

IUCLID 4 ガイダンス文書の付録 2

混合物

バージョン：2003年12月11日

作成依頼者 (Prepared on behalf of the)

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

作成者 (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

The screenshot shows a window titled "Substance Administration" with a list of substance IDs on the left and a detailed view of the selected substance on the right. The selected substance is 64742-61-6, identified as "Paraffin waxes" and "Microcrystalline".

Type	Value	CR	Prior.	Lang.
CAS No.	64742-61-6	1		
EINECS Name	Slack wax (petroleum)	2		
EC No.	265-165-5	3		
TSCA Name	Slack wax, petroleum	4		
Substance Group	11C	104		

Buttons: List available data sets

プロジェクト概要

文書の表題 :	IUCLID 4 ガイダンス文書の付録 2 : 混合物
バージョン :	最終ドラフト (OECD による校正用)
日付 :	2003 年 12 月 11 日
作成者 :	Gerhard Rosner (Fraunhofer ITEM 社顧問) (電子メール : rosner@toxconsult.de)
契約機関 :	Fraunhofer Institute of Toxicology and Experimental Medicine (Fraunhofer ITEM) Nikolai-Fuchs-Str. 1 30625 Hannover, Germany Dpt. of Chemical Risk Assessment (化学物質リスク評価部門) (責任者 : Inge Mangelsdorf)
依頼者 (スポンサー) :	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) (責任者 : Bob Diderich, 電子メール : bob.diderich@oecd.org.)

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

本マニュアルは、「IUCLID 4」ガイダンス文書の付録として作成された。本マニュアルは、「IUCLID 4」ソフトウェアのユーザーによるさまざまな種類の混合物（複雑な混合物 (complex mixtures) および調製品 (preparations) を含む単純な混合物 (simple mixtures)) に関するデータの取り扱いを支援することを目的としたものである。単純な混合物についても取り上げたが、これはこのような混合物が殺生物性製品にとって重要であるためである。

本文書では、主に実施可能なワークフローについて説明しており、他の技術的機能に関する詳細な説明については他のマニュアルを照会している。これらのマニュアルには下記が含まれる。

- 「Getting Started (基本的な使用法)」 マニュアル*
- **IUCLID 4** ガイダンス文書
- **IUCLID 4** ガイダンス文書の付録 1 : 『化学物質カテゴリー』
- **IUCLID 4** ガイダンス文書の付録 3 : 『データセットの作成・インポート・エクスポート・マージ』

注 :

IUCLID のカテゴリー機能の利用に関して本文書に記載した手引きは、指示を与えること (to be prescriptive) を意図したものではない点に十分留意すること。むしろ、本マニュアルは、推奨されているワークフローを提示することを目的としたものである。

考えられるいくつかの提出シナリオ (submission scenarios) について検討が行われているが、それら以外にも、本文書に概説したワークフローからの逸脱や変更が必要となるシナリオが存在する可能性がある。

*) Technidata : IUCLID 4.0 - Getting Started (基本的な使用法 ; IUCLIDソフトウェアの「Help (ヘルプ)」メニューから利用できるマニュアル)

目次

1	定義：物質/化学物質、混合物、複雑な混合物	5
1.1	物質/化学物質	5
1.2	混合物	5
1.2.1	単純な混合物（調製品）	5
1.2.2	複雑な混合物	5
2	複雑な混合物のシナリオ	7
2.1	シナリオ 1：個々の成分が分離されていない複雑な混合物	7
2.2	シナリオ 2：複雑な混合物および成分に関するデータ	10
2.3	シナリオ 3：重要成分に関するデータが存在する複雑な混合物	10
2.3.1	データセットの作成	10
2.3.2	データセットの組み込み	10
2.3.3	レポートの作成	11
2.3.3.1	個別レポート	11
2.3.3.2	統合レポート	11
2.4	シナリオ 4：化学物質カテゴリーに属する複雑な混合物	12
3	単純な混合物（調製品）シナリオ	13
3.1.1	データセットの作成	13
3.1.2	データセットへのデータの入力	13
3.1.2.1	混合物の組成に関する情報	13
3.1.2.2	被験物質に関する情報	15
3.1.3	レポートの作成	15
3.1.3.1	個別レポート	15
3.1.3.2	統合レポート	15

1 定義：物質/化学物質、混合物、複雑な混合物

本ガイダンス文書では、複雑な混合物だけでなく、組成が明らかな混合物についても取り上げるため、下記に若干の定義を提示する。

1.1 物質/化学物質

IUCLID では、『物質/化学物質 (substance)』という用語は、特定の「化学物質」や、規制上の理由から個別の物質として扱われる「混合物」を指す。この定義が包含する範囲はかなり広く、任意の要素、実体、化合物、配合物、およびそれらの混合物がすべて包含される。

『物質/化学物質』という用語は、もっと狭い意味で単一の化学物質として定義される場合もあることを念頭においておく必要がある。たとえば、Directive 67/548/EEC (指令 67/548/EEC) および Biocidal Products Directive 98/8/EC (殺生物性製品指令 98/8/EC) では、下記の定義が使用されている。

- 物質/化学物質とは、『天然の状態または任意の製造プロセスにより取得される化学物質成分およびそれらの化合物で、製品の安定性を維持するために必要な任意の添加剤や、使用したプロセスに由来する任意の不純物も含む』

この定義によると、混合物および溶液（『調製品』と称する）は、2つ以上の物質から構成されるものを指す（1.2 項を参照）。

OECD の高生産量 (HPV) 化学物質点検マニュアル (2002 年 7 月) では、『化学物質』という用語は IUCLID で使用されている意味での『物質/化学物質』に対する一般的な用語として、広く定義されている。したがって、**単一の化学物質も混合物 (mixtures)** も包含される。

1.2 混合物

混合物とは、2 種類以上の単一の化学物質の配合物で、それぞれの成分がその物質固有の識別情報や性状を保持しているものを指す。混合物の組成が完全に解明できるか否かによって、混合物は単純な混合物と複雑な混合物に区別される。

1.2.1 単純な混合物（調製品）

比較的少数（10 個以下）の化学物質が組み合わせられた物質で、各成分は同定・定量済みであるものを指す。

注：Directive 67/548/EEC (指令 67/548/EEC) および Biocidal Products Directive 98/8/EC (殺生物性製品指令 98/8/EC) の用語では、『調製品』という用語は『2 種類以上の物質で構成される混合物または溶液』と定義されている。殺生物性製品調製品の成分や成分含有率は特定済みであると想定されるため、調製品は単純な混合物とみなすことができる。

1.2.2 複雑な混合物

複雑な混合物とは、数多くの化学物質が組み合わせられたもので、混合物の組成が定性的または定量的に完全には解明されておらず、組成が変化する場合もある。OECD の高生産量 (HPV) 化学物質点検マニュアル (2002 年 7 月) のチャプター 2 に説明されているとおり、下記に示す複雑な混合物は区別される。

- **クラス 2 化学物質** : 分子構造が明確に定義された単一の化学物質種として存在するのではなく、さまざまな物質の複合的な混合物として存在する化学物質 (パラフィンワックスなど)。クラス 2 の化合物には、UVCB 物質 (組成が不明または不定の物質、複雑な反応生成物および生体物質) も含まれる。UVCB 物質は、構造的特徴 (酸塩化物、アルカリ土類化合物、ポリオキシアルキレンなど)、重要な前駆物質 (ヒマシ油、獣脂など) で表記される場合や、より一般的な表現 (樹脂、ろうなど) で表記される場合がある。
- **ストリーム** : 化学プロセスの過程で生成され、プロセスストリーム (**process stream**) として存在するものであり、個々の物質の複合的な混合物と定義される。ストリームは、個々の成分を純粋な化学物質として分離することなく単一の生成物として分離・取り扱いが行われる場合もある。ストリームは、それを生成したプロセス条件によって定義される。

2 複雑な混合物のシナリオ

下記の提出シナリオにより、複雑な混合物に関して、HPVC プログラムにおける要件の大部分を満たすことができると考えられる。

2.1 シナリオ 1 : 個々の成分が分離されていない複雑な混合物

この提出シナリオでは、対象とされる複雑な混合物が定性的または定量的に完全には解明されていないと仮定される。混合物自体のデータのみを収集してまとめる必要があり、成分に関するデータは必要ない。したがって、そのような複雑な混合物は、数多くの成分を純粋な化学物質としてそれぞれ分離することなく 1 つの製品として扱われる。このことは、対象となる複雑な混合物に関する利用可能なデータが、組成が変動する混合物に由来したものである可能性を除外するものではない。しかし、このようなデータは、対象となる混合物を表す 1 つのデータセットにすべて併合して入力されることになる。

データは、個々の化学物質に関するデータと同様に扱われるため、IUCLID のワークフローは下記に示すように比較的単純なものとなる。

- ▶ 目的とする複雑な混合物に関するデータセットを作成する
- ▶ 作成したデータセットに、複雑な混合物に関するデータを入力する
- ▶ レポートを作成する

この混合物特有の説明が必要な場合以外は、下記のステップバイステップ・ガイドは主として付録『データセットの作成・インポート・エクスポート・マージ』を参考に作成された。この付録文書には、データセットの取り扱いに関する詳細な手引きが記載されている。

この作業を開始するにあたっては、下記の点に留意する必要がある。

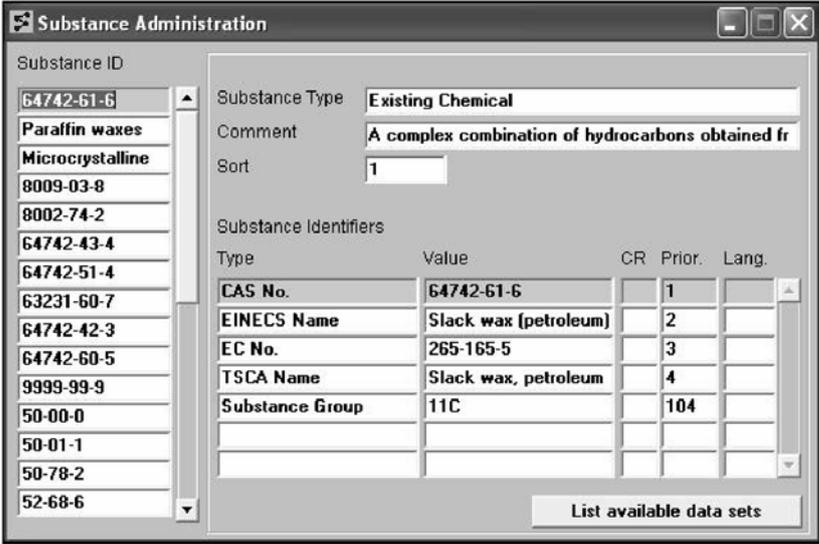
- IUCLID の「Substance Administration (物質管理)」では、あらかじめすべての物質の識別情報を入力してからでないとデータセットを作成することができない。しかし、この「Substance Administration (物質管理)」では、混合物の識別情報を入力する専用のフィールドはなく、「Comment (コメント)」(メモ) フィールドに入力するしかない。
- CAS 番号が存在する複雑な混合物の場合は、通常は CAS 番号が第 1 識別子となる。「Substance Administration (物質管理)」において、目的の複雑な混合物が EINECS (European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances ; 欧州既存商業化学物質インベントリー) および TSCA (Toxic Substances Control Act ; 米国有害物質規制法) インベントリーにおいてすでに利用可能となっているかどうかを確認することができる。
- 識別情報として CAS 番号を利用することができない複雑な混合物の場合は、混合物の名称 (IUPAC 名など) を入力することが望ましい。複数の CAS 番号で表すことはできるがその複雑な混合物自体を表す CAS 番号が存在しない場合も、同様に扱う。
- **警告** : 混合物の識別情報が、CAS 番号のような明確な登録番号を用いて作成されていない場合、不注意によりその混合物の識別情報を 2 回以上作成してしまう恐れがある。IUCLID では、たとえ物質の名称を若干異なる名称で入力しても (たとえば、『RESIN XY』の代わりに『Resin XY』や『Resin-XY』と入力しても)、『Substance ID already exists (その物質の ID はすでに存在する)』といった警告メッセージが表示されることはない。下記のステップバイステップ・ガイドのステップ 2 のヒント 3 も参照。
- 複雑な混合物の一般的な特性は、IUCLID チャプター 1 『一般的情報』の関連するサブチャプターに記載することが望ましい。
- 被験物質として使用した混合物の特性に関する情報は、定義済みフィールドまたはフリーテキスト「Test substance (被験物質)」に入力することが望ましい。

ステップバイステップ・ガイド

1. 「Substance Admin. (物質管理)」を選択する



結果：「Substance Administration (物質管理)」ダイアログボックスが開き、利用可能な（すなわち、識別情報作成済みの）すべての物質が、対応する識別子とともに一覧表示される。



Type	Value	CR	Prior.	Lang.
CAS No.	64742-61-6		1	
EINECS Name	Slack wax (petroleum)		2	
EC No.	265-165-5		3	
TSCA Name	Slack wax, petroleum		4	
Substance Group	11C		104	

注：上記のスクリーンショットには、複雑な混合物がいくつか含まれている。名称を識別情報とする混合物もあれば（「Paraffin waxes (パラフィンワックス)」など）、CAS 番号を識別情報とする混合物もある（「64742-61-6」など）。

2. 「Substance ID (物質の識別情報)」の表で、目的とする混合物の識別情報を確認する



識別情報の表において、目的の混合物の識別情報がすでに作成済みかどうかを確認する。

ヒント 1：上記の識別情報の表に膨大な数の入力がある場合は、クエリーを実行して目的の物質を取得する（「Query (クエリー)」アイコンまたは<F4>/<F5>キー）。IUCLID での検索は大文字と小文字を区別するので注意が必要である。ワイルドカード『%』を使用するか、任意の 1 文字としてアンダーライン『_』を使用する。下記にクエリーの例を示す。

- 『_axes』でクエリーを実行すれば、『Waxes』や『waxes』などの入力事項をすべて取得することができる。ただし、この文字列が入力内容の途中に含まれる場合は検出することができない。
- 『%axes%』でクエリーを実行すれば、このキーワードがフィールド内のどこに含まれていても検出することができる。

ヒント 2：「Comment (コメント)」フィールドの入力内容を検索することもできる。たとえば、『%hydrocarbons%』で検索すれば、上記のスクリーンショットに示されている入力内容と、このキーワードを含むその他のすべての物質を検出することができる。

ヒント 3：別名で識別情報が作成されている可能性がある混合物の場合には、考え得る別のスペルや大文字を用い、物質の（トランケートされた）名称についてクエリーを数回実行する必要がある。たとえば、(i) 『%XY%』、(ii) 『%xy%』、(iii) 『%esin%』、(iv) 『%RESIN%』、(v) 『%Resin%』などについて検索する。

<p>3. 「Substance Admin. (物質管理)」での作業を継続する</p> 	<p>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』の 1.1 項に記載した説明にしたがって、「Substance Administration (物質管理)」のステップ 3~6 を続けて実施する： 目的とする物質（混合物）に関する新規の記録を挿入し、物質に関する新規の識別情報を入力するか EINECS/TSCA リストから選択する。</p>
<p>4. データセットを作成する</p> 	<p>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』の 1.2 項の説明にしたがって実施する</p>
<p>5. データセットを開き、データを入力する</p> 	<p>[File: Open Data Sets (ファイル: データセットを開く)] を選択するか、「Edit (編集)」または「Select Data Set (データセットの選択)」アイコンをクリックしてデータセットを開く</p> <p>IUCLID のサブチャプターに該当するデータを入力する</p> <p>ヒント 1: サブチャプター 1.1.1『Substance Identification (物質の識別情報)』およびサブチャプター 1.1.2『General Substance Information (一般的な物質情報)』に、複雑な混合物の特性を入力することが望ましい。利用可能な適切な定義済みフィールドがない場合は、フリーテキストタイプ「RM (特記事項)」を使用する。フリーテキストタイプ「AD (添付文書)」を使って文書を添付してもよい。画像ファイルの場合は、記録容量が小さい『+.jpg』形式を使用することが望ましい。</p> <p>ヒント 2: チャプター 2~5 で提示される入力フォームには、定義済みフィールド『Test substance (被験物質)』が設けられている。このフィールドに、被験物質として使用した混合物の特性を記入することが望ましい。たとえば、『other TS: Microcrystalline wax CAS 番号 63231-60-7 (その他の TS: ミクロクリスタリンワックス CAS 番号 63231-60-7)』。IUCLID のサブチャプター 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)』は使用しないこと。 規格に関する詳細な情報が利用可能な場合は追記する。非常に詳しい情報の場合 (240 字を超える場合) は、フリーテキストタイプ「TS (被験物質)」を使用すること。</p>

2.2 シナリオ 2 : 複雑な混合物および成分に関するデータ

この提出シナリオは、定量的に完全には解明されていない複雑な混合物に対して用いられる。しかし、作成するデータセットの設計には、混合物自体に関するデータのほかに成分に関するデータの入力項目も含まれている。成分に関するデータが使用される理由としては、下記のようなものが考えられる。

- 個々の成分に対して、フガシティーモデルまたはその他の運命に関するエンドポイントが作成されている。
- 1つのエンドポイントの充足にさまざまな成分化学物質が使用されており、対応する複雑な混合物に関する1つのデータセットにこのデータを表示することが意図されている。

ワークフローは、下記に示すようにシナリオ 1 (2.1 項) に記載したものとほぼ同じである。

- ▶ 目的とする複雑な混合物に関するデータセットを作成する
- ▶ 作成したデータセットに、複雑な混合物および成分に関するデータを組み込む
- ▶ レポートを作成する

もっとも重要なのは、被験物質として使用した物質や、入力されたデータがどの物質を参照しているのかについて、適切に説明することである。したがって、『Test substance (被験物質)』フィールドまたはフリーテキストタイプ「TS」に、その物質の識別情報と、わかる範囲のすべての規格を必ず記載する必要がある。記載方法については、2.1 項のステップバイステップ・ガイドのステップ 5 を参照のこと。

2.3 シナリオ 3 : 重要成分に関するデータが存在する複雑な混合物

この提出シナリオの場合、有害性評価やリスク評価は、複雑な混合物自体に関するデータだけでなく、重要成分に関するデータにも基づいていると仮定する。重要成分は、単一の化学物質の場合も、評価対象の複雑な混合物に含まれている複雑な混合物の場合もある。また、これらの重要成分に関するデータは、複雑な混合物に関するデータセットへの入力が予定されていないと仮定する。むしろ、(i) 複雑な混合物と、(ii) 各重要成分に対して、それぞれ独立したデータセットが必要であるとみなす。上記が該当する場合は、次のワークフローを適用する。

- ▶ 目的とする複雑な混合物に対するデータセットを作成する
- ▶ 各重要成分に対して、それぞれ独立したデータセットを作成する
- ▶ すべてのデータセットにデータを入力する
- ▶ 個別または統合レポートを作成する

2.3.1 データセットの作成

複雑な混合物および各重要成分に関するデータセットの作成方法については、専用の手引きは必要ない。いずれの場合も、「Substance Administration (物質管理)」において『物質』の識別情報を作成したのち、「Data Set Administration (データセット管理)」において化学物質データセットを作成する必要がある。詳しい説明については付録 3 『データセットの作成・インポート・エクスポート・マージ』を参照のこと。

2.3.2 データセットの組み込み

個別のデータセットを作成するすべての重要成分について、サブチャプター 1.1.1 『Substance Identification (物質の識別情報)』に識別情報を入力することが望ましい。

『Test substance (被験物質)』フィールドまたはフリーテキストタイプ「TS」に、その物質の識別情報と、わかる範囲のすべての規格を必ず記載する必要がある。記載方法については、2.1 項のステップバイステップ・ガイドのステップ 5 を参照のこと。

統合レポートの作成を考慮に入れる場合は、2.3.3.2 項に概説するように、データセット識別情報タグと整理番号の入力が必要となる可能性がある。

2.3.3 レポートの作成

2.3.3.1 個別レポート

すべての関連データセットについて個別レポートを作成する場合は、専用の手引きは必要ない。これはもっとも簡単明瞭な選択肢であり、追加の操作を行うことなく IUCLID ソフトウェアの通常の印刷機能を使用することができる。

2.3.3.2 統合レポート

統合レポート作成の実務に関する下記の手引きは、統合レポートの作成が好ましい手法であることを意味するものではない点を十分理解する必要がある。どちらかといえば、下記の手引きは、作業をどのように進めるかを決定するうえで必要となる、特異な点に対する考察を提供することを目的としたものである。

統合レポートは、すべての内容を網羅した単一の文書である。特定のエンドポイントに関するすべての Study Summary が、(理想的には) 単一のチャプター番号および見出しのもとに表示される。このような表示方法の方が、成分および複雑な混合物自体の特定エンドポイントのデータ比較が容易となる場合がある。統合レポートは、数多くのデータセットに同じ情報を組み込む必要があることを意味しているのではない。むしろその逆である。他のデータセットで使用されているデータの (複数の) コピーを収載する必要はない。もう 1 つの利点として、扱う dossier が 1 つだけの場合は文書管理が容易である点が挙げられる。

化学物質カテゴリーでは統合レポートが適している場合がある。付録 1『化学物質カテゴリー』に概説したとおり、現バージョンの IUCLID でも原則として統合レポートを作成することは可能であるが、利用できる機能には制限があり、若干の準備手順も必要である。したがって、このオプションは、統合レポートを作成する方が個別レポートよりも本当に適している場合にのみ選択することが望ましい。たとえば、多数の成分に対するデータセットに少数の Study Summary しか収載されていない場合などが該当する。適切にソートされたすべてのデータを単一のレポートとして統合した方が、読みやすさが向上する場合もある。

複雑な混合物データセットに関する統合レポートの作成ワークフローは、化学物質カテゴリーに関して説明したワークフローと同じではない。これは、(i) 複雑な混合物自体に関するデータセットの種類は、カテゴリー/テンプレートデータセットではなく化学物質データセットに該当すること、(ii) それゆえ、成分に関するデータセットはカテゴリー/テンプレートデータセットには割り当てられないことが理由である。カテゴリー/テンプレートデータセットは、多くのデータセットに由来するデータを 1 つのデータセットに併合して、カテゴリー/テンプレートデータセットの統合レポートを作成するための手段としてのみ使用される。カテゴリー/テンプレートデータセットの統合レポートは、下記のワークフローにしたがって作成する。

- ▶ 統合データセットとして使用するカテゴリー/テンプレートデータセットを作成する
- ▶ すべての重要成分のデータセットと複雑な混合物のデータセットを、カテゴリー/テンプレートデータセットにマージする
- ▶ マージしたカテゴリー/テンプレートデータセットのレポートを作成する

統合カテゴリーレポートを作成しようとする場合や、そのようなオプションを留保したい場合は、下記の点を考慮することが望ましい。

- **データセット識別情報タグ :**

IUCLIDの記録には、その記録の所属データセットを示す独立した識別情報フィールドが存在しない。データセットの識別情報は、各記録のヘッダー（編集または表示モードの場合）またはレポートのヘッダーに表示されるため、通常この点が問題になることはない。しかし統合レポートを作成する場合には、複雑な混合物データセットのヘッダーしか表示されない。

したがって、データセットの情報源を表示させたい場合は、関連する各データセットの各記録に『タグ』入力用のフリーテキストタイプ「TS」を挿入し、データセットの識別情報を示す『タグ』を入力することが望ましい。たとえば、『Data set: CAS No. 63231-60-7, Microcrystalline wax (データセット: CAS番号 63231-60-7、マイクロクリスタリンワックス)』と入力する。1度入力した『タグ』は、「List freetext of same type (同じタイプのフリーテキストの一覧表示)」というIUCLIDの機能を使用して容易にコピーすることができる。

「Test Substance (被験物質)」フィールドに入力した情報でデータソースを十分に特定できると判断した場合は、そのようなデータセット識別情報タグは必要ない。

- **各記録の整理番号 :**

レポート内においてデータを論理的な順序で配列させたい場合は、各記録に適切な整理番号を入力することが望ましい。たとえば、複雑な混合物データセットに由来するデータをIUCLIDの各サブCHAPTERの最初に表示させることができ、他のデータとデータの間のどこかに偶然印刷されるようなことにはならない。化学物質カテゴリーに関連するデータセットへのデータの入力での提唱されている規則と類似の規則を適用することができる（付録 1、2.2.2 項を参照）。

2.4 シナリオ 4 : 化学物質カテゴリーに属する複雑な混合物

この提出シナリオは、一連の化学物質混合物（何らかの一定の規則性をもって関連するもの）に適用される化学物質カテゴリーに対して用いられる。混合物カテゴリーにはカテゴリーアプローチを用いることができる（基本的な『個別化学物質』カテゴリーモデルに類似）。付録 1『化学物質カテゴリー』を参照のこと。

3 単純な混合物（調製品）シナリオ

この提出シナリオは、同定・定量済みの化学物質が比較的少数組み合わせられたものに用いられる。2種類以上の有効成分とその他の成分からなる殺生物性製品などの調製品にも、このシナリオが適用される。

原則として、単純な混合物に対しては、複雑な混合物のシナリオ 3（重要成分に関するデータが存在する複雑な混合物）において説明したワークフローを適用することができる。関連する化学物質プログラムで規定されている要件に応じて、どの成分に対して独立したデータセットを作成すべきであるのかを判断する必要がある。調製品に複数の有効成分が含有されている場合は、必ずこのような判断を行う必要がある。Biocidal Products Directive 98/8/EC（殺生物性製品指令 98/8/EC）が定義するところの、いわゆる懸念すべき物質でも、このような判断が必要となる場合がある。一方、不純物や添加剤に関するデータは、該当する有効成分のデータセットに記載してよい。

下記のワークフローが提唱されている。

- ▶ 目的とする混合物（調製品）に関するデータセットを作成する
- ▶ 各有効成分に対して、独立したデータセットを作成する
- ▶ 他の成分のデータを有効成分のデータセットに記載することができない場合は、それらの成分に対して、独立したデータセットを作成する
- ▶ すべてのデータセットにデータを入力する
- ▶ 個別または統合レポートを作成する

3.1.1 データセットの作成

単純な混合物および各関連成分に関するデータセットの作成方法に関しては、専用の手引きは必要ない。いずれの場合も、「Substance Administration（物質管理）」において『物質』の識別情報を作成したのち、「Data Set Administration（データセット管理）」において化学物質データセットを作成する必要がある。詳しい説明については付録 3『データセットの作成・インポート・エクスポート・マージ』を参照のこと。

「Data Set Administration（データセット管理）」の「Comment（コメント）」フィールドに注記を入力することにより、単純な混合物または調製品を構成するすべてのデータセットの用途と、関連するデータセットの数を明記しておくことが推奨される。たとえば『Biocidal product xx: Data set #1 of 4（殺生物性製品 xx : 4 件のデータセットの 1 件目）』。このようにしておけば、「Comment（コメント）」（メモ）フィールドを検索パラメーターとして使用することにより、その用途に関連するすべてのデータセットを容易に検索することができる。

3.1.2 データセットへのデータの入力

混合物（調製品）自体に関するデータセットは、混合物を特徴付けるすべての情報の保管場所として機能する。このような情報には、企業や提出に関する情報や、成分の説明などが含まれる。また、被験物質として混合物を用いて実施した試験の（Robust）Summary も、混合物に関するデータセットに入力することが望ましい。

統合レポートの作成を考慮に入れる場合は、3.1.3.2 項に概説するように、データセット識別情報タグと整理番号の入力が必要となる可能性がある。

3.1.2.1 混合物の組成に関する情報

独立したデータセットが作成されている成分については全成分の識別情報を入力できるように、IUCLID 4 ではBiocidal Products Directive 98/8/EC（殺生物性製品指令 98/8/EC）の要件に適合した専用のサブチャ

プター『1.9.2 Components (成分)』が提供されている。このサブチャプターが利用できるのは、表示モードが『Biocides (殺生物剤)』または『Complete View (完全な表示)』の場合だけであるので注意すること*)。

サブチャプター1.9.2の入力には、下記の2通りの方法を使用する必要がある。

■ 混合物 (調製品) 自体に関するデータセットにおいて下記を実施する (図1の例を参照)。

- 各成分に対する記録を挿入する (スクリーンショットの整理番号が異なる点に注意)
- 「Select Heading (見出しの選択)」フィールドのピックリストから、『Components of the chemicals are (当該化学物質の成分)』という見出しを選択する。
- CAS 番号を入力するか、物質の識別子に関するフィールドをいずれか1つダブルクリックして EINECS インベントリーを開き、3つの識別子のいずれか1つを検索して物質を選択する。
- 残りの2つの識別子フィールドは、自動的に入力される (図1の上側のスクリーンショットを参照)。

■ 各成分のデータセットにおいて下記を実施する。

- 「Select Heading (見出しの選択)」フィールドのピックリストから、『The chemical is a component of (当該化学物質を成分とする化学物質)』という見出しを選択する。
- 混合物の CAS 番号を入力するか、ピックリストから選択する。

EINECS インベントリーに由来する入力事項しか選択できない点に注意すること。したがって、EINECS に記載されていない物質を扱う場合は、図1の下側のスクリーンショットに示すように、フリーテキストタイプ「RM (特記事項)」を挿入して物質名を明記する必要がある。

The figure consists of two screenshots of the IUCLID 4 software interface. Both screenshots show the '1.9.2 Components' section for a product named 'Masterkil'. The top screenshot shows a record with 'Order Number 1' and 'Reliabilities' set to 1. The 'Select Heading' is 'Components of the chemical are'. The 'CAS Number' is '50-00-0' and the 'EC Number' is '200-001-8'. The 'Name' is 'formaldehyde'. A dashed circle highlights the CAS and EC number fields. The bottom screenshot shows a record with 'Order Number 2'. The 'Select Heading' is 'Components of the chemical are'. The 'CAS Number' and 'EC Number' fields are empty. The 'Name' field is empty. In the 'Free texts' section, there is an entry 'RM Active substance X'. A dashed circle highlights this entry.

図1. 架空の殺生物性製品「Masterkil」に関するデータセットの IUCLID サブチャプター『1.9.2 Components (成分)』に入力された2つの記録の例

*) 説明: IUCLID 4 のスプラッシュスクリーンでは、表示モードを選択することにより、IUCLIDの利用可能な(サブ)チャプターのサブセットだけを使えるようにすることができる。IUCLID 4 ガイダンス文書またはGetting Started (基本的な使用方法) マニュアルを参照

3.1.2.2 被験物質に関する情報

『Test substance (被験物質)』フィールドに、その物質の識別情報と、わかる範囲のすべての規格を必ず記載する必要がある。たとえば、その試験が殺生物性製品 Masterkil 自体に関するものである場合は『other TS: Masterkil (その他の TS : Masterkil)』と記載する。『other TS: CAS No. 50-00-0, Formaldehyde; purity 98%; impurities: ... (その他の TS : CAS 番号 50-00-0、ホルムアルデヒド ; 純度 98% ; 不純物 : ...)』などと入力することもできる。IUCLID のサブチャプター 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)』は使用しないこと。

定義済みフィールド『Test substance (被験物質)』の入力可能文字数は 240 字であるため、240 字を超える情報はフリーテキストタイプ「TS (被験物質)」に記載する必要がある。

3.1.3 レポートの作成

3.1.3.1 個別レポート

すべての関連データセットについて個別レポートを作成する場合は、専用の手引きは必要ない。これはもっとも簡単明瞭な選択肢であり、追加の操作を行うことなく IUCLID ソフトウェアの通常の印刷機能を使用することができる。

3.1.3.2 統合レポート

特定のエンドポイントに関するすべての Study Summary が 1 つのチャプター番号および見出しのもとに収載された統合レポートを作成したい場合には、2.3.3.2 項を参照のこと。