプレートと、Biocidal Products Directive 98/8/EC に適用される Technical Notes for Guidance on Dossier Preparation（Dossier 作成に関する手引きのテクニカルノート）内で WORD の標準形式として提案されているテンプレートを雛型として作成された。IUCLID におけるデータ入力はすべて ASCII 形式で行わなければならないため、これらのフリーテキスト用テンプレートが保存された電子ファイルはいずれも単純な ASCII 形式 (.txt) の文書である。したがって、入力事項の書式設定（太字、下線、斜体など）はできない。そのため、かわりに下記のように大文字と単純なブレット（ハイフン）が使用されている。

- 大見出し/アイテムを大文字で入力
- 小見出しのブレット/サブアイテムを小文字で入力

フリーテキストタイプ「TC」に関する以下のテンプレートの例は、そのような ASCII 文書の一部を示したものである。

*5_8-TC (サンプルフリーテキスト: 該当しない場合は、このヘッダーおよび任意の項目を削除すること) *****

TEST ORGANISMS (供試生物):

ADMINISTRATION / EXPOSURE (投与/暴露)

- Type of exposure (暴露の種類):
- Duration of test/exposure (試験/暴露期間):
- Treatment (投与):
- Control group and treatment (対照群および投与):
- Vehicle (溶媒):
- Concentration in vehicle (溶媒中の濃度):
- Total volume applied (総投与量):
- Doses (用量):
- Concentrations (濃度):

0.5.4.2.2 最新のフリーテキスト用テンプレートの入手性

本 IUCLID 4 ガイダンス文書にはフリーテキスト用テンプレートが添付されていない。その代わりに、電子テンプレートをインターネットからダウンロードできるようにする予定である。

この方式にはさまざまな利点がある。

- テンプレートをいつでも更新・補足することができる。
- テンプレートが修正されても、IUCLID ガイダンス文書は最新の状態を維持することができる。
- 異なる化学物質プログラムによって、そのプログラム用に改変したテンプレートが提供できるようになる (ただし、このようなテンプレートは、合意されたデータフォーマット一式に基づいたものであることが望ましい)。

OECD の HPVC プログラムにおいては、フリーテキスト用テンプレートはおそらく OECD のウェブサイトを提供されることとなる。

これらの文書は、OECD の既存化学物質プログラムの公開ウェブサイトからダウンロードできる。現在、下記の URL において、改訂前の IUCLID v.3.1.1 ガイダンス文書のフリーテキスト用テンプレート (「サンプルフリーテキスト」) が提供されている:

http://www.oecd.org/document/7/0,2340,en_2649_34379_1947463_1_1_1_37465,00.html

0.5.4.2.3 フリーテキスト用テンプレートのアップロード法および使用方法に関する手引き

[**Freertext: Load File**]機能を使って、任意のフリーテキスト用テンプレートを IUCLID のフリーテキストにアップロードすることができる。[**Freertext: Load File**]機能は、メニューまたはツールバー (アイコン: ) から利用できる。

0.5.5 記録のフラグ付け

IUCLID では、サブチャプターの記録ごとに 1 つまたは複数のフラグを割り当てることができる。フラグは、特定の目的のために記録に標識を付ける際に用いられる。フィルターオプションを設定することにより、選択した記録のサブセットのインポートや出力を行うことができる。

現在、IUCLID では下記のフラグをプルダウン式のピックリストから選択することができる。

用語 (ピックリスト)	説明
confidential (機密)	機密扱い
non confidential (公開)	機密扱いではない
WGK (DE)	WGK (DE) に準拠した分類に使用する
TA-Luft (DE)	TA-Luft (DE) に準拠した分類に使用する
Material Safety Dataset (物質の安全性データセット)	Material Safety Dataset に使用する
Risk Assessment (リスク評価)	リスク評価に使用する
Directive 67/548/EEC (指令 67/548/EEC)	Directive 67/548/EEC に準拠した分類に使用する
Critical study for SIDS endpoint (SIDS エンドポイントにとって重要な試験)	HPV プログラムに使用する
temporary flag (一時的なフラグ)	特定の入力事項について出力する際に使用する

「temporary flag (一時的なフラグ)」は、記録を一時的に標識するために用いることができる。たとえば、IUCLID データセットの一部の記録のみを出力する際などに用いる。

追加のユーザー定義フラグを定義することもできる。しかし、そのようなフラグは、他の IUCLID インストール環境に同じフラグが定義されている場合にしかインポートされない (Technidata 社の Reference Manual を参照)。

上記のフラグの一部は、履歴に関して重要性がより高い点に注意すること。HPVC プログラムにとってもっとも重要なフラグは「Critical study for SIDS endpoint」である。Robust Study Summary はこのようにフラグ付けされる。しかし、このフラグは、重要と考えられるその他の記録 (SIDS に該当しないサブチャプターの記録や、一般的な物質情報に関する記録も含め) の標識にも使用される。

残念ながら、さまざまな化学物質プログラムで使用可能な「Robust Study Summary」や「キースタデイ」の汎用フラグは存在しない。殺生物剤の登録を補う IUCLID データセットでは (チャプター 0.4.2.2 を参照)、Robust Study Summary が WORD 形式または rtf 形式で提出されているデータの標識に「リスク評価」フラグを使用することができる。

「confidential (機密)」フラグを利用することにより、2 つの独立したインポートファイルまたは報告書 (一方は機密データ、もう一方は公開データ) を作成することができる。しかし、現在の IUCLID version では、特異的なフィールドや Robust Summary の部分を機密扱いとするようにフラグ付けすることはできない。