



ChemTHEATRE 操作マニュアル
(Ver. 2.1.2)

2020年02月27日改訂

目 次

| | | |
|----|---|----|
| 1. | はじめに | 1 |
| 2. | ChemTHEATRE トップページ | 2 |
| | 2-1. Released Entries と New arrival project | 2 |
| | 2-2. メニューバー | 3 |
| 3. | 登録プロジェクト単位での検索 | 4 |
| | 3-1. 検索条件 | 4 |
| | 3-2. プロジェクト一覧 | 5 |
| | 3-3. プロジェクト詳細画面 | 6 |
| 4. | 試料からの検索 | 8 |
| | 4-1. 検索条件 | 8 |
| | 4-2. 試料一覧 | 8 |
| | 4-3. 試料詳細画面 | 10 |
| | 4-4. データのエクスポート | 13 |
| 5. | 化学物質からの検索 | 15 |
| | 5-1. 検索条件 | 15 |
| | 5-2. 化学物質一覧 | 15 |
| | 5-3. 化学物質詳細画面 | 16 |
| 6. | 濃度情報 | 17 |
| | 6-1. 絞り込み検索 | 17 |
| | 6-2. 濃度情報一覧 | 17 |
| | 6-3. データのエクスポート | 17 |
| 7. | ChemTHEATRE を利用した化学物質の生態リスク評価 | |
| | ～リスク評価の実施例～ | 18 |
| | 7-1. ChemTHEATRE から必要な測定値データを取得 | 18 |
| | 7-2. AIST-MeRAM で測定値データを評価 | 21 |
| | 7-2-1. 暴露評価 | 21 |
| | 7-2-2. 有害性評価 | 24 |
| | 7-2-3. リスク評価 | 28 |
| 8. | ChemTHEATRE 利用について (サイトポリシー) | 30 |

1. はじめに

既存の化学物質の環境中濃度に関する情報は、学術論文あるいは公的機関の報告書として電子化されているものの、そのほとんどはテキストファイルやエクセルファイルとして保存されているに過ぎず、モデリングやリスク解析を行う上ではきわめて使いにくい形式にて記録されている。気候変動研究に比べて地球規模の化学汚染の予測が大きく遅れているのは、予測モデルの入力データや検証材料になり得るモニタリングデータが整備されていないからである。このように多額の研究費を投じて得られた貴重な研究成果が十二分に活用されていないのは大きな損失である。これらの貴重な情報を将来にわたって有効活用するためには、汎用性の高いデータベースの構築が必須の課題である。

そこで、2016年度より、環境中の化学物質濃度に関する情報を整理し、有効に活用するためのプラットフォームの構築に着手した。我々は、このプラットフォームを

「ChemTHEATRE」（ケムシアター）と名付け、あらゆる化学物質のモニタリング情報を収録・閲覧できるデータベースを核として、収録情報を可視化および解析するツールを実装したウェブ上のプラットフォームの創出を目指している。ChemTHEATREはChemicals in the THEATREの略で、収録情報をオープンデータとして公開するための「劇場」をイメージし、THEATREには「トレーサビリティとレスポンシブルケアを確約した、扱いやすく発見的な電子アーカイブ」（Tractable and Heuristic E-Archive for Traceability and Responsible-care Engagement）の意味を込めた。

ChemTHEATREにデータを集積することで、化学物質のトレーサビリティが確保され、環境中での挙動・運命予測の実施が容易となる。このことは、条約等の化学物質管理政策の効果検証にも寄与すると考えられる。また、化学物質排出量や毒性情報等に関する外部のデータベースとの連携により高精度かつ透明性の高い化学物質の生態リスク評価が可能となる。その上、対象物質の類縁化合物や代謝物等の挙動予測が可能となれば、複合毒性をはじめとした未知のリスクの評価にも貢献することが期待できる。

昨今では、学術情報のオープン化に関する議論も進められており、ここから得られる最も大きな効果として、分野を超えてデータを共有することによる新たな知の創出が挙げられる。ChemTHEATREは将来的に予想を超えた化学反応を起こすための土台になる可能性を持っている。また、情報の高度な可視化技術との関係によりモニタリング研究の社会への還元、とくに環境教育への寄与やオープンサイエンス化が期待できる。

2. ChemTHEATRE トップページ

English

English

Japanese

英語⇔日本語
切り替え可能

Released Entries

| Sample Top10 | | Chemical substance Top10 | | Contributor Top10 | |
|---------------------------|----------|--------------------------|-------|--|-----------|
| Sample | #Samples | Chemical | #Data | Submitted by | #Projects |
| Water | 2705 | Flame retardants PBDEs | 9652 | Ehime University | 42 |
| Homo sapiens | 1585 | Organochlorines PCBs | 8951 | Ministry of the Environment website | 14 |
| Sediment | 1066 | Organochlorines Co-PCBs | 6182 | National Institute for Environmental Studies | 9 |
| Neophocaena phocaenoides | 216 | PAHs | 4291 | Kagoshima University | 5 |
| Soil | 205 | Organochlorines PCDFs | 3585 | Fisheries Research and Education Agency | 4 |
| Air | 172 | Pesticides | 3204 | Wadsworth Center (New York State Department of Health) | 4 |
| Mytilus galloprovincialis | 169 | PPCPs | 3147 | Hokkaido Research Organization | 1 |
| Perna viridis | 120 | PPCPs | 2853 | The University of Tokyo | 1 |
| Katsuwonus pelamis | 87 | Organochlorines PCDDs | 2808 | Tokyo University of Agriculture & Technology | 1 |
| Nyctereutes procyonoides | 86 | Phenols | 2574 | Fukuoka Prefecture | 1 |

New arrival project

| ProjectID | Submitter | ReleaseDate | Title | Publication |
|-----------|---|-------------|--|--|
| PRAD00098 | Open data (Ministry of the Environment) | 2019/10/18 | [MOE_JP] The Detailed Environmental Survey in FY2017 (Source: FY2018 Report of Chemicals in the Environment English / Japanese) | |
| PRAD00097 | Open data (Ministry of the Environment) | 2019/09/13 | [MOE_JP] The Initial Environmental Survey in FY2017 (Source: FY2018 Report of Chemicals in the Environment English / Japanese) | |
| PRAD00096 | Open data (Ministry of the Environment) | 2019/09/02 | [MOE_JP] The monitoring of agricultural chemicals in river water in FY2018 (Source: FY2018 (H30) agricultural monitoring report) | |
| PRAD00095 | Ruriko Tahara (Hokkaido Research Organization) | 2019/07/26 | [LDC_JP] Survey on Perfluorinated chemicals in Aquatic Environment in Hokkaido (Source: Report of Institute of Environmental Sciences No. 3 (No. 39)) | |
| PRAD00094 | Takehiko Hano (Fisheries Research and Education Agency) | 2019/06/24 | Occurrence of neonicotinoids and fipronil in estuaries and their potential risks to aquatic invertebrates | 10.1016/j.envpol.2019.05.067 |
| PRAD00093 | Open data (Ministry of the Environment) | 2019/06/20 | [MOE_JP] The monitoring of agricultural chemicals in river water in FY2013 (Source: FY2013 (H25) agricultural monitoring report) | |

2-1. Release Entries と New arrival project

| | | |
|------------------------------------|---------------------------|---------------------------|
| Release Entries (登録データの統計情報を表示) | Sample Top 10 | 登録されている試料の上位 10 件を表示 |
| | Chemical Substance Top 10 | 濃度データが存在する化学物質の上位 10 件を表示 |
| | Contributor Top 10 | データ登録件数の多い研究機関の上位 10 件を表示 |
| New arrival project | 新着のプロジェクト 10 件を表示 | |

2-2. メニューバー

| | | |
|---|--|--|
| <p>About</p> <p>ChemTHEATRE Wiki</p> <p>Project Search</p> <p>Sample Search</p> <p>Chemical Search</p> <p>Register your data: register@chem-theatre.com</p> <p>For inquiry: info@chem-theatre.com</p> <p> </p> <p></p> <p>Site Policy</p> <p>Copyright (C) 2016 ChemTHEATRE</p> | <p>About</p> <p>ChemTHEATRE Wiki</p> <p>Project Search</p> <p>Sample Search</p> <p>Chemical Search</p> <p>Resister your data: register@chem-theatre.com</p> <p>For inquiry: info@chem-theatre.com</p> <p> </p> <p></p> <p>Site Policy</p> | <p>ChemTHEATRE の概要説明</p> <p>ChemTHEATRE のウィキサイト</p> <p>3. 登録プロジェクト単位での検索 (p.4)</p> <p>4. 試料からの検索 (p.8)</p> <p>5. 化学物質からの検索 (p.15)</p> <p>データ登録用のメールアドレス</p> <p>問い合わせ用のメールアドレス</p> <p>ChemTHEATRE のツイッター、フェイスブックへのリンク</p> <p>登録した化学物質の CAS Registry Number®を Look up サービスにて確認済みであることを示す</p> <p>ChemTHEATRE 利用規約</p> |
|---|--|--|

3. 登録プロジェクト単位での検索

<Project Search 画面>

Projects

ProjectID

Sample Type

Scientific Name

Tissue / Organ

Keyword

Chemical Groups

Chemical Name

Collection Region

Collection Country


Collection Year -

Show entries
Showing 1 to 50 of 96 entries

| ProjectID | Submitter | Title | Samples | doi | MeasuredData | RegisterDate |
|-----------|--|--|-------------------------|-----|------------------------------|--------------|
| PRA000098 | Open data (Ministry of the Environment) | [MOE_JP] The Detailed Environmental Survey in FY2017 (Source: FY2018 Report of Chemicals in the Environment English / Japanese) | Samples | | MeasuredData | 2019/10/18 |
| PRA000097 | Open data (Ministry of the Environment) | [MOE_JP] The Initial Environmental Survey in FY2017 (Source: FY2018 Report of Chemicals in the Environment English / Japanese) | Samples | | MeasuredData | 2019/09/13 |

3-1. 検索条件

| | |
|--------------------|---|
| Project ID | 登録プロジェクトに付した ChemTHEATRE 固有の ID |
| Sample Type | 試料の種類をプルダウンメニューから選択 (生物→哺乳類, 鳥類, 両生類など 非生物→水, 底質, 大気など) |
| Scientific Name | Sample Type を選択後にプルダウンメニューが現れる 選択した Sample Type に分類されている登録試料名 (学名など) |
| Tissue / Organ | Scientific Name を選択後にプルダウンメニューが現れる 選択した Scientific Name で登録されている組織・臓器名 |
| Keyword | フリーワードでの検索 |
| Chemical Groups | 登録されている化学物質の分類群 |
| Chemical Name | Chemical Groups を選択後にプルダウンメニューが現れる 選択した Chemical Groups に含まれる化学物質名 |
| Collection Region | 試料を採取した地域 |
| Collection Country | 試料を採取した国 |
| Collection Year | 試料を採取した年 |

条件を入力後、 を押すと結果が一覧として返ってくる

3-2. プロジェクト一覧

| ProjectID | Submitter | Title | Samples | doi | MeasuredData | RegisterDate |
|-----------|------------------------------------|---|-------------------------|-----|------------------------------|--------------|
| PRA000002 | Kei Nakayama (Ehime University) | Temporal and spatial trends of organotin contamination in the livers of finless porpoises (<i>Neophocaena phocaenoides</i>) and their association with parasitic infection status | Samples | | MeasuredData | 2016/06/27 |

降順・昇順切り替え

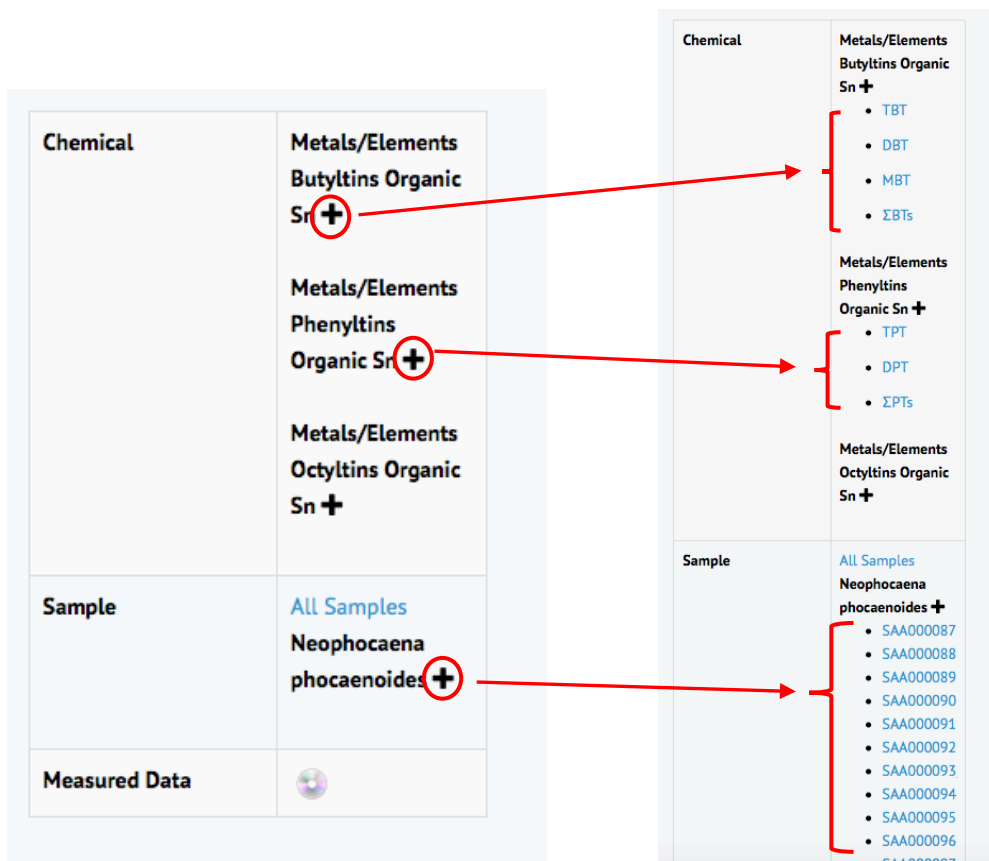
| | |
|---------------|---------------------------------|
| Project ID | 登録プロジェクトに付した ChemTHEATRE 固有の ID |
| Submitter | データ登録者名と所属先 |
| Title | プロジェクトの表題 (論文のタイトル, 報告書名など) |
| Samples | 当該プロジェクトで使用された試料一覧へのリンク |
| doi | 関連する論文の doi (デジタルオブジェクト識別子) |
| Measured Data | 当該プロジェクトで測定された値一覧へのリンク |
| Register Date | プロジェクトの登録年月日 |

3-3. プロジェクト詳細画面

| Project Details | |
|----------------------|---|
| Project ID | PRA000002 |
| Submitter | Ehime University, Kei Nakayama |
| Corresponding Author | Ehime University, Kei Nakayama |
| Release Date | 2016/06/27 |
| Title | Temporal and spatial trends of organotin contamination in the livers of finless porpoises (<i>Neophocaena phocaenoides</i>) and their association with parasitic infection status |
| doi | • 10.1016/j.scitotenv.2009.08.043 |
| Grant | Grants-in-Aid for Scientific Research (S) (No. 20221003) from Japan Society for the Promotion of Science |
| Register Date | 2016/06/27 |
| Update Date | 2016/06/27 |
| Chemical | Metals/Elements Butyltins Organic Sn + Metals/Elements Phenyltins Organic Sn + Metals/Elements Octyltins Organic Sn + |
| Sample | All Samples Neophocaena phocaenoides + |
| Measured Data | |

| | |
|----------------------|---|
| Project ID | 登録プロジェクトに付した ChemTHEATRE 固有の ID (論文/報告書単位で付与) |
| Submitter | データ登録者名と所属先 |
| Corresponding Author | 責任著者名と所属先 |
| Release Date | ChemTHEATRE でのデータ公開日 |
| Title | プロジェクトの表題 (論文のタイトル, 報告書名など) |
| doi | 関連する論文の doi (デジタルオブジェクト識別子) |
| Grant | プロジェクトの研究助成に関する情報 |
| Register Date | プロジェクトの登録年月日 |
| Update Date | 登録内容の更新年月日 |

| | |
|---------------|--|
| Chemical | 当該プロジェクトで測定している化学物質の分類群。展開すると、化学物質名が一覧表示される (p.7) |
| Sample | 当該プロジェクトで使用した試料の種類 (学名)。展開すると、サンプル ID が一覧表示される (p.7) |
| Measured Data | 測定データ一覧へのリンク |



「+」をクリックすると展開表示



測定した化学物質名，サンプル ID を表示

4. 試料からの検索

< Sample Search 画面 >

Samples

ProjectID: PRA000002

Sample Type: -

Scientific Name: -

Tissue / Organ: -

Keyword: Project title, Abstract

Chemical Groups: -

Chemical Name: -

Collection Region: -

Collection Country: -

Collection Year: XXXX - XXXX

Buttons: Search, Reset

Annotations:

- Show Map (circled in red)
- Export samples (TSV) | Show the measured data of query results | Export measured data (TSV) (boxed in red)
- SampleName (circled in red)

Showing 1 to 50 of 86 entries

| ProjectID | SampleID | SampleType | SampleName | Tissue | Collection Country | Collection Year | Chemicals | Measured Data |
|-----------|-----------|----------------|---|--------|--------------------|-----------------|-----------------|---------------|
| PRA000002 | SAA000087 | Marine mammals | <i>Neophocaena phocaenoides</i> - Finless porpoises | Liver | Japan | 1996 | Metals/Elements | |
| PRA000002 | SAA000088 | Marine mammals | <i>Neophocaena phocaenoides</i> - Finless porpoises | Liver | Japan | 1999 | Metals/Elements | |

4 - 1. 検索条件

3 - 1. 参照のこと (p.4)

4 - 2. 試料一覧

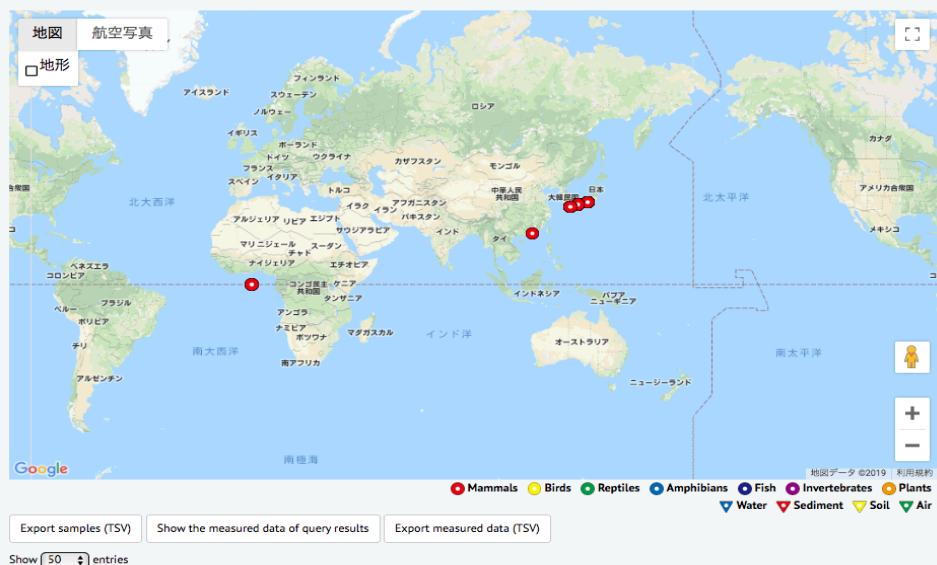
| | |
|--------------------|---|
| Project ID | 登録プロジェクトに付した ChemTHEATRE 固有の ID →クリックで詳細画面 Project Details (p.6) へ |
| Sample ID | 登録試料に付した ChemTHEATRE 固有の ID →クリックで詳細画面 Sample Details (p.10) へ |
| Sample Type | 試料の種類 (生物→哺乳類など 非生物→水, 底質など) |
| Sample Name | 学名と通称を併記 (Scientific Name - Common Name) |
| Tissue | 当該サンプルで測定に使用, 登録されている組織・臓器名 |
| Collection Country | 試料を採取した国 |
| Collection Year | 試料を採取した年 |
| Chemicals | 測定した化学物質の分類群名 |
| Measured Data | 当該試料を使って測定された測定値一覧へのリンク |

Show Map

検索で絞り込まれた試料が採取された場所を地図上に表示

Samples Map

| | | | |
|-----------------|--|--------------------|---|
| ProjectID | <input type="text" value="PRA000002"/> | Chemical Groups | <input type="text" value="-"/> |
| Sample Type | <input type="text" value="-"/> | Chemical Name | <input type="text" value="-"/> |
| Scientific Name | <input type="text" value="-"/> | Collection Region | <input type="text" value="-"/> |
| Tissue / Organ | <input type="text" value="-"/> | Collection Country | <input type="text" value="-"/> |
| Keyword | <input type="text" value="Project title, Abstract"/> | Collection Year | <input type="text" value="XXXX"/> - <input type="text" value="XXXX"/> |



4 - 3. 試料詳細画面

Sample

| | |
|---------------------------|---------------------------------|
| Sample ID | SAA000087 |
| Sample Type | Marine mammals |
| Taxonomy ID | 34892 |
| Scientific Name | <i>Neophocaena phocaenoides</i> |
| Common Name | Finless porpoises |
| Collection Year | 1996 |
| Collection Month | 4 |
| Collection Day | 18 |
| Collection Region | Asia |
| Collection Country | Japan |
| Collection Area | Seto Inland Sea |
| Collection Latitude From | 33.61055556 |
| Collection Latitude To | 33.91 |
| Collection Longitude From | 131.1952778 |
| Collection Longitude To | 134.6513889 |

空欄項目の表示・非表示切替え

緯度・経度を From-To-で入力した場合
地図上では採取地を四角で囲んで表示

Show/Hide blank data

| | |
|---------------|---|
| Projects | • PRA000002 |
| Chemical | Metals/Elements Butyltins Organic Sn + Metals/Elements Phenyltins Organic Sn + Metals/Elements Octyltins Organic Sn + |
| Measured Data | |

| | |
|---------------|---|
| Project | 当該サンプルを使用しているプロジェクト一覧 |
| Chemical | 当該サンプルを使用し測定している化学物質の分類群名 +を展開→測定した化学物質名表示 (p.7) |
| Measured Data | 測定データ一覧へのリンク |

| | |
|----------------|-------------|
| Tissue / Organ | Liver |
| Weight | 5.25 |
| Weight Unit | kg |
| Length | 72 |
| Length Unit | cm |
| Length Type | Body length |
| Uniq Code Type | es-BANK |
| Uniq Code | EW00884 |
| Register Date | 2016/6/27 |
| Update Date | 2016/8/8 |

| | | |
|------|------------------------------|--------------------|
| 共通 | Sample ID | 試料 ID |
| | Sample Type | 試料タイプ (種類) |
| 生物 | Taxonomy ID | NCBI 生物分類 ID |
| 共通 | Scientific Name | 学名 |
| | Common Name | 一般名 |
| | Collection Year | 採取年 |
| | Collection Month | 採取月 |
| | Collection Day | 採取日 |
| | Sampling Time (Start/End) | サンプリング時間 (開始時/終了時) |
| | Sampling Time (AM PM) | サンプリング時間 (午前・午後) |
| | Sampling Duration | サンプリング継続時間 |
| | Weather (Start/End) | 天候 (開始時/終了時) |
| | Temperature (°C) (Start/End) | 温度 (°C) (開始時/終了時) |
| | Collection Region | 採取地域 |
| | Collection Country | 採取国 |
| | Collection Area | 採取地 |
| | Collection Latitude From | 採取地の緯度 (From) |
| | Collection Latitude To | 採取地の緯度 (To) |
| | Collection Longitude From | 採取地の経度 (From) |
| | Collection Longitude To | 採取地の経度 (To) |
| Maps | マップ | |
| 生物 | Tissue/Organ | 組織/臓器 |
| | Tissue Lipid (%) | 脂質含量 (%) |
| | Tissue Moist (%) | 水分含量 (%) |
| | Sex | 性別 |
| | Weight | 重量 |
| | Weight Unit | 重量単位 |
| | Length | 長さ |
| | Length Unit | 長さの単位 |
| | Length Type | 長さのタイプ |
| | Growth Stage | 成長段階 |
| | Age | 年齢 |
| | Disease | 疾病 |

| | | |
|----|--|--|
| 水 | Water Temperature (°C)(Start/End) | 水温 (°C) (開始時/終了時) |
| | pH | pH |
| | DO (mg/L) | 溶存酸素量 Dissolved Oxygen (DO) |
| | EC (mS/m) | 電気伝導率 Electrical Conductivity (EC) |
| | Salinity | 塩分濃度 |
| | SS (mg/L) | 浮遊物質/懸濁物質 Suspended solids /substance (SS) |
| | Water Depth (m) | 水の深度 (m) |
| | Transparency (m) | 透明度 (m) |
| | Water Color | 水の色 |
| 底質 | Sediment Temperature (°C)(Start/End) | 底質の温度 (°C) (開始時/終了時) |
| | Sediment Depth (m) | 底質の深度 (m) |
| | Sediment Appearance | 底質の外観 |
| | Sediment Color | 底質の色 |
| | Sediment Surface Color | 底質表層の色 |
| | Sediment Odor | 底質の臭気 |
| | Sediment Impurities | 底質中の不純物 |
| | Sediment Moisture (%) (On Site / Analysis) | 底質の湿度 (%) (採取時/測定時) |
| | Ignition Loss (%) (On Site / Analysis) | 強熱減量 (%) (採取時/測定時) |
| 土壌 | Soil Depth (m) | 土壌の深度 (m) |
| 大気 | Wind Direction (Start / End) | 風向 (開始時/終了時) |
| | Wind Speed (m/s) (Start / End) | 風速 (m/s) (開始時/終了時) |
| | Flow Rate | 流速 |
| | Humidity (%) (Start / End) | 湿度 (%) (開始時/終了時) |
| | Amount Of Collected Air (Start / End) | 大気採取量 (開始時/終了時) |
| | Mean PM10 | PM10 平均値 |
| | Mean Total Suspended Particles | 総浮遊粒子 平均値 |
| 共通 | Sample Name | 試料名 |
| | Uniq Code Type | 固有コード種 (es-BANK など) |
| | Uniq Code | 固有コード |
| | Remarks | 備考 |
| | Register Date | 登録日 |
| | Update Date | 更新日 |

4-4. データのエクスポート

Export samples (TSV)

Show the measured data of query results

Export measured data (TSV)

| | |
|---|--|
| Export samples (TSV) | 検索で絞り込まれた試料の詳細情報の一覧をエクスポート (タブ区切りのテキストファイル) |
| Show the measured data of query results | 当該試料を使って測定された化学物質・測定値の一覧を画面上に表示 |
| Export measured data (TSV) | 測定値一覧をエクスポート (タブ区切りのテキストファイル) |

Export samples (TSV)
 で Export された試料の詳細情報一覧 (タブ区切りのテキストファイル)

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M | N | O | P | Q | R | S | T | U | V | W | X | Y | Z |
|---|------------|-----------|------------|------------|------------|----------|-------------|----------------|------------|--------------|--------------|--------------|------------|-------------|-------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|-----|----|---|---|
| 1 | ProjectID | SampleID | SampleType | TaxonomyID | UniqCodeTy | UniqCode | SampleName | ScientificName | CommonName | CollectionYr | CollectionMk | CollectionDa | SamplingTm | SamplingDur | WeatherStar | CollectionRe | CollectionOz | CollectionAr | CollectionLa | CollectionLo | CollectionLo | CollectionLo | Sex | Ti | | |
| 2 | PRAA000002 | SAA000087 | ST004 | 34892 | es-BANK | EW00884 | Neophocaena | Finnles porpi | 1996 | 4 | 18 | | | | | Asia | Japan | Seto Inland | 33.6105556 | 33.91 | 131.195278 | 134.651389 | LN | | | |

Show the measured data of query results

で示された測定値一覧

MeasuredData

ProjectID: PRA000002
 SampleID:
 Sample Type: -
 Scientific Name: -
 Tissue / Organ: -
 Keyword: Project title, Abstract

Chemical Groups: -
 Chemical Name: -
 Collection Region: -
 Collection Country: -
 Collection Year: XXXX - XXXX

Search Reset

Export samples (TSV) Export measured data (TSV)

Show 50 entries
 Showing 1 to 50 of 946 entries

« 1 2 3 4 5 6 7 8 ... 18 19 »

| ProjectID | SampleID | Sample | Chemical | ExperimentID | MeasuredValue | Unit | Remarks | RegisterDate |
|-----------|-----------|--------------------------|------------|--------------|---------------|----------|---------|--------------|
| PRA000002 | SAA000170 | Neophocaena phocaenoides | ΣPTs | EXA000001 | 1.68E+1 | ng/g wet | | 2016/7/04 |
| PRA000002 | SAA000170 | Neophocaena phocaenoides | DPT | EXA000001 | 1.41E+0 | ng/g wet | | 2016/7/04 |
| PRA000002 | SAA000170 | Neophocaena phocaenoides | TPT | EXA000001 | 1.54E+1 | ng/g wet | | 2016/7/04 |
| PRA000002 | SAA000170 | Neophocaena phocaenoides | ΣBTs | EXA000001 | 2.02E+3 | ng/g wet | | 2016/7/04 |
| PRA000002 | SAA000170 | Neophocaena phocaenoides | MBT | EXA000001 | 1.10E+3 | ng/g wet | | 2016/7/04 |
| PRA000002 | SAA000170 | Neophocaena phocaenoides | DBT | EXA000001 | 7.20E+2 | ng/g wet | | 2016/7/04 |
| PRA000002 | SAA000170 | Neophocaena phocaenoides | TBT | EXA000001 | 2.00E+2 | ng/g wet | | 2016/7/04 |
| PRA000002 | SAA000169 | Neophocaena phocaenoides | Σoctyltins | EXA000001 | - | ng/g wet | | 2016/7/04 |
| PRA000002 | SAA000169 | Neophocaena phocaenoides | MOT | EXA000001 | <6.00E-1 | ng/g wet | | 2016/7/04 |

Export measured data (TSV)

で Export された測定値一覧 (タブ区切りのテキストファイル)

measureddata_20191021033602.tsv

ホーム 挿入 ページレイアウト 数式 データ 校閲 表示

MS Pゴシック 12 A A

文字列の折り返し 標準

セルを結合して中央揃え

A1 MeasuredID

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M |
|----|------------|-----------|-----------|--------------|------------|------------|--------------|------------|--------------|----------|---------|-------------|------------|
| 1 | MeasuredID | ProjectID | SampleID | ScientificNa | ChemicalID | ChemicalNa | ExperimentID | MeasuredVa | AlternativeC | Unit | Remarks | RegisterDat | UpdateDate |
| 2 | 80 | PRA000002 | SAA000087 | Neophocaen | CH0000154 | TBT | EXA000001 | 170 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 3 | 81 | PRA000002 | SAA000087 | Neophocaen | CH0000155 | DBT | EXA000001 | 220.3591 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 4 | 82 | PRA000002 | SAA000087 | Neophocaen | CH0000156 | MBT | EXA000001 | 44.5445 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 5 | 83 | PRA000002 | SAA000087 | Neophocaen | CH0000157 | ΣBTs | EXA000001 | 434.9036 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 6 | 84 | PRA000002 | SAA000087 | Neophocaen | CH0000158 | TPT | EXA000001 | 12.922 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 7 | 85 | PRA000002 | SAA000087 | Neophocaen | CH0000159 | DPT | EXA000001 | 0.395 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 8 | 86 | PRA000002 | SAA000087 | Neophocaen | CH0000160 | ΣPTs | EXA000001 | 13.317 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 9 | 87 | PRA000002 | SAA000087 | Neophocaen | CH0000161 | TOT | EXA000001 | 0.6 | <6.00E-1 | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2018/6/13 |
| 10 | 88 | PRA000002 | SAA000087 | Neophocaen | CH0000162 | DOT | EXA000001 | 1.7 | <1.70E+0 | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2018/6/13 |
| 11 | 89 | PRA000002 | SAA000087 | Neophocaen | CH0000163 | MOT | EXA000001 | 1.5092 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 12 | 90 | PRA000002 | SAA000087 | Neophocaen | CH0000164 | Σoctyltins | EXA000001 | 1.5 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 13 | 91 | PRA000002 | SAA000088 | Neophocaen | CH0000154 | TBT | EXA000001 | 61.2117 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 14 | 92 | PRA000002 | SAA000088 | Neophocaen | CH0000155 | DBT | EXA000001 | 120 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 15 | 93 | PRA000002 | SAA000088 | Neophocaen | CH0000156 | MBT | EXA000001 | 7.2268 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 16 | 94 | PRA000002 | SAA000088 | Neophocaen | CH0000157 | ΣBTs | EXA000001 | 188.4385 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 17 | 95 | PRA000002 | SAA000088 | Neophocaen | CH0000158 | TPT | EXA000001 | 8.099 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 18 | 96 | PRA000002 | SAA000088 | Neophocaen | CH0000159 | DPT | EXA000001 | 0.632 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 19 | 97 | PRA000002 | SAA000088 | Neophocaen | CH0000160 | ΣPTs | EXA000001 | 8.731 | | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2016/8/8 |
| 20 | 98 | PRA000002 | SAA000088 | Neophocaen | CH0000161 | TOT | EXA000001 | 0.6 | <6.00E-1 | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2018/6/13 |
| 21 | 99 | PRA000002 | SAA000088 | Neophocaen | CH0000162 | DOT | EXA000001 | 1.7 | <1.70E+0 | ng/g wet | | 2016/7/4 | 2018/6/13 |

5. 化学物質からの検索

<Chemical Search 画面>

The screenshot shows the 'Chemicals' search page. At the top, there are four input fields: 'ChemicalID' (containing 'CH0000000'), 'Chemical Groups' (a dropdown menu), 'Chemical' (containing 'Chemical Name, IUPAC, Synonyms'), and 'CAS RN' (containing 'CAS'). Below these are 'Search' and 'Reset' buttons. A status bar indicates 'Show 50 entries' and 'Showing 1 to 50 of 1170 entries'. A pagination bar shows page 1 of 24. The main content is a table with 8 columns: ChemicalID, ChemGroup, ChemicalName, IUPAC, PubChem, CAS RN, Synonyms, and Samples. Two rows are visible, showing details for 2,3,7,8-TCDD and 1,2,3,7,8-PentaCDD.

| ChemicalID | ChemGroup | ChemicalName | IUPAC | PubChem | CAS RN | Synonyms | Samples |
|------------|-------------------------------------|--------------------|---------------------------------------|---------|------------|---|-------------------------|
| CH0000001 | Organochlorines Dioxins PCDDs | 2,3,7,8-TCDD | 2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-p-dioxin | 15625 | 1746-01-6 | 2,3,7,8-Tetrachlorodibenzo-p-dioxin, TCDD, Dioxin | Samples |
| CH0000002 | Organochlorines Dioxins PCDDs | 1,2,3,7,8-PentaCDD | 1,2,3,7,8-pentachlorodibenzo-p-dioxin | 38439 | 40321-76-4 | 1,2,3,7,8-pentachlorodibenzo-p-dioxin, PeCDD | Samples |

5 - 1. 検索条件

| | |
|---------------------|---|
| Chemical ID | 登録化学物質に付した ChemTHEATRE 固有の ID |
| Chemical Group | 登録されている化学物質分類群をプルダウンメニューから選択 (Organochlorines-Dioxins など) |
| Chemical | 化学物質名のフリーワード検索 |
| CAS RN [®] | CAS 登録番号による検索 |

条件を入力後、 を押すと結果が返ってくる

5 - 2. 化学物質一覧

| | |
|---------------------|-------------------------------|
| Chemical ID | 登録化学物質に付した ChemTHEATRE 固有の ID |
| Chemical Group | 化学物質の分類群 |
| Chemical Name | 化学物質名 |
| IUPAC | IUPAC 名 |
| PubChem | PubChem CID と PubChem へのリンク |
| CAS RN [®] | CAS 登録番号 |
| Synonyms | 別名 |
| Samples | 当該化学物質を測定するのに使ったサンプル一覧へのリンク |

5 - 3. 化学物質詳細画面

Chemical

| | |
|---------------|---|
| ChemicalID | CH0000001 |
| ChemGroup | Organochlorines Dioxins PCDDs |
| Chemical Name | 2,3,7,8-TCDD |
| IUPAC | 2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-p-dioxin |
| Synonyms | 2,3,7,8-Tetrachlorodibenzo-p-dioxin, TCDD, Dioxin |
| PubChem | 15625 |
| CAS RN ® | 1746-01-6 |
| Remarks | Link to Webkis-plus; |
| RegisterDate | 2016/8/18 |
| UpdateDate | 2016/8/26 |

「+」をクリック
↓
展 開
↓
サンプル ID を表示

Projects

- PRA000004
- PRA000005
- PRA000021
- PRA000024
- PRA000038
- PRA000058
- PRA000059
- PRA000069
- PRA000070
- PRA000071
- PRA000081
- PRA000086

Nyctereutes procyonoides +

Apodemus speciosus +

Mogera imaizumii +

Phoebastria albatrus +

| | |
|---------------|--|
| Chemical ID | 登録化学物質に付した ChemTHEATRE 固有の ID |
| ChemGroup | 当該化学物質が含まれる分類群 |
| Chemical Name | 化学物質名 |
| IUPAC | IUPAC 名 |
| Synonyms | 当該化学物質の別名 |
| PubChem | 当該化学物質の PubChem CID と PubChem 掲載ページへのリンク |
| CAS RN | CAS 登録番号 |
| Remarks | 備考 「Webkis-Plus」 へのリンク |
| Register Date | ChemTHEATRE への登録年月日 |
| Update Date | 情報の更新年月日 |

| | |
|----------|---|
| Projects | 当該化学物質が分析対象に含まれるプロジェクト ID →クリックで詳細画面 Project Details (p.6) へ |
| Samples | 当該プロジェクトで使用した試料の種類 →+で展開するとサンプル ID の一覧を表示 →サンプル ID をクリックで詳細画面 Sample Details (p.10) へ |

6. 濃度情報

<Measured Data 画面>

MeasuredData

ProjectID

SampleID

Sample Type

Scientific Name

Tissue / Organ

Keyword

Chemical Groups

Chemical Name

Collection Region

Collection Country

Collection Year -

Show entries
Showing 1 to 50 of 85947 entries

« [1](#) [2](#) [3](#) [4](#) [5](#) [6](#) [7](#) [8](#) ... [1718](#) [1719](#) »

| ProjectID | SampleID | Sample | Chemical | ExperimentID | MeasuredValue | Unit | Remarks | RegisterDate |
|-----------|-----------|--------|----------------------------|--------------|---------------|------|--------------------------------------|--------------|
| PRA000098 | SAA006432 | Air | Alcohol ethoxylate C15E015 | EXA000001 | <1.20E-3 | µg/L | Quantified using C12E015 as Standard | 2019/10/18 |
| PRA000098 | SAA006350 | Water | Alcohol ethoxylate C15E015 | EXA000001 | <1.20E-3 | µg/L | Quantified using C12E015 as Standard | 2019/10/18 |

6-1. 絞り込み検索

3-1. 参照のこと (p.4)

6-2. 濃度情報一覧

| | |
|----------------|--|
| Project ID | プロジェクト ID →クリックで Project Details (p.6)へ |
| Sample ID | 試料 ID →クリックで Sample Details (p.10)へ |
| Sample | 試料の種類 (生物:学名/非生物:水, 大気など) |
| Chemical | 測定された化学物質名 →クリックで Chemical Details (p.16)へ |
| Experiment ID | 実験 ID |
| Measured Value | 測定値 |
| Unit | 単位 (測定対象サンプルにより統一) 水: µg/L, 生物・土壌: ng/g |
| Remarks | 備考 |
| Register Date | 登録年月日 |

6-3. データのエクスポート (4-4.(p.13-14) 参照)

| | |
|----------------------------|---|
| Export samples (TSV) | 検索で絞り込まれた試料の詳細情報の一覧をエクスポート (タブ区切りのテキストファイル) |
| Export measured data (TSV) | 測定値一覧をエクスポート (タブ区切りのテキストファイル) |


7. ChemTHEATRE を用いた化学物質の生態リスク評価

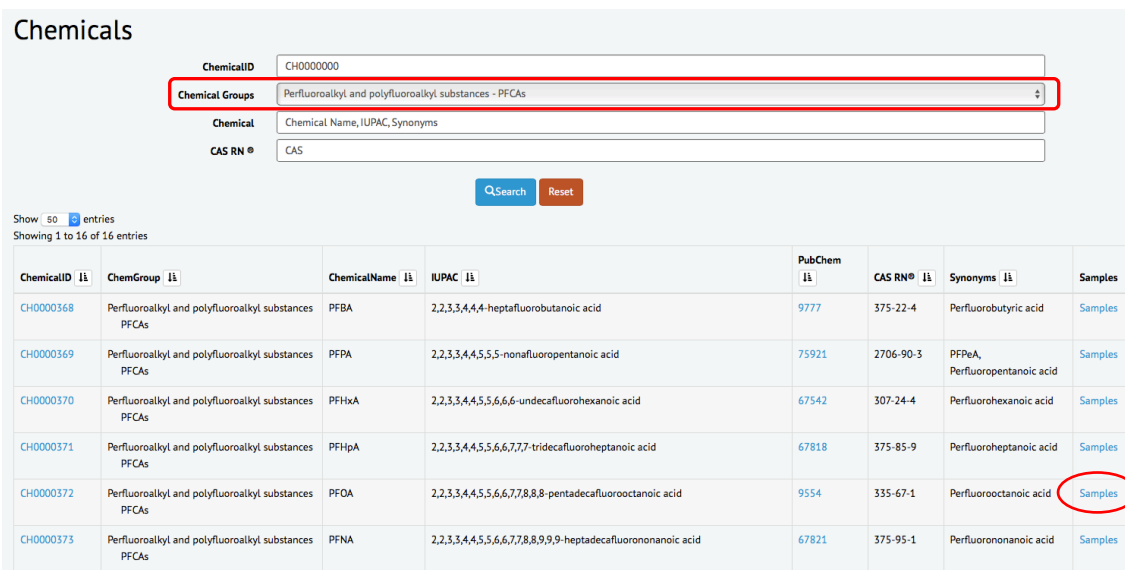
～リスク評価の実施例～

実際に特定の化学物質の情報取得からリスク評価までの一連の流れをやってみよう。

7-1. ChemTHEATRE から必要な測定値データを取得

<化学物質→サンプルタイプの流れでデータを絞り込んでみよう>

① Chemical Search 画面にて、Chemical Group の欄プルダウンメニューより「Perfluoroalkyl and Polyfluoroalkyl substances – PFCAs」を選択し、 をクリック。下画面のように、PFCAs に分類される化学物質が表示される。





Chemicals

ChemicalID CH0000000

Chemical Groups Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances - PFCAs

Chemical Chemical Name, IUPAC, Synonyms

CAS RN # CAS

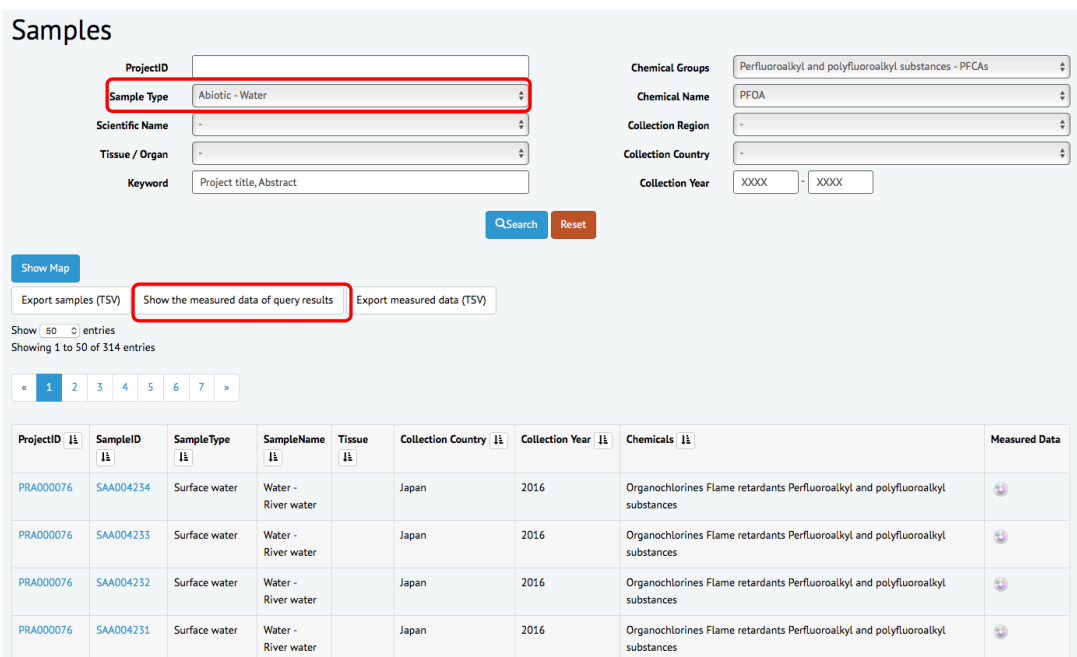
 

Show 50 entries
Showing 1 to 16 of 16 entries

| ChemicalID | ChemGroup | ChemicalName | IUPAC | PubChem | CAS RN# | Synonyms | Samples |
|------------|---|--------------|---|---------|-----------|--------------------------------|-------------------------|
| CH0000368 | Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances PFCAs | PFBA | 2,2,3,3,4,4,4-heptafluorobutanoic acid | 9777 | 375-22-4 | Perfluorobutyric acid | Samples |
| CH0000369 | Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances PFCAs | PFPA | 2,2,3,3,4,4,5,5,5-nonafluoropentanoic acid | 75921 | 2706-90-3 | PFPeA, Perfluoropentanoic acid | Samples |
| CH0000370 | Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances PFCAs | PFHxA | 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,6-undecafluorohexanoic acid | 67542 | 307-24-4 | Perfluorohexanoic acid | Samples |
| CH0000371 | Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances PFCAs | PFHpA | 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,7-tridecafluoroheptanoic acid | 67818 | 375-85-9 | Perfluoroheptanoic acid | Samples |
| CH0000372 | Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances PFCAs | PFOA | 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-pentadecafluorooctanoic acid | 9554 | 335-67-1 | Perfluorooctanoic acid | Samples |
| CH0000373 | Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances PFCAs | PFNA | 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,9-hepta-decafluorononanoic acid | 67821 | 375-95-1 | Perfluorononanoic acid | Samples |

② 「PFOA」を見つけ、その列の [Samples](#) をクリックすると、Samples 画面へ移動。PFOA の測定値が存在する試料の一覧が表示される。

③ Sample Type 欄のプルダウンメニューより「Abiotic – Water」を選択、 をクリック。



Samples

ProjectID

Sample Type Abiotic - Water

Scientific Name

Tissue / Organ

Keyword Project title, Abstract



Chemical Groups Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances - PFCAs

Chemical Name PFOA

Collection Region

Collection Country

Collection Year XXXX - XXXX





 

Show Map

Export samples (TSV) [Show the measured data of query results](#) Export measured data (TSV)

Show 50 entries
Showing 1 to 50 of 314 entries

< 1 2 3 4 5 6 7 >

| ProjectID | SampleID | SampleType | SampleName | Tissue | Collection Country | Collection Year | Chemicals | Measured Data |
|-----------|-----------|---------------|---------------------|--------|--------------------|-----------------|--|---|
| PRA000076 | SAA004234 | Surface water | Water - River water | | Japan | 2016 | Organochlorines Flame retardants Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances |  |
| PRA000076 | SAA004233 | Surface water | Water - River water | | Japan | 2016 | Organochlorines Flame retardants Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances |  |
| PRA000076 | SAA004232 | Surface water | Water - River water | | Japan | 2016 | Organochlorines Flame retardants Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances |  |
| PRA000076 | SAA004231 | Surface water | Water - River water | | Japan | 2016 | Organochlorines Flame retardants Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances |  |

④ 前画面において、**Show the measured data of query results** をクリックすると、下図のように測定値の一覧が表示される。測定値の単位は水の場合「 $\mu\text{g/L}$ 」で統一されている。

MeasuredData

ProjectID:
 SampleID:
 Sample Type: Abiotic - Water
 Scientific Name: -
 Tissue / Organ: -
 Keyword: Project title, Abstract

Chemical Groups: Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances - PFCA
 Chemical Name: PFOA
 Collection Region: -
 Collection Country: -
 Collection Year: XXXX - XXXX

Export samples (TSV) **Export measured data (TSV)**

Show 50 entries
Showing 1 to 50 of 218 entries

| ProjectID | SampleID | Sample | Chemical | ExperimentID | MeasuredValue | Unit | Remarks | RegisterDate |
|-----------|-----------|--------|----------|--------------|---------------|-----------------|---------|--------------|
| PRA000076 | SAA004234 | Water | PFOA | EXA000001 | 3.40E-4 | $\mu\text{g/L}$ | | 2018/10/05 |
| PRA000076 | SAA004233 | Water | PFOA | EXA000001 | 4.00E-4 | $\mu\text{g/L}$ | | 2018/10/05 |
| PRA000076 | SAA004232 | Water | PFOA | EXA000001 | 5.60E-4 | $\mu\text{g/L}$ | | 2018/10/05 |
| PRA000076 | SAA004231 | Water | PFOA | EXA000001 | 7.60E-4 | $\mu\text{g/L}$ | | 2018/10/05 |
| PRA000076 | SAA004230 | Water | PFOA | EXA000001 | 1.40E-3 | $\mu\text{g/L}$ | | 2018/10/05 |
| PRA000076 | SAA004229 | Water | PFOA | EXA000001 | 3.10E-3 | $\mu\text{g/L}$ | | 2018/10/05 |
| PRA000076 | SAA004163 | Water | PFOA | EXA000001 | 1.00E-3 | $\mu\text{g/L}$ | | 2018/10/05 |

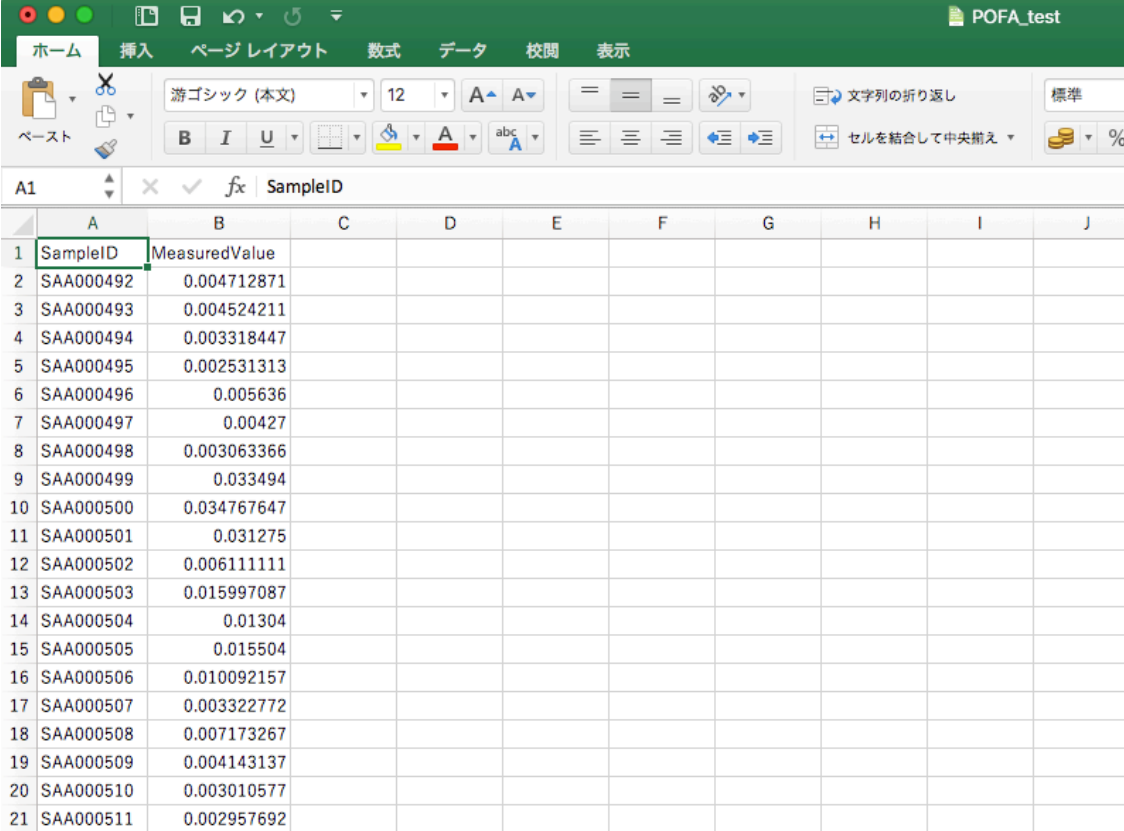
⑤ 本画面もしくは試料検索結果画面の **Export measured data (TSV)** をクリックすると、タブ区切りのテキスト形式で測定値の一覧がダウンロードできる。

⑥ ダウンロードしたファイルを MS エクセルで開くと、下図のように表示される。

| MeasuredID | ProjectID | SampleID | ScientificName | ChemicalID | ChemicalName | ExperimentID | MeasuredValue | AlternativeData | Unit | Remarks | RegisterDate | UpdateDate |
|------------|-----------|-----------|----------------|------------|--------------|--------------|---------------|-----------------|-----------------|---------|--------------|------------|
| 10837 | PRA000015 | SAA000492 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.004712871 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 10850 | PRA000015 | SAA000493 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.004524211 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 10863 | PRA000015 | SAA000494 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.003318447 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 10876 | PRA000015 | SAA000495 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.002531313 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 10889 | PRA000015 | SAA000496 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.005636 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 10902 | PRA000015 | SAA000497 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.00427 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 10915 | PRA000015 | SAA000498 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.003063366 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 10928 | PRA000015 | SAA000499 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.033494 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 10941 | PRA000015 | SAA000500 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.034767647 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 10954 | PRA000015 | SAA000501 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.031275 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 10967 | PRA000015 | SAA000502 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.006111111 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 10980 | PRA000015 | SAA000503 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.015997087 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 10993 | PRA000015 | SAA000504 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.01304 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 11006 | PRA000015 | SAA000505 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.015504 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 11019 | PRA000015 | SAA000506 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.01092157 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 11032 | PRA000015 | SAA000507 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.003322772 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 11045 | PRA000015 | SAA000508 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.007173267 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 11058 | PRA000015 | SAA000509 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.004143137 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 11071 | PRA000015 | SAA000510 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.003010577 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 11084 | PRA000015 | SAA000511 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.002957692 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 11097 | PRA000015 | SAA000512 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.0014 | <1.40E-3 | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/13 |
| 11110 | PRA000015 | SAA000513 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.00356 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |
| 11123 | PRA000015 | SAA000514 | Water | CH0000372 | PFOA | EXA000001 | 0.002913 | | $\mu\text{g/L}$ | | 2016/11/25 | 2018/6/8 |

⑦ 本ファイルのデータのうち、データ ID (MeasuredID または SampleID) と MeasuredValue のみを残して、タブ区切りテキストファイルとして保存。

このファイルを AIST-MeRAM に読み込ませて、曝露評価およびリスク評価を実施する。



| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J |
|----|-----------|---------------|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | SampleID | MeasuredValue | | | | | | | | |
| 2 | SAA000492 | 0.004712871 | | | | | | | | |
| 3 | SAA000493 | 0.004524211 | | | | | | | | |
| 4 | SAA000494 | 0.003318447 | | | | | | | | |
| 5 | SAA000495 | 0.002531313 | | | | | | | | |
| 6 | SAA000496 | 0.005636 | | | | | | | | |
| 7 | SAA000497 | 0.00427 | | | | | | | | |
| 8 | SAA000498 | 0.003063366 | | | | | | | | |
| 9 | SAA000499 | 0.033494 | | | | | | | | |
| 10 | SAA000500 | 0.034767647 | | | | | | | | |
| 11 | SAA000501 | 0.031275 | | | | | | | | |
| 12 | SAA000502 | 0.006111111 | | | | | | | | |
| 13 | SAA000503 | 0.015997087 | | | | | | | | |
| 14 | SAA000504 | 0.01304 | | | | | | | | |
| 15 | SAA000505 | 0.015504 | | | | | | | | |
| 16 | SAA000506 | 0.010092157 | | | | | | | | |
| 17 | SAA000507 | 0.003322772 | | | | | | | | |
| 18 | SAA000508 | 0.007173267 | | | | | | | | |
| 19 | SAA000509 | 0.004143137 | | | | | | | | |
| 20 | SAA000510 | 0.003010577 | | | | | | | | |
| 21 | SAA000511 | 0.002957692 | | | | | | | | |

7-2. AIST-MeRAM で測定値データを評価

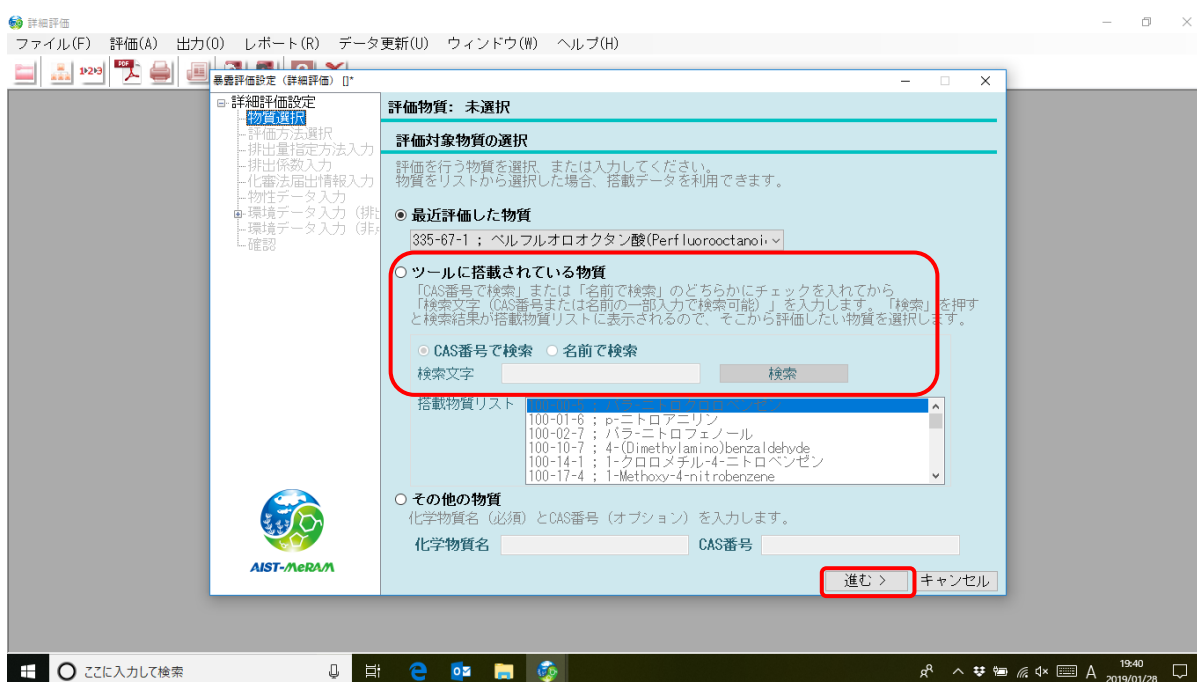
AIST-MeRAM (アイストミラム) とは、「産総研-汎用生態リスク評価管理ツール」の略称で、誰でも簡便に使える、かつ、無料で入手できる、化学物質生態リスク評価管理のためのソフトウェアです。高度なリスク評価技術および膨大な評価用データを搭載した「準人工知能リスク評価管理システム」です。詳しくは <https://meram.aist-riss.jp>

7-2-1. 暴露評価

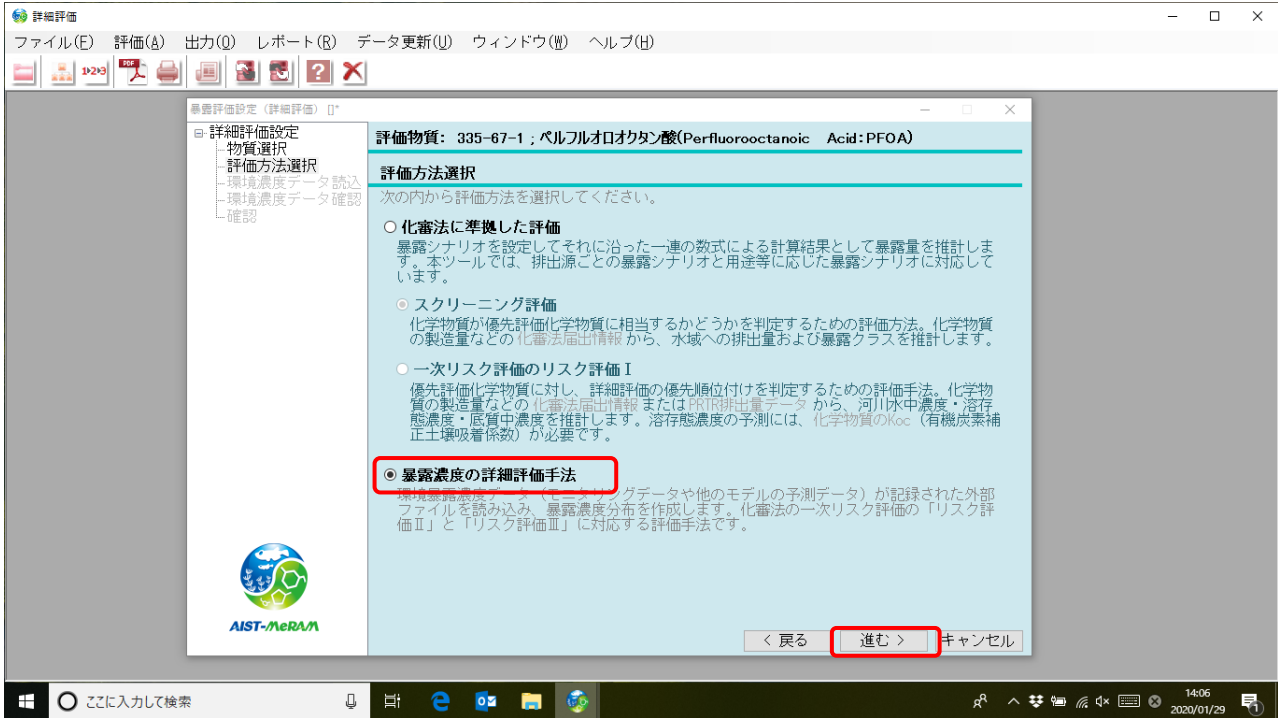
- ① AIST-MeRAM を起動させ、「詳細評価」をクリック。すると下図の画面が現れる。「暴露評価」をクリックする。



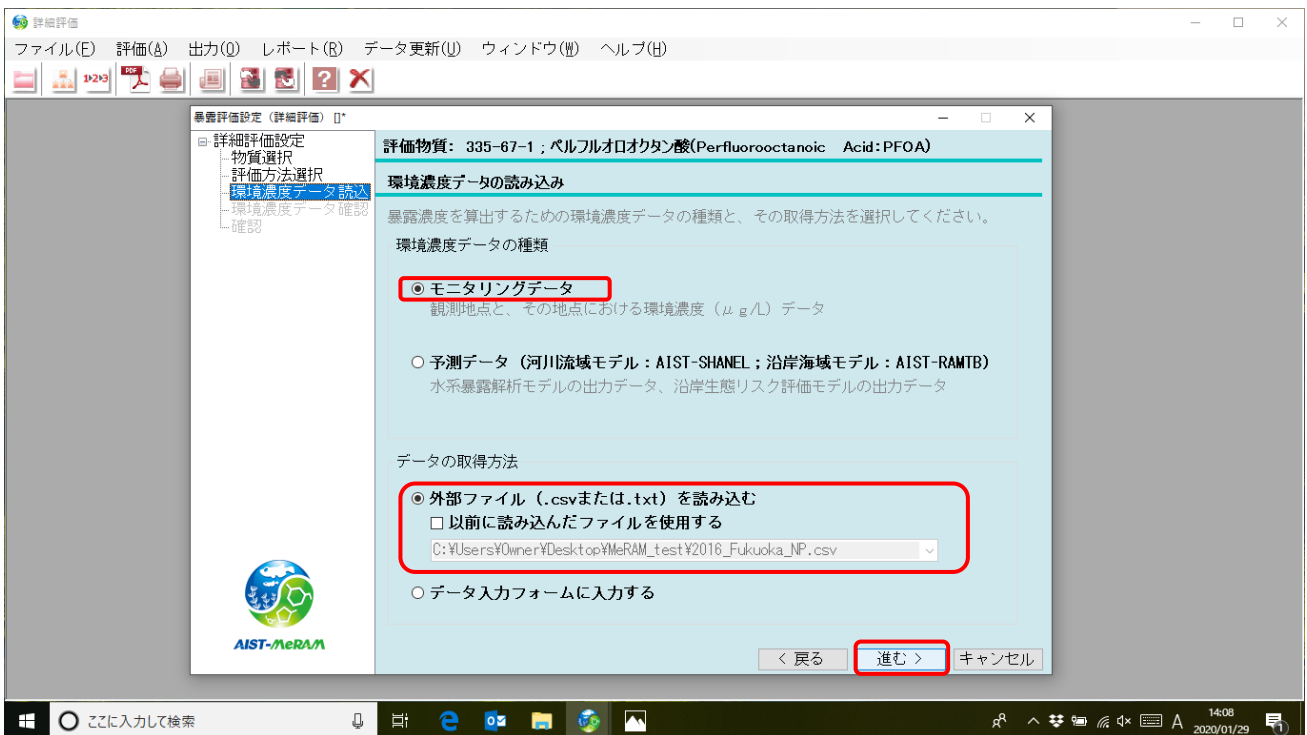
- ② 評価対象の化合物を選択。化合物は CAS 登録番号または名前から検索可能。(今回は評価対象に PFOA を選択) 「進む」をクリック。



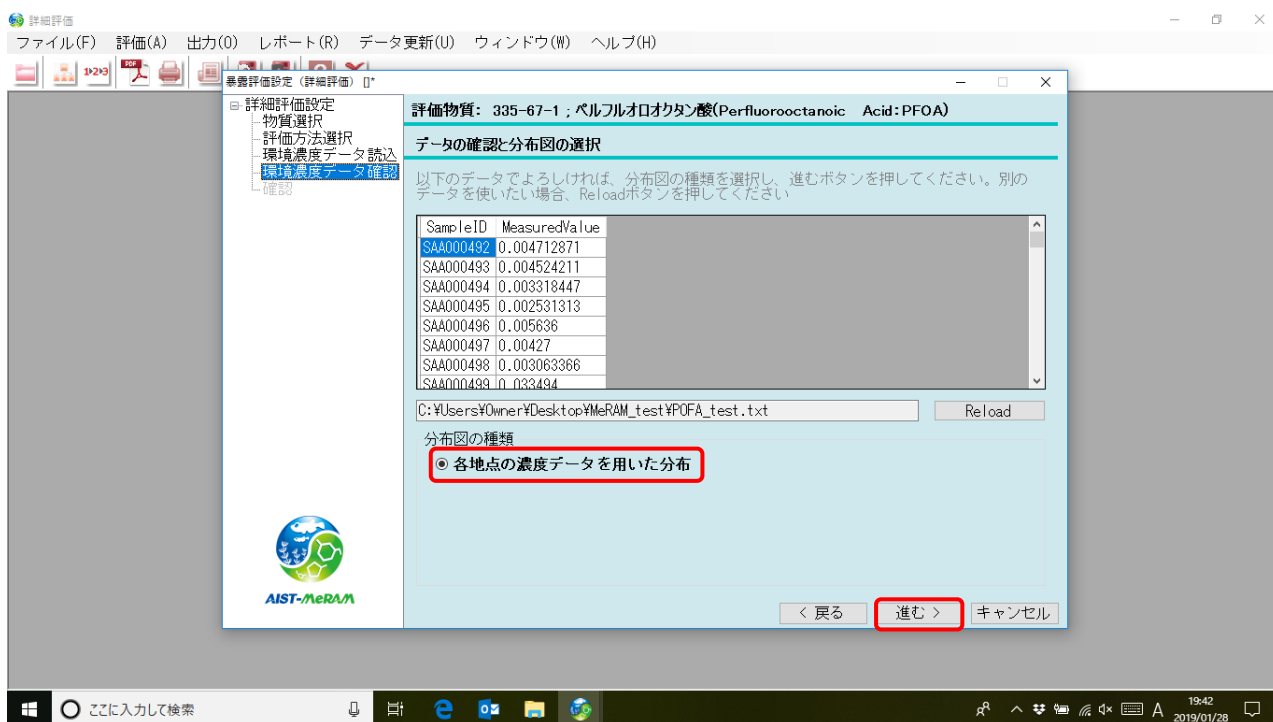
③ 「暴露濃度の詳細評価手法」を選択し次の画面へ進む。



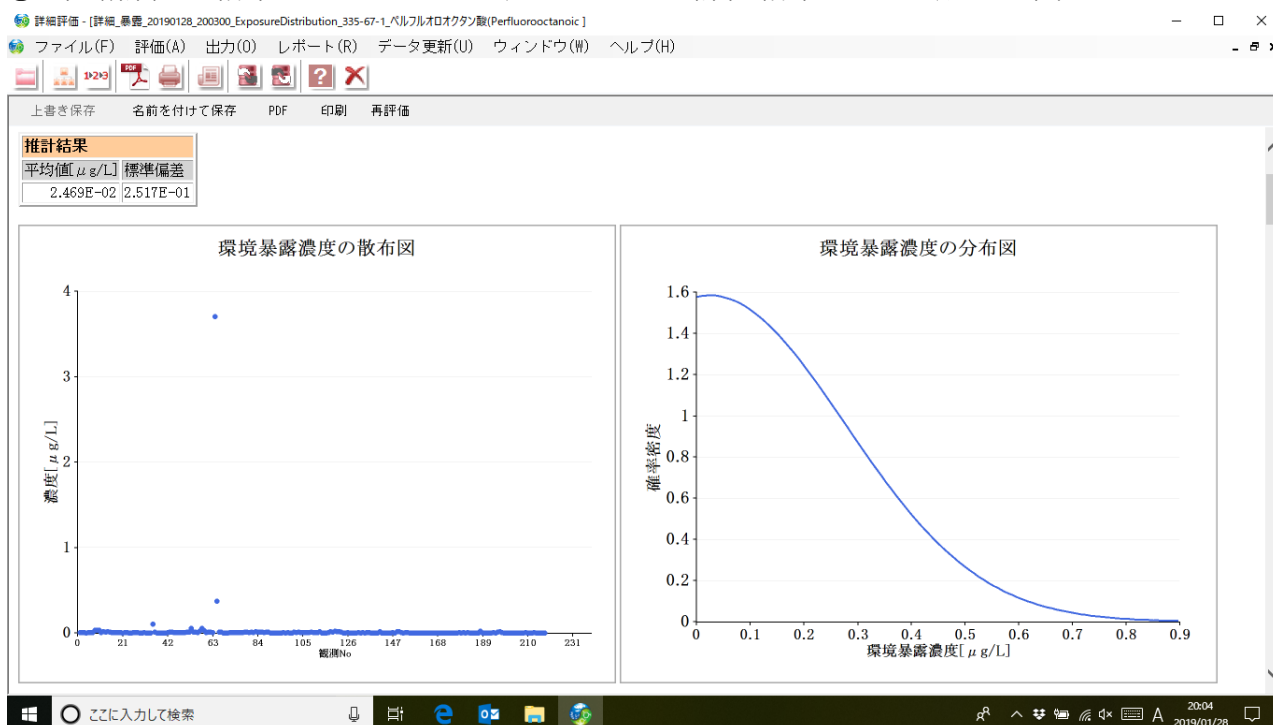
④ 「モニタリングデータ」、「外部ファイルを読み込む」を選択し、ChemTHEATRE からエクスポートした濃度データのタブ区切りファイル (20 ページで作成) を選択し、インポートする。



- ⑤ インポートが成功すると、下図のように表示される。その後は画面の指示に従って進み、暴露評価を実行する。



- ⑥ 暴露評価の結果は下図のように表示される。評価結果はPDF形式で出力可能。



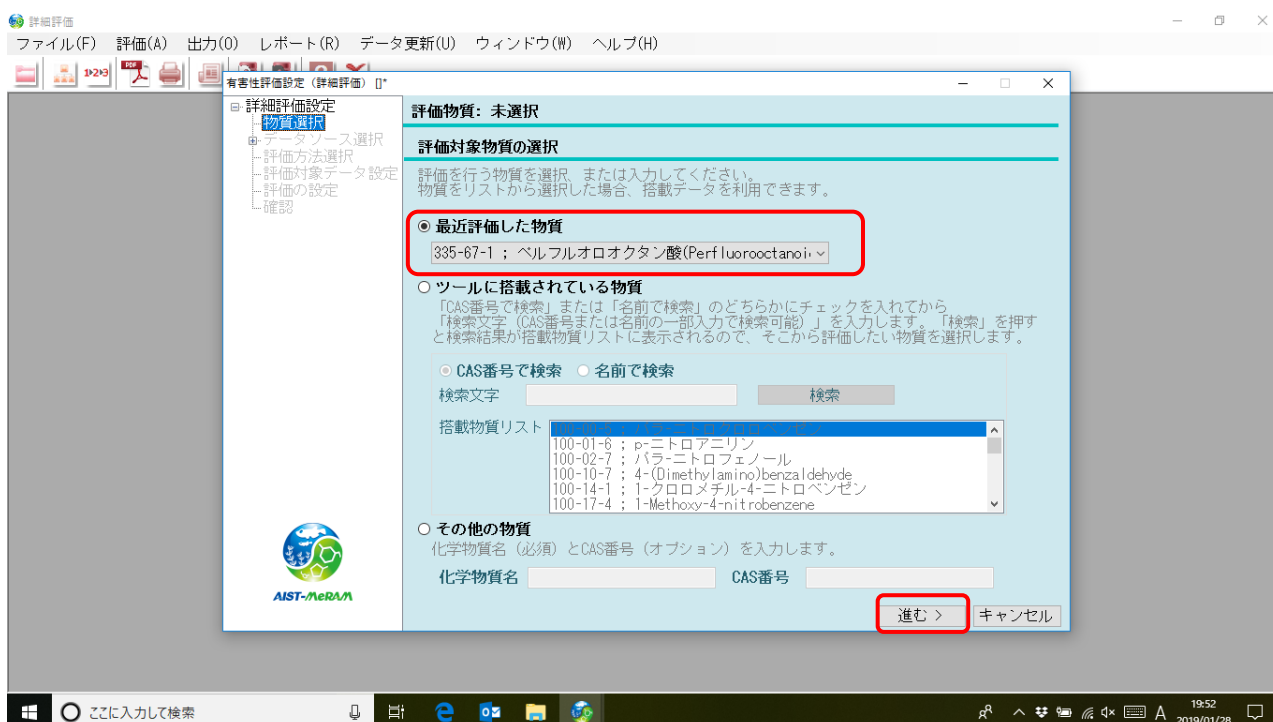
- ⑦ 引き続き、AIST-MeRAMで有害性評価を実行する。(暴露評価の結果は開いたまま)

7-2-2. 有害性評価

① 下図の通り、「有害性評価」をクリック。

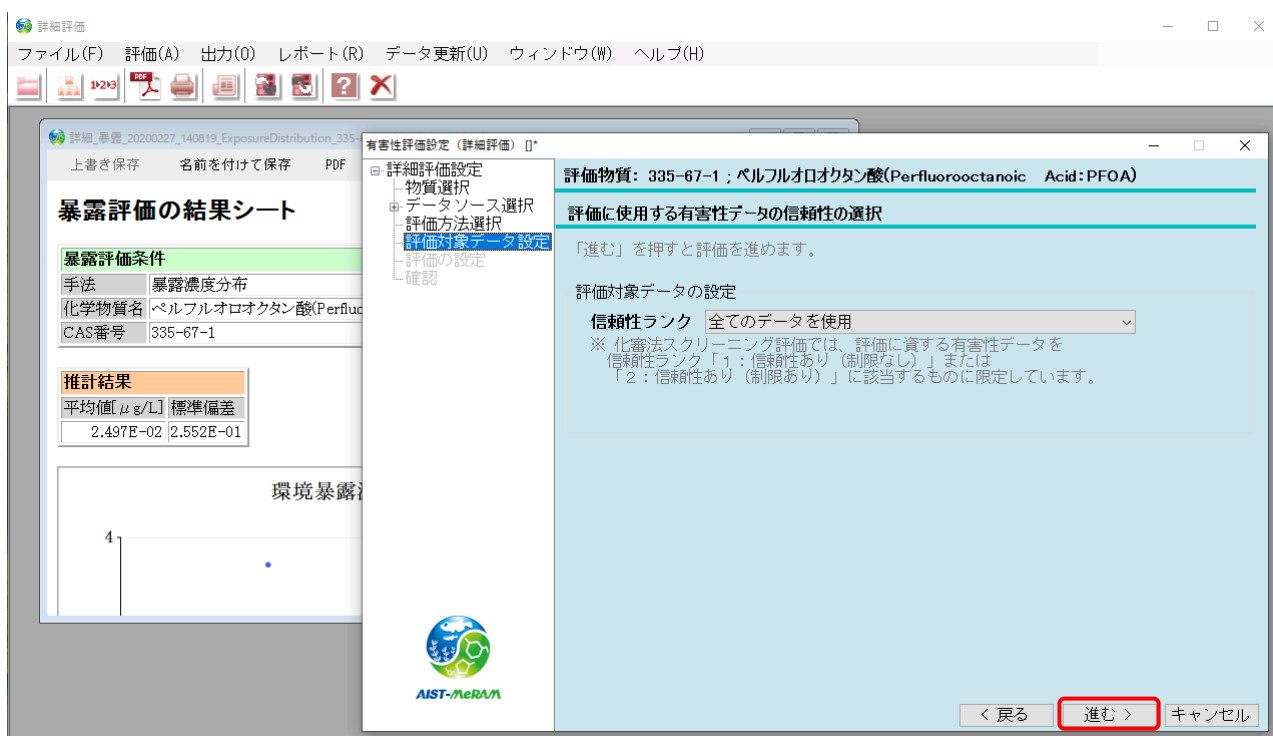
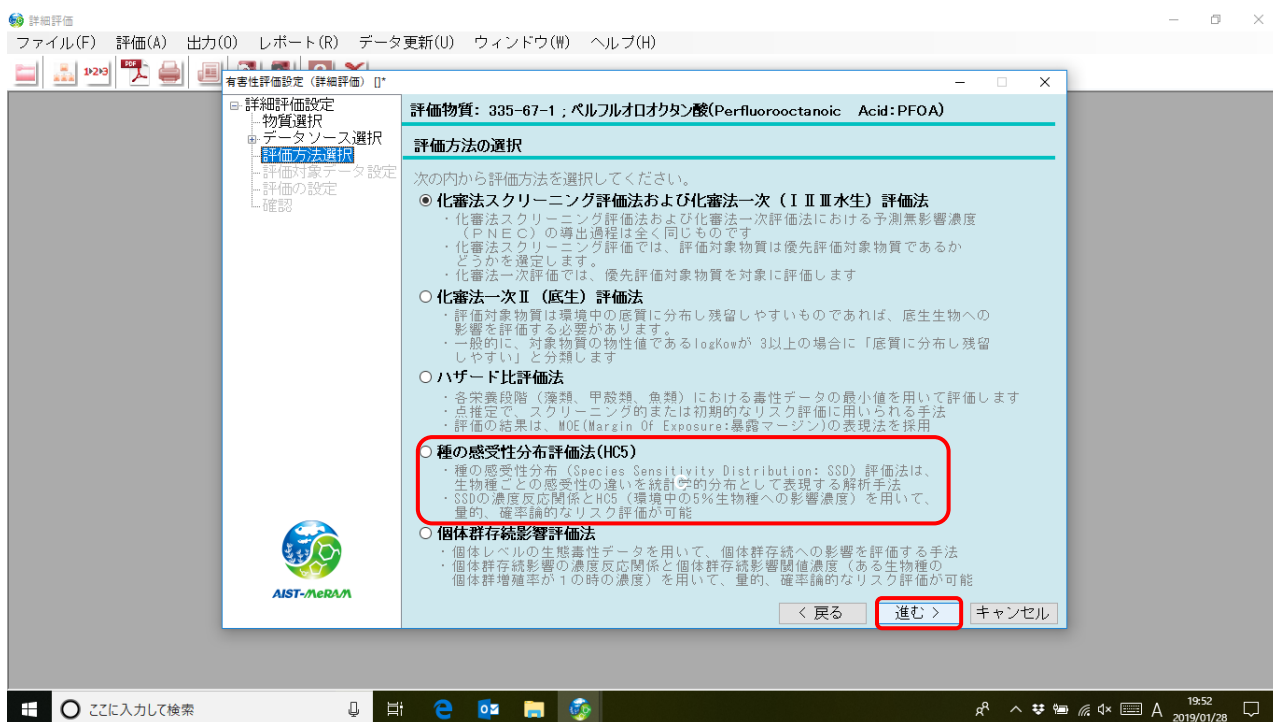


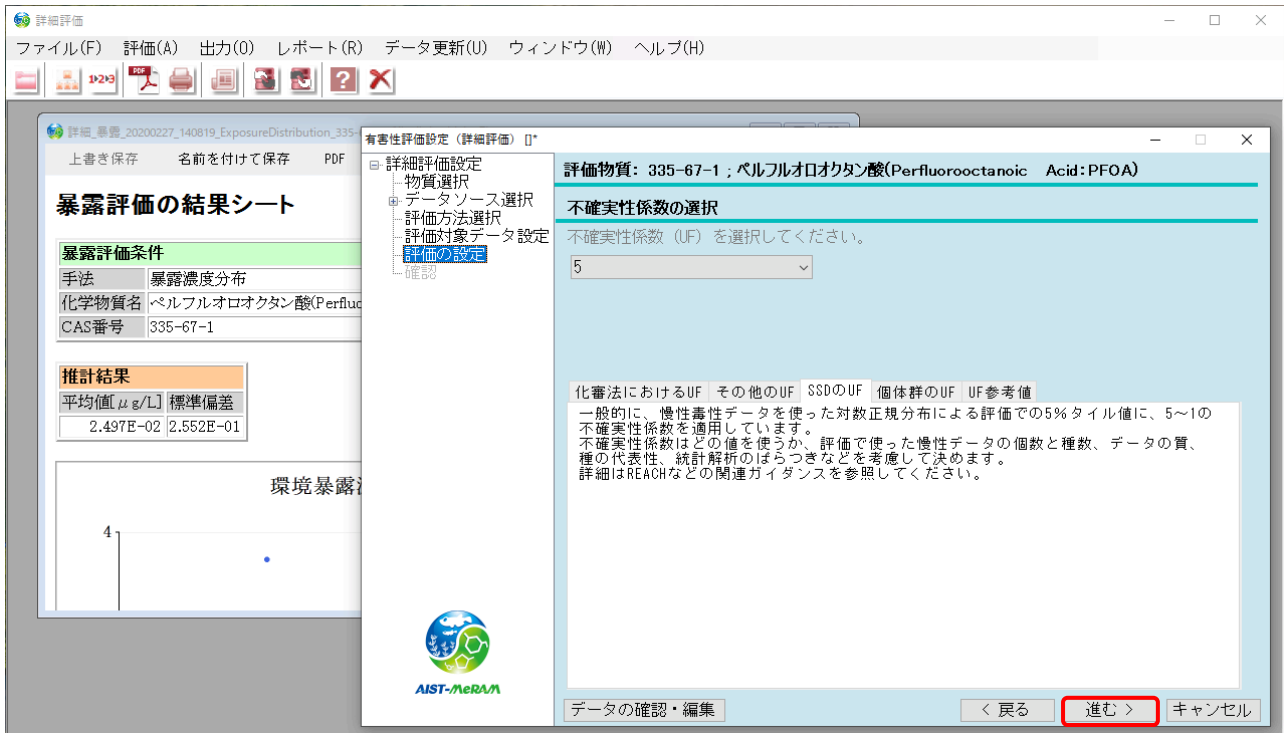
② 評価対象の化合物を選択し、次に進む。(今回は PFOA)



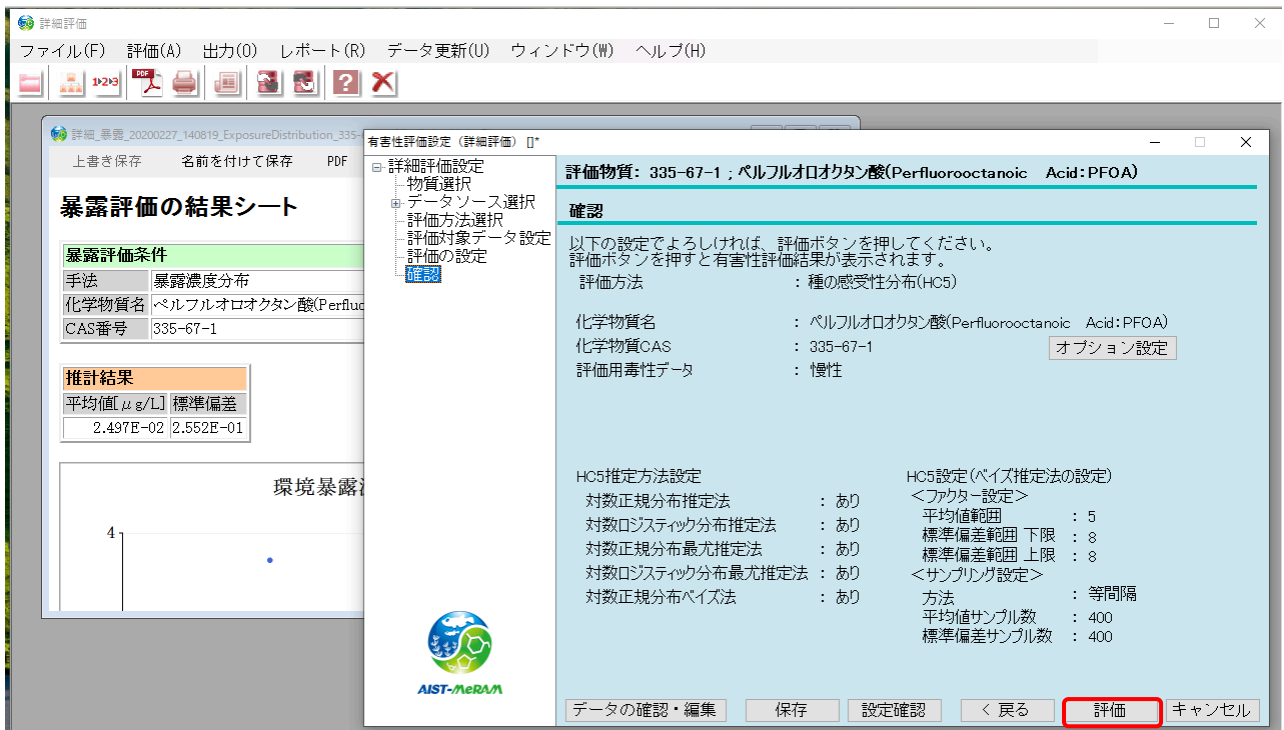
次ページ「データソース選択」はデフォルトの情報のまま「進む」

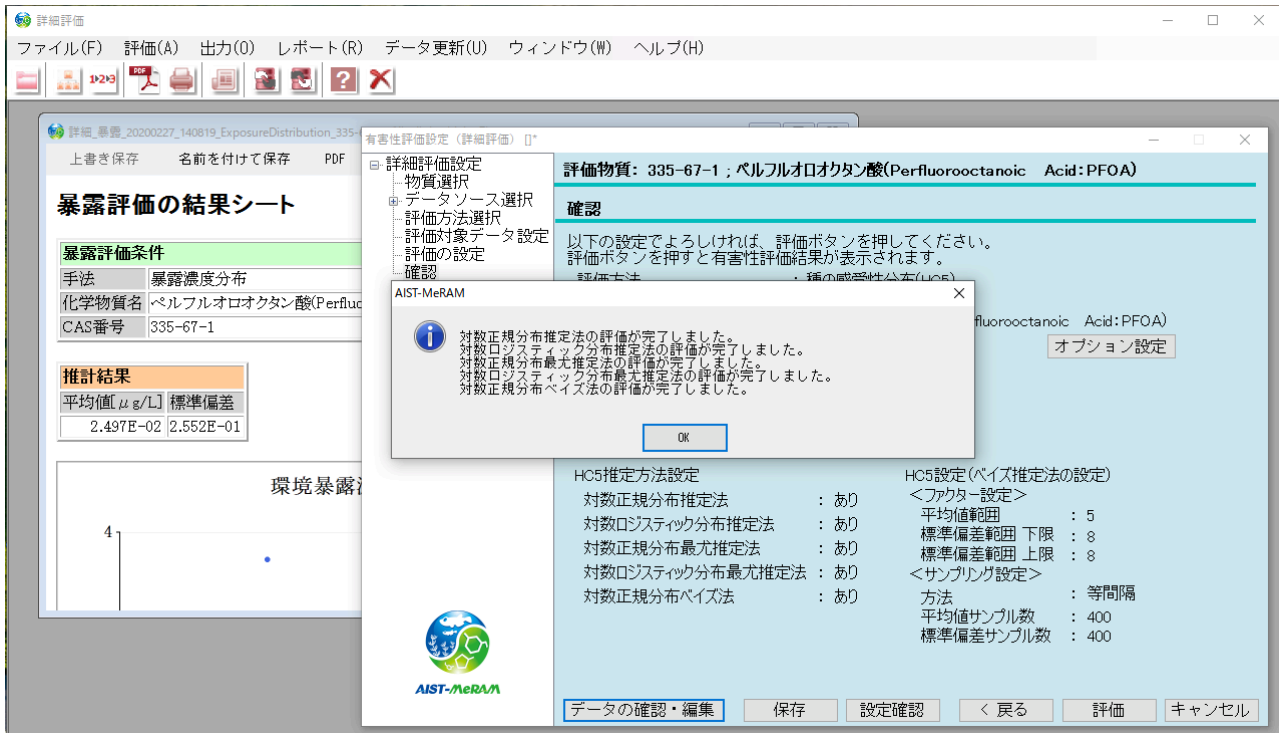
③ 任意の評価方法を選択して、有害性評価を実行する。（今回は「種の感受性分布評価法」を選択）



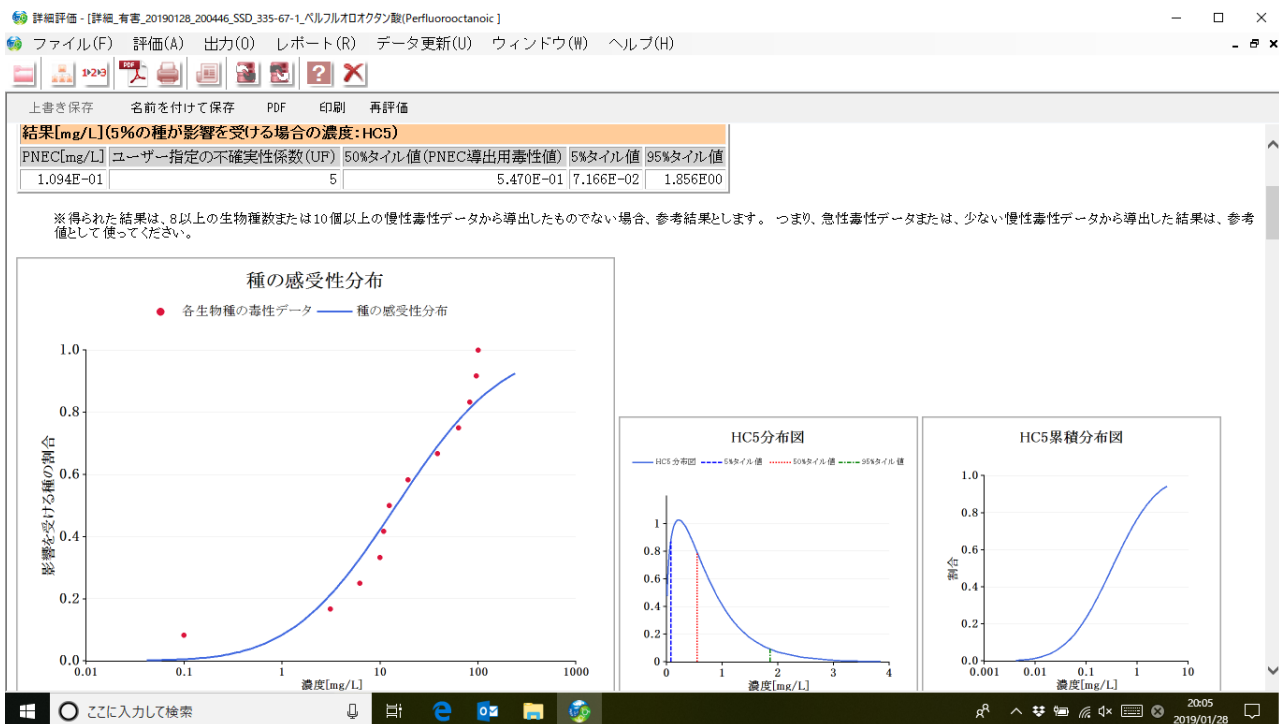


④ 「評価」をクリック





⑤ 有害性評価の実行結果は下図のように表示される。
今回の例は「種の感受性分布 (SSD)」の結果。

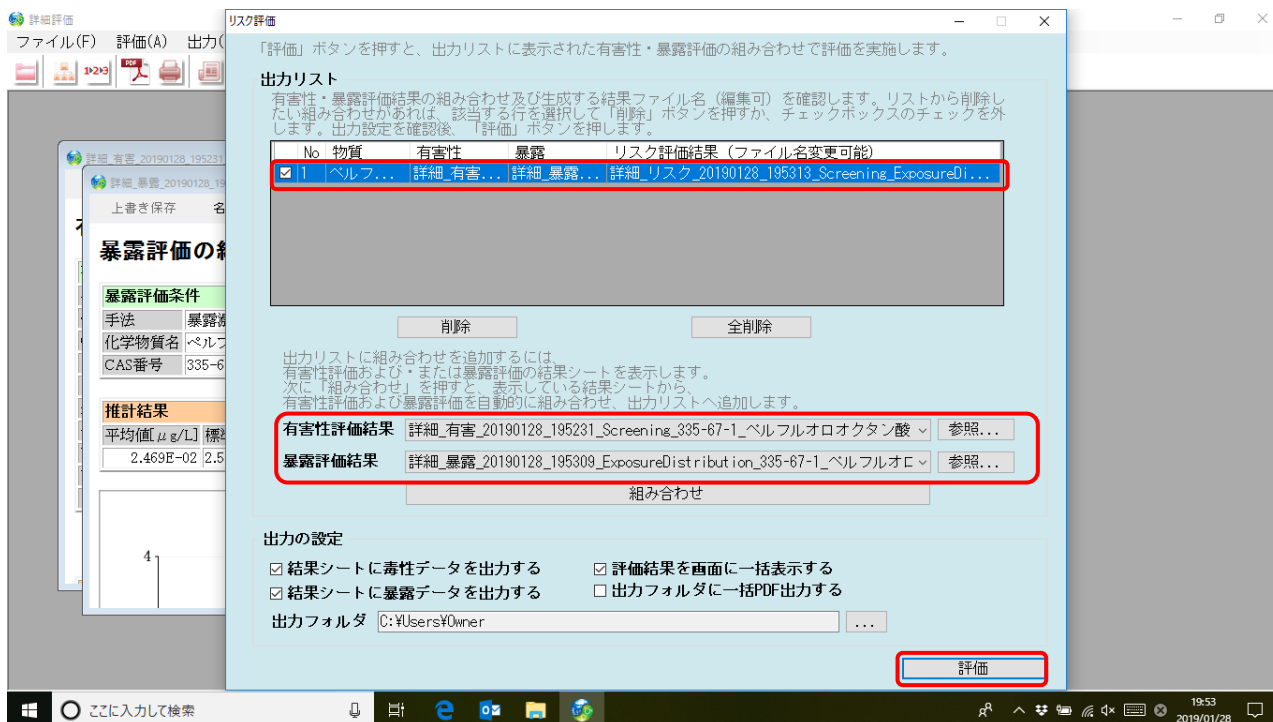
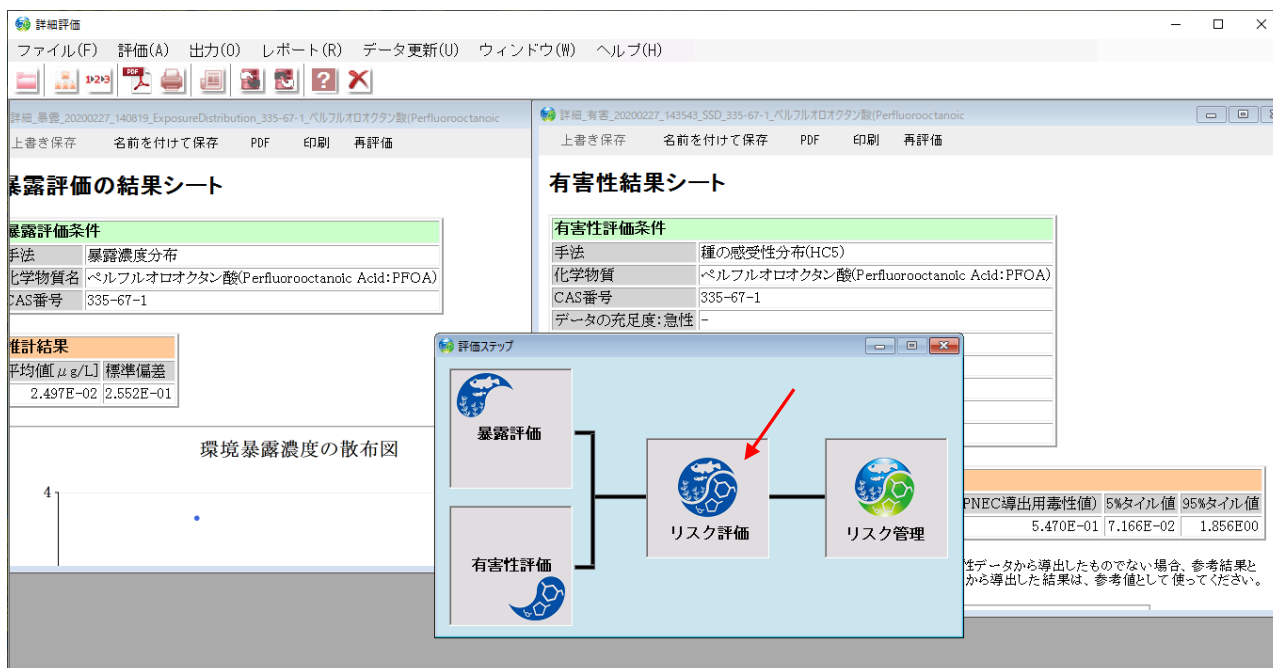


⑥ 得られた曝露評価の結果と有害性評価の結果を用いて（両結果は開いたまま），リスク評価を実行する。

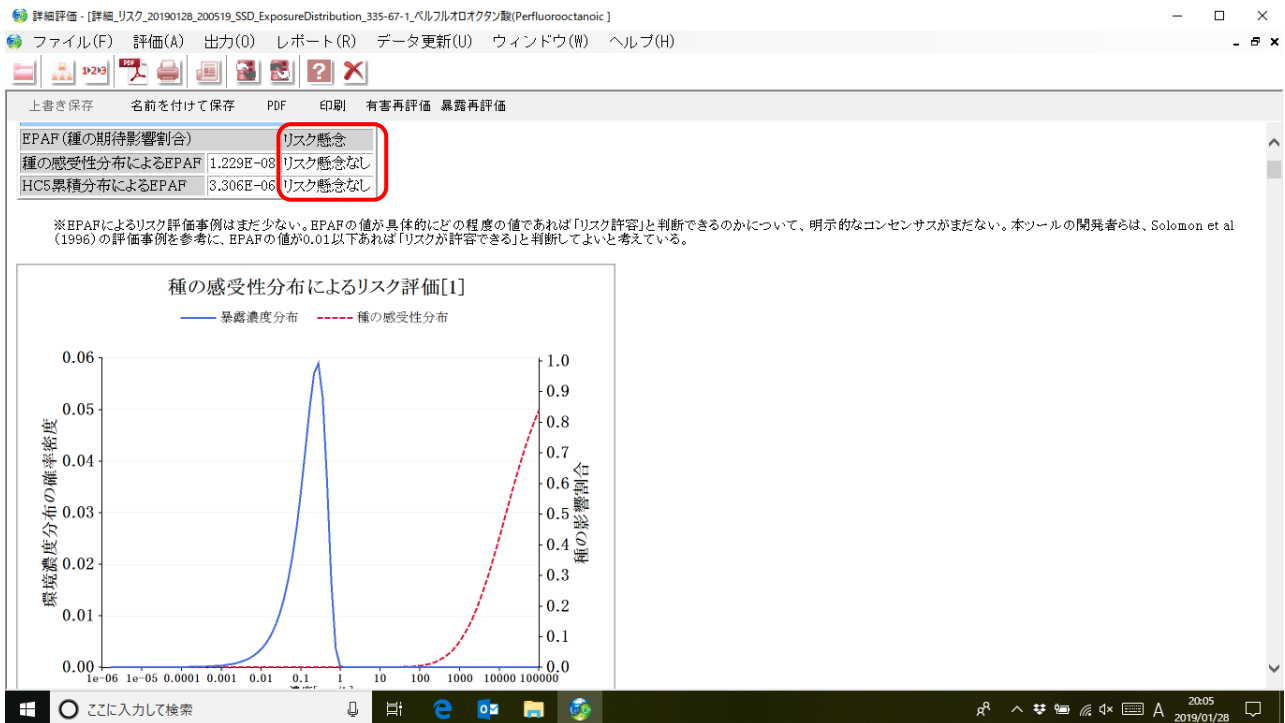
7-2-3. リスク評価

①「リスク評価」を選択。

次ページで評価する物質名、ファイル名を確認の上「評価」をクリック。



② リスク評価を実行すると、その結果が下図のように出力される。
 リスク懸念の有無についても表示される。
 出力結果はPDFファイルとして保存可能である。



8. ChemTHEATRE 利用について (サイトポリシー)

ChemTHEATRE (ケムシアター) (以下, 「本サイト」といいます。) は, 環境中化学物質の濃度情報に関するデータベースで, 化学物質のモニタリング情報を収録・閲覧できるプラットフォームです。

学術論文や公的機関等の調査で報告されている環境中の化学物質の実態に関する情報を統一した形式で収録しています。濃度測定値のみならず, 濃度を測定した「試料に関する情報」と濃度測定の際の「分析法に関する情報」のメタデータも併せて収録しています。試料の種類や時空間情報, 化合物種からの測定データ検索が可能です。

利用規約

この利用規約 (以下, 「本規約」といいます。) は, 本サイトの利用条件を定めるものです。

本サイトの利用に際しては, ウェブ上で本規約の内容をご確認ください。本サイトの利用をもって, 本規約の内容を承諾いただいたものとみなします。なお, 本規約は変更されることがあります。利用に際してはこのページで本規約の最新の内容をご確認ください。本サイトから, 外部機関が運営するウェブサイトへリンクされている場合がありますが, 各ウェブサイトの利用については, それぞれの利用条件に同意の上ご利用ください。

使用許諾

ウェブサイト (ChemTHEATRE)

CC BY-SA 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.ja>) に従います。

データとサービス

本サイトで公開している情報は, 別途規定がない限り, どなたでも複製, 公衆送信, 翻訳・変形等の翻案等, 自由に利用できます。データを登録される方ならびに利用される方は本利用規約の内容を理解した上で, ご協力, ご利用くださいますようお願い致します。

登録に付随する権利について

登録者は自身の研究の進展, 誤りを正すなどの理由により, 自身が登録した登録情報を修正・更新することができます。修正・更新する場合は, register@chem-theatre.com までご連絡ください。

データの利用条件・出典の記載について

1. 本サイトに掲載されている情報、および各測定値データを利用する際は出典を記載してください。利用したいデータの Project Details を開き、そこに記載されているオリジナル論文情報や公開ページの URL 等を出典として記載してください。
2. 本サイトの情報を編集・加工等して利用する場合は、上記出典とは別に、編集・加工等を行ったことを記載してください。なお、編集・加工した情報を、あたかも ChemTHEATRE が作成したかのような態様で公表・利用しないでください。
3. 商用目的での使用は、禁止する旨の記載がない限り可能です。

第三者の権利侵害の禁止について

1. 本サイト上のコンテンツの中には、第三者が著作権その他の権利を有している場合があります。第三者が著作権を有している情報や、第三者が著作権以外の権利を有しているデータについては、時に権利処理済みであることが明示されているものを除き、利用者の責任で当該第三者から利用許諾を得てください。
2. 情報のうち、第三者が権利を有しているものについては、出典の表記等によって第三者が権利を有していることを直接的または間接的に表示・示唆しているものもありますが、明確に第三者が権利を有している部分の特定・明示等を行っていないものもあります。利用する場合は利用者の責任において確認してください。

免責について

1. 本サイトに掲載されている情報の正確さについては万全を期しておりますが、ChemTHEATRE は利用者が本サイトの情報を用いて行う一切の行為について、何ら責任を負うものではありません。
2. 本サイトからリンクされているホームページの情報についての責任、その内容から発生する問題もしくは副次的にもたらされるあらゆる問題についての責任はすべて、リンク先のホームページそれぞれの管理者等が負っており、ChemTHEATRE は一切責任を負えませんので御了承ください。
3. 本サイトは、予告なしに内容を変更、移転または削除することがありますので、あらかじめご了承ください。
4. 利用者は、本サイトポリシーの違反、個別規約の違反または利用者が本サービスに登録した情報に起因して、他の利用者その他第三者からのクレームを受けた場合、また第三者に対してクレーム等が生じた場合には、自己の責任と費用で、これらのクレームおよび紛争を解決するものとします。ChemTHEATRE はかかるクレームおよび紛争について、何ら責任を負いません。

リンクについて

本サイトへのリンクはフリーです。事前にご連絡いただくと助かります。

ただし、以下に該当するサイトからのリンクはお断りします。

- 法律、法令等に抵触、または抵触する恐れがある内容を含むもの。
- 公序良俗に反するもの。
- 本サイトがリンク元サイトの一部と誤解を招くようなリンクの場合。

CAS 登録番号について

CAS 登録番号 (CAS Registry Number®) は、米国化学会の一部門である Chemical Abstracts Service (CAS) の知的財産であり、CAS の使用許可に基づいて使用されています。CAS の事前許可なく CAS 登録番号を再配布することは禁止されています。

禁止事項

本サイト上のいかなるサービスまたは情報の利用に際しても、以下の事項を行うことは禁止します。

1. ChemTHEATRE または第三者の知的所有権、プライバシー権、その他の権利を侵害する行為、名誉、信用、財産を毀損する行為、またはこれらの行為を助長する行為
2. 犯罪行為、もしくは犯罪に結びつく恐れのある行為
3. 公序良俗に違反する行為
4. 法令に違反する、または違反する恐れのある行為
5. 不正アクセス、大量の情報送信など、本サイト上のサービスや本サイトの運営に支障を与える行為
6. ウイルスを含むファイル、汚染ファイルやその他、第三者のコンピュータの機能に損害を与えるようなファイルまたはウェブサイトへのリンクを保存または頒布する行為

以上の行為を行なったと ChemTHEATRE が判断した場合、ChemTHEATRE は事前に利用者に何ら通知を行うことなく、当該利用者の本サイトまたは本サービスの利用停止および当該利用者が本サービスで保存したデータの削除を行うことができ、ChemTHEATRE はこれらの措置によって利用者に発生したいかなる損害についても責任を負わないものとします。また、利用者が以上の行為を行なったことに起因して、ChemTHEATRE または第三者が何らかの損害を被った場合、当該利用者は ChemTHEATRE または第三者に対してその全ての損害を賠償するものとします。なお、この規定は ChemTHEATRE が利用者の登録した情報の内容について監視する義務を負うことを定めるものではありません。

(2019年2月19日改正)