

STN おさらいセミナー

毒性情報の調べ方

～ RTECS ～

JAICI
化学情報協会

2014年8月

サービス中止になったファイルを除き再編集
しています。件数は開催時のままです。

1

本日の内容

- ・ 概要
- ・ 毒性検索
 - RTECS ファイル
 - その他のファイル (REGISTRY)

毒性情報

・ 毒性情報とは

- 物質が生体または環境に与える影響に関する情報



刺激性
変異原性
など



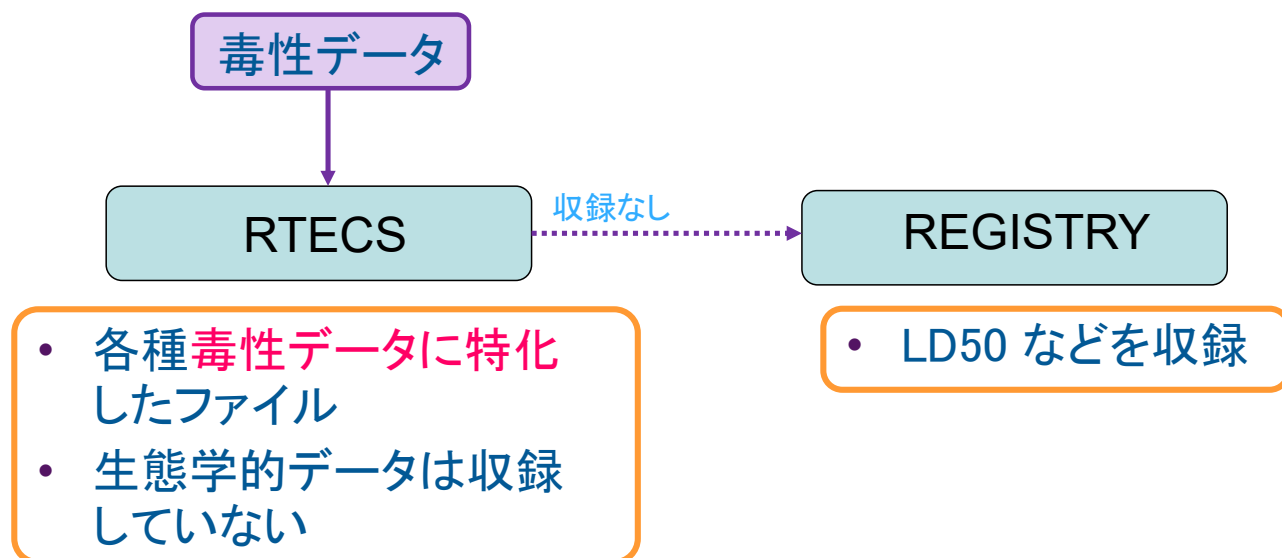
生分解
土壌安定性
など

STN の毒性情報

・ ファイル, 毒性の種類によって, 収録の形式が異なる

- 毒性の**数値** (ファクトデータ) を収録
 - 物性値が記載されている**文献情報**を収録
-
- 特許全文などの**テキスト**中に記載された**数値データ**を検索できる機能

毒性検索



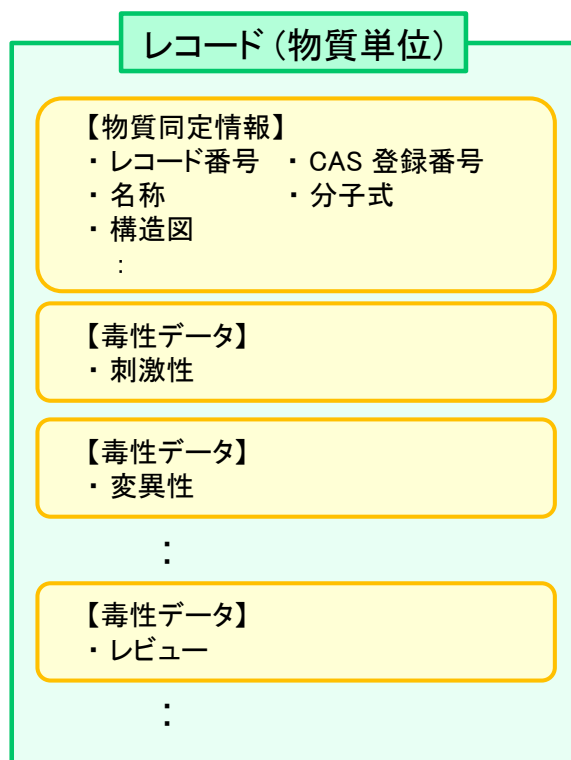
本日の内容

- 概要
- 毒性検索
 - RTECS ファイル
 - その他のファイル (REGISTRY)

RTECS ファイルの概要

- ・ 化学物質情報，**毒性情報**を収録
- ・ 医薬品，農芸化学物質など商業上重要な物質を収録
 - － 製作機関：米国労働安全衛生研究所（NIOSH）
Accelrys, Inc.
 - － 収録件数：**18 万件**以上
 - － 収録期間：1971 年
 - － 更新頻度：**毎日**

レコード構成



- － レコードは物質単位

毒性データ

- 各種毒性試験の数値データが**表形式**でまとめられている

フィールド	データ種類	内容
IRR	刺激性データ	ドレイズ法による肌や眼の刺激性試験結果
MUT	変異原性データ	20種類の試験法, 多種にわたる動物種細胞のデータ
REP	生殖試験データ	催奇形性, 両親・胎児・新生児の影響, 受精率, 奇形, 腫瘍原性などのデータをメスの生殖周期とともに収録
TUM	腫瘍原性データ	発がん性データ, 腫瘍性データなど
TOX	毒性データ (主に急性毒性)	主に単回投与の急性毒性データ, 致死データ
OMUL	その他の毒性データ (主に慢性毒性)	主に慢性毒性データ(致死データを除く)

毒性データ

- ・ 毒性試験データは, 毒性発現の**最小値**が記載されている
- ・ 刺激性や変異原性などの特殊毒性試験データは, **陽性データ**を収録している
- ・ 掲載データは第三者機関などによって評価されたものではない. 必要に応じて出典データの原文献を参照する

表示例 (TOX 表示形式)

TOXICITY DATA (TOX):

作用 Effect EFF	経路 Route RTE	生物種 Organism ORGN	投与量 Dose DOSE	期間 Duration DUR	出典情報 Source SO
	intraperitoneal	rat	LD ₅₀ 1100 ug/kg		APYPAY 12, 173, 1961
P30;U25	inhalation	man	TCLo 150 ppm	1Y-I	BLUTA9 28, 293, 1974

対象となる生物種や細胞

毒性データ

アルファベットと数字の組み合わせで症状を定義

S:秒 M:分 H:時
D:日 Y:年 W:週
C:連続的 I:断続的

LD (Lethal Dose): 致死量
TD (Toxic Dose): 毒性量
LC (Lethal Concentration): 致死濃度
TC (Toxic Concentration): 毒性濃度

50 : 50%
Lo : 最低

出典情報 (OMULFULL 表示形式)

OTHER MULTIPLE DOSE DATA (OMUL):

Effect EFF	Route RTE	Organism ORGN	Dose DOSE	Duration DUR	出典情報 Source SO
U01;Z73	inhalation	rat	TDLo 3000 ppm	6H/5D-I	TXAPA9 77, 144, 1985
A30;F11;F19	inhalation	dog	TCLo 500 ppm	24H/3D-C	NTIS** OTS0534633
A11;P70	inhalation	rat	TCLo 240 mg/m**3	4H/24W-I	VCVGH* -, 313, 1990

CODEN
雑誌名・機関
(簡略表記)巻・号, ページ
出版年など

対応する情報

OTHER MULTIPLE DOSE REFERENCES:

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959-

NTIS** National Technical Information Service (Springfield, VA 22161) Formerly U.S. Clearinghouse for Scientific & Technical Information.

VCVGH* "Vrednie chemichescie veshstva, galogenproisvodnie uglevodorodov" (Hazardous substances: Galogenated hydrocarbons) Bandman A.L. et al., Chimia, 1990.

EFF コード

A	Brain and Coverings	M	Kidney, Ureter, and Bladder
B	Spinal Cord	N	Endocrine
C	Peripheral Nerve and Sensation	P	Blood
D	Sense Organs and Special Senses (Nose, Eye, Ear, and Taste)	Q	Musculoskeletal
E	Autonomic Nervous System	R	Skin and Appendages
F	Behavioral	S	Immunological including Allergic
G	Cardiac	T	Reproductive including Embryotoxic, Neonatal and Teratogenic
H	Vascular	U	Nutritional and Gross Metabolic
I	Aquatic Organism Effects	V	Tumorigenic
J	Lungs, Thorax, or Respiration	X	In Vitro Toxicity Studies
K	Gastrointestinal	Y	Biochemical
L	Liver	Z	Related to Chronic Data

作用を表すためのコード. さらにダメージコードが続く

EFF コード (ダメージコード)

F BEHAVIORAL	
01	GENERAL ANESTHETIC
02	ANTICONVULSANT
03	WAKEFULNESS
04	SLEEP
05	ALTERED SLEEP TIME
06	EUPHORIA
07	SOMNOLENCE
:	

アルファベットと
数字を組み合わせて
症状を定義している

(例)

F : 「行動」

F01 : 「麻痺」

F02 : 「けいれん」

:

EFF コードの定義

オンラインで表示可能: => [HELP EFF](#) => [HELP アルファベット](#)

毒性関連データ

– 各種情報がテキスト形式でまとめられている

フィールド	データ種類	内容
CREV	がんレビュー	IARC (国際がん研究機関) による発がん性評価情報
TREV	毒性レビュー	文献中の毒性レビュー情報
TLV	限界値	ACGIH (米国産業衛生専門家会議) 勧告の暴露限界値
SREG	規制および基準	政府機関または法律による規制状況
NREC	NIOSH 勧告	NIOSH (米国労働安全衛生研究所) 勧告の暴露限界濃度
SURV	米国職業調査	NIOSH による米国産業界対象の暴露調査結果
ASTA	機関識別	各政府関連機関が実施した活動内容報告など

表示例 (TREVFULL 表示形式)

TOXICOLOGY REVIEW (TREV) : 毒性レビュー

TOXICOLOGY REVIEW TOLED5 127, 135, 2002

TOXICOLOGY REVIEW TOLED5 138, 9, 2003

TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 543, 201, 2003

TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 567, 227, 2004

TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 567, 109, 2004

TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 567, 151, 2004

TOXICOLOGY REVIEW EMMUEG 39, 69, 2002

:

TOXICOLOGY REVIEW REFERENCES: 出典情報の詳細

TOLED5 Toxicology Letters (Elsevier Science Pub. B. V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) V.1- 1977-

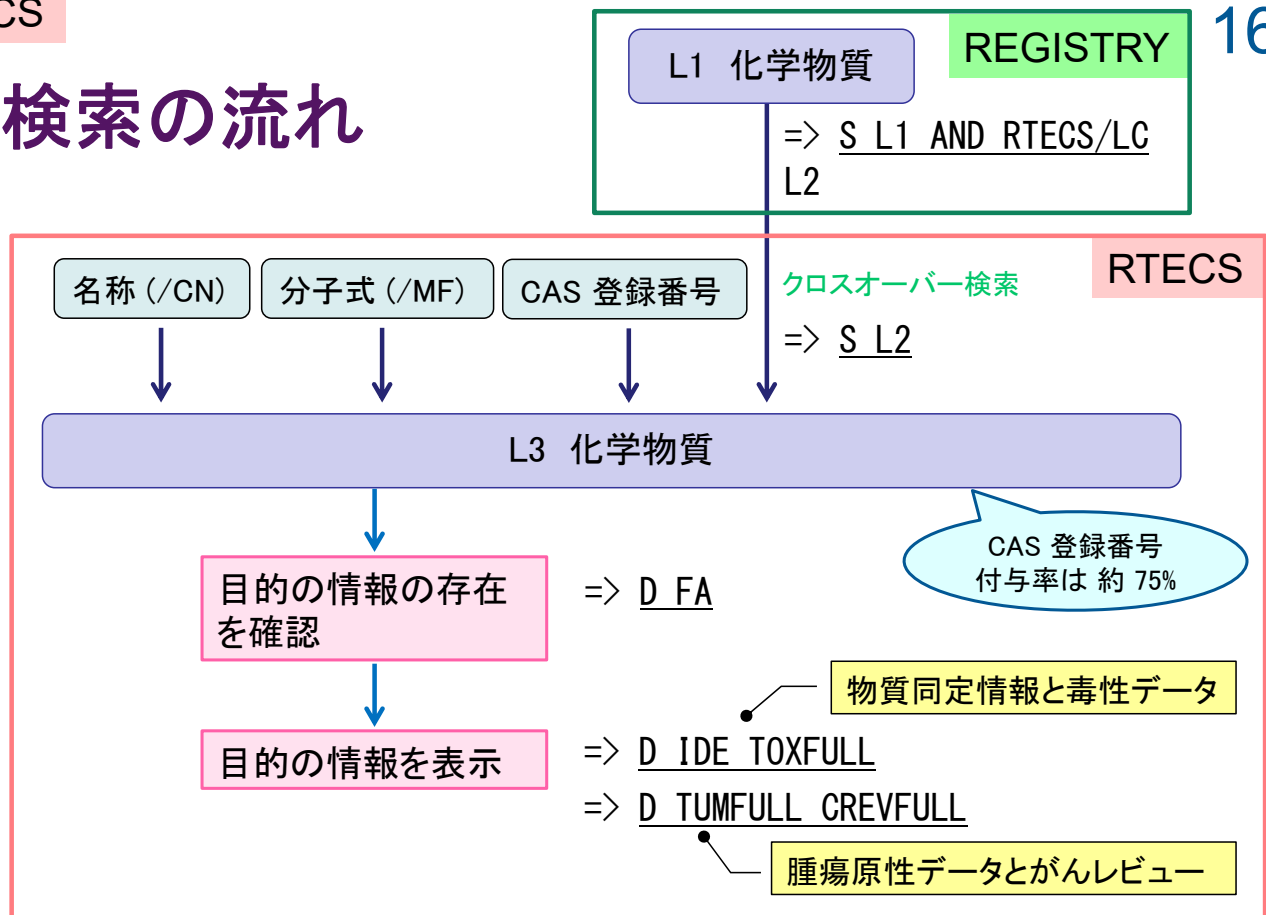
MUREAV Mutation Research (Elsevier Science Pub. B. V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) V.1- 1964-

EMMUEG Environmental and Molecular Mutagenesis (Alan R. Liss, Inc., 41 E. 11th St., New York, NY 10003) V.10- 1987-

:

CODEN, 巻・号, ページ, 出版年

検索の流れ



定型表示形式

表示形式	内容
IDE	物質同定データ
ALL	物質同定データ, 毒性データ, 毒性関連データ
QRD	物質同定データ, ヒットタームを含むフィールド (デフォルト)
EFFECTS	毒性データ IRR (刺激性データ), MUT (変異原性データ), REP (生殖試験データ), TUM (腫瘍原性データ), TOX (毒性データ), OMUL (その他毒性データ)
BIB	毒性関連データ CREV (がんレビュー), TREV (毒性レビュー), TLV (限界値)
LEGAL	毒性関連データ SREG (規制および基準), NREC (NIOSH 勧告), SURV (米国職業調査), ASTA (機関識別)

表示のポイント

- ・ **FA** 表示形式で毒性データの有無を確認できる
⇒ D FA (フィールドの存在を表示)
- ・ 出典情報をわかりやすく表示するには **FULL 付き**の表示形式を使う
⇒ D TOXFULL (毒性データを表示)
- ・ 同じ定型表示形式内に含まれるデータは一行にまとめて入力する
⇒ D TOXFULL OMULFULL TUMFULL MUTFULL

検索例 6

RTECS ファイルで、四塩化炭素の毒性データ、腫瘍原性データ、毒性レビュー、がんレビューを検索する



検索のポイント

- ・ REGISTRY ファイルの回答は、RTECS/LC で限定した後クロスオーバーする
(件数が少ない場合は直接クロスオーバーする)
- ・ 毒性情報を表示する際に FULL を付けると詳細な出典情報を表示する

【検索例 6】 RTECS ファイルで、四塩化炭素の毒性データ、腫瘍原性データ、毒性レビュー、がんレビューを表示する

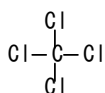
=> FILE REGISTRY ← *REGISTRY* ファイルに入る

=> S CCL4/MF ← 分子式で検索する
 L1 20 CCL4/MF

=> S L1 AND RTECS/LC ← *RTECS* ファイルに *CAS* 登録番号が収録されているレコードに限定する
 134345 RTECS/LC (オプション: *L1* の件数が多い場合に実行する)
 L2 1 L1 AND RTECS/LC

=> D SAM ← *SAM* 表示形式で表示する

L2 ANSWER 1 OF 1 REGISTRY COPYRIGHT 2014 ACS on STN
 IN Methane, tetrachloro-
 MF C Cl4
 CI COM



PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT

=> FILE RTECS ← *RTECS* ファイルに入る

=> S L2 ← クロスオーバー検索を行う
 L3 1 L2

=> D FA ← フィールドの存在を表示する

L3 ANSWER 1 of 1 RTECS COPYRIGHT 2014 U. S. GOVERNMENT on STN

Code	Field Name	
CREV	Cancer Review	← がんレビュー
RN	CAS Registry Number	
CN	Chemical Name	
CI	Class Identifier	
ASTA	Federal Agency Status (EPA, NIOSH, NTP, OSHA)	
IRR	Irritation Data	
MF	Molecular Formula	
MUT	Mutation Data	
NREC	NIOSH Recommendations	
OMUL	Other Multiple Dose Data	← その他の毒性データ
SREG	Regulations and Standards	
REP	Reproductive Effect Data	
RTN	RTECS Number	
SO	Source	
SURV	National Occupational Survey (NOHS, NOES)	
TLV	Threshold Limit Value	
TOX	Toxicity Data	← 毒性データ
TREV	Toxicology Review	← 毒性学レビュー
TUM	Tumorigenic Data	← 腫瘍原性データ
WLN	Wiswesser Line Notation	

フィールドの存在

フィールドコードに FULL を付けると、文献情報の詳細を表示できる

=> D TOXFULL OMULFULL TUMFULL TREVFULL CREVFULL

← 毒性データ, その他の毒性データ, 腫瘍原性データ, 毒性学レビュー, がんレビューを表示

L3 ANSWER 1 of 1 RTECS COPYRIGHT 2014 U. S. GOVERNMENT on STN

TOXICITY DATA (TOX) :

毒性データ

Effect EFF	Route RTE	Organism ORGN	Dose DOSE	Duration DUR	Source SO
K13	inhalation	human	TCLo 20 ppm		85CYAB 2, 136, 1959
D15;F24;F25	oral	woman	TDL0 1800 mg/kg		TXMDAX 69, 86, 1973
F11;J30;K30	oral	man	TDL0 1700 mg/kg		SAMJAF 49, 635, 197 5
G10;J24;M05	oral	man	LDLo 429 mg/kg		ZHYGAM 19, 781, 197 3
	inhalation	human	LCLo 1000 ppm		PCOC** -, 198, 1966
F07;F14;K13	inhalation	human	TCLo 45 ppm	3D	LANCAO 1, 360, 1960
K13	inhalation	human	TCLo 317 ppm	30M	JAMAAP 103, 962, 19 34
	inhalation	human	LCLo 5 pph	5M	TABIA2 3, 231, 1933
:					
X11	in vitro	Chicken neurons	IC50 8013 umol/L	21H	TIVIEQ 7, 653, 1993
:					

「吸入 (inhalation) によりヒトが嘔吐 (EFF コード : K13) する最低毒性濃度は 20 ppm」という情報が, "Chemistry of Industrial Toxicology" 2nd ed. の P.136 に記載されている

TOXICITY DATA REFERENCES:

85CYAB "Chemistry of Industrial Toxicology," 2nd ed., Elkins, H.B., New York, John Wiley & Sons, Inc., 1959

TXMDAX Texas Medicine (Texas Medical Assoc., 1801 N. Lamar Blvd., Austin, TX 78701) V.60- 1964-

SAMJAF South African Medical Journal (Medical Assoc. of South Africa, Secy., P.O. Box 643, Cape Town, S. Africa) V.6- 1932-

ZHYGAM Zeitschrift fuer die Gesamte Hygiene und Ihre Grenzgebiete (VEB Verlag Volk und Gesundheit, Neue Gruenstr. 18, Berlin DDR-1020, Ger. Dem. Rep.) V.1-1955-

PCOC** Pesticide Chemicals Official Compendium, Association of the American Pesticide Control Officials, Inc, 1966. (Topeka, KS)

LANCAO Lancet (7 Adam St., London WC2N 6AD, UK) V.1- 1823-

JAMAAP JAMA, Journal of the American Medical Association (AMA, 535 N. Dearborn St., Chicago, IL 60610) V.1- 1883-

TABIA2 Tabulae Biologicae (The Hague, Netherlands) V.1-22, 1925-63. Discontinued.

OTHER MULTIPLE DOSE DATA (OMUL) :

その他の毒性データ

Effect EFF	Route RTE	Organism ORGN	Dose DOSE	Duration DUR	Source SO
F15;L04;M03	oral	rat	TDLo 4800 μL/kg	8W-I	JTSCDR 25, 33, 2000
L70;Y07;Y15	oral	rat	TDLo 1200 mg/kg	12W-I	FAATDF 15, 558, 199 0
L30	oral	rat	TDLo 4197 ug/kg	28D-I	JPPMAB 3, 169, 1951
L70;U01;Y15	oral	rat	TDLo 400 mg/kg	10D-I	FAATDF 17, 186, 199 1
L03;L30	inhalation	rat	TCLo 61 mg/m**3	90D-C	TXAPA9 10, 270, 196 7

:

OTHER MULTIPLE DOSE REFERENCES:

JTSCDR Journal of Toxicological Sciences (Japanese Soc. of Toxicological Sciences, 4th Floor, Gakkai Center Bldg., 4-16, Yayoi 2-chome, Bunkyo-ku, Tokyo 113, Japan) V.1- 1976-

FAATDF Fundamental and Applied Toxicology (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1-40, 1981-97. For publisher information, see TOSCF2

JPPMAB Journal of Pharmacy and Pharmacology (Pharmaceutical Soc. of Great Britain, 1 Lambeth High St., London SE1 7JN, UK) V.1- 1949-

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology (Academic Press, Inc., 1 E. First

:

TUMORIGENIC DATA (TUM) :

腫瘍原性データ

Effect EFF	Route RTE	Organism ORGN	Dose DOSE	Duration DUR	Source SO
V03;L60	subcutaneous	rat	TDLo 1.5600E+04 mg/kg	12W-I	JNCIAM 38, 891, 196 7
V02;L60;R60	oral	Mouse	TDLo 4400 mg/kg	19W-I	JNCIAM 20, 431, 195 8
V03;L60	parenteral	Mouse	TDLo 305 g/kg	30W-I	BEXBAN 89, 845, 198 0
V03;L04;L60	oral	hamster	TDLo 9250 mg/kg	30W-I	JNCIAM 26, 855, 196 1

:

TUMORIGENIC DATA REFERENCES:

JNCIAM Journal of the National Cancer Institute (Washington, DC) V.1-60, 1940-78. For publisher information, see JJIND8.

BEXBAN Bulletin of Experimental Biology and Medicine (English Translation) Translation of BEBMAE. (Plenum Pub. Corp., 233 Spring St., New York, NY 10013) V.41- 1956-

:

TOXICOLOGY REVIEW (TREV) :

TOXICOLOGY REVIEW TXCYAC 189, 113, 2003
TOXICOLOGY REVIEW 32XPAD -, 49, 1975
TOXICOLOGY REVIEW PAREAQ 4, 1, 1952
TOXICOLOGY REVIEW AJMEAZ 38, 409, 1965
TOXICOLOGY REVIEW BNYMAM 54, 413, 1978
TOXICOLOGY REVIEW CTOXAO 13, 231, 1978
TOXICOLOGY REVIEW 85CVA2 5, 250, 1970
TOXICOLOGY REVIEW CRTXB2 7, 177, 1980
TOXICOLOGY REVIEW JTEHD6 6, 1133, 1980
TOXICOLOGY REVIEW NTIS** PB256-732
TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 543, 201, 2003
TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 567, 227, 2004
TOXICOLOGY REVIEW CRTXB2 33, 105, 2003
TOXICOLOGY REVIEW TXCYAC 196, 1, 2004
TOXICOLOGY REVIEW MUREAV 613, 138, 2006

毒性レビュー

TOXICOLOGY REVIEW REFERENCES:

TXCYAC Toxicology (Elsevier Scientific Pub. Ireland, Ltd., POB 85, Limerick, Ireland) V.1- 1973-
32XPAD "Teratology," Berry, C.L., and D.E. Poswillo, eds., New York, Springer, 1975
PAREAQ Pharmacological Reviews (Williams & Wilkins, 428 E. Preston St., Baltimore, MD 21202) V.1- 1949-
AJMEAZ American Journal of Medicine (Technical Pub., 875 Third Ave., New York, NY 10022) V.1- 1946-
BNYMAM Bulletin of the New York Academy of Medicine (New York Academy of Medicine, 2 E. 103rd St., New York, NY 10029) Ser 2: V.1- 1925-
CTOXAO Clinical Toxicology (New York, NY) V.1-18, 1968-81. For publisher information, see JTCTDW.
85CVA2 "Oncology 1970, Proceedings of the Tenth International Cancer Congress," Chicago, Year Book Medical Pub., 1971
CRTXB2 CRC Critical Reviews in Toxicology (CRC Press, Inc., 2000 Corporate Blvd., NW, Boca Raton, FL 33431) V.1- 1971-
JTEHD6 Journal of Toxicology and Environmental Health (Hemisphere Pub., 1025 Vermont Ave., NW, Washington, DC 20005) V.1- 1975/76-
NTIS** National Technical Information Service (Springfield, VA 22161) Formerly U.S. Clearinghouse for Scientific & Technical Information.
MUREAV Mutation Research (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) V.1- 1964-

CANCER REVIEW (CREV) :

IARC Cancer Review:Animal Sufficient Evidence IMEMDT 20, 371, 1979
IARC Cancer Review:Animal Sufficient Evidence IMEMDT 71, 401, 1999
IARC Cancer Review:Animal Sufficient Evidence IMEMDT 1, 53, 1972
IARC Cancer Review:Human Inadequate Evidence IMEMDT 1, 53, 1972
IARC Cancer Review:Human Inadequate Evidence IMEMDT 20, 371, 1979
IARC Cancer Review:Human Inadequate Evidence IMEMDT 71, 401, 1999
IARC Cancer Review:Group 2B IMEMDT 71, 401, 1999

がんレビュー

CANCER REVIEW REFERENCES:

IMEMDT IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risk of Chemicals to Man (WHO Publications Centre USA, 49 Sheridan Ave., Albany, NY 12210) V.1- 1972-

■ ヘルプデスク

・ 化学情報協会（JAICI）の問い合わせ先

- ヘルプデスク（STN の技術的な内容について）

TEL 0120-003-462

FAX 03-5978-4090

E-mail support@jaici.or.jp

- そのほかの内容について（契約、住所・担当者変更など）

TEL 0120-151-462

FAX 03-5978-4090

E-mail customer@jaici.or.jp

JAICI
化学情報協会

〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル

サービス全般 TEL: 0120-151-462

E-mail: customer@jaici.or.jp

ヘルプデスク TEL: 0120-003-462

E-mail: support@jaici.or.jp