

Отказ от отговорност: Текстът е превод от оригинала. Оригиналният документ е наличен на английски език на уебсайта на ЕСНА.

ECHA/NA/12/49

Версия 3.0 на кутията с инструменти QSAR (QSAR Toolbox) вече е налична

Новото поколение на кутията с инструменти QSAR е по-пълнен инструмент за надеждно прогнозиране на свойствата на химикалите.

Хелзинки, 31 октомври 2012 г. – Кутията с инструменти QSAR помага на дружествата и органите да използват методологиите на количествената зависимост структура-активност ((Q)SAR) за групиране на химични вещества в категории и запълване на празноти в данните чрез read-across анализ и анализ на тенденциите с цел да се оцени опасността от (еко)токсичност на химичните вещества за регистрация по REACH. Това спомага за намаляването на разходите и ненужното изпитване върху гръбначни животни.

Кутията с инструменти QSAR Toolbox 3.0 съдържа много нови функции, най-важните от които са:

- включване на допълнителни източници на данни, включително резултати от изпитвания от уебсайта за разпространение на REACH;
- съвместимост с IUCALID 5.4;
- прогнозиране по количествен път на токсичността на смесите;
- прогнозиране на тавтомерни форми и симулатор на метаболизъм;
- прилагане на пътища на неблагоприятен изход (AOPs), свързани с кожна сенсибилизация, допълнено от три нови бази данни, съдържащи AOPs данни за кожна сенсибилизация.

Освен това кутията с инструменти QSAR съдържа подобрени функции за търсене, 22 нови механични и специфични за крайна точка схеми на профилиране, както и подобрени инструменти за докладване, предназначени за управление на смеси, тавтомери и метаболити.

С кутията с инструменти QSAR потребителите могат да:

- идентифицират аналози¹ за дадено химично вещество, да получават наличните резултати от експерименти за тези аналози и да запълват празноти в данните чрез read-across анализ или анализ на тенденциите;
- категоризират големи списъци с химични вещества в съответствие с механизмите или начините на действие;

¹ Всеки аналог посочва химично вещество, за което може да се приложи read-across анализ (вж. също документа с указания на REACH относно QSAR и групирането на химични вещества).

- запълват празноти в данните за всяко химично вещество с помощта на библиотеката от (Q)SAR модели;
- оценяват пригодността на даден потенциален аналог за read-across анализ;
- оценяват целесъобразността на даден (Q)SAR модел за запълване на празнота в данните за определено целево химично вещество;
- създават (Q)SAR модели;
- прогнозируют метаболити или генерират тавтомери за целевото химично вещество.

Версия 3.0 е окончателно издание на четиригодишен съвместен проект между Организацията за икономическо сътрудничество и развитие (ОИСР) и Европейската агенция по химикали (ECHA). Тя вече е налична за изтегляне.

Допълнителна информация

Безплатно изтегляне и помощни материали:

QSAR Toolbox

<http://www.qsartoolbox.org/>

Указания относно изискванията за информация и оценката на химическата безопасност

Глава R.6: QSAR и групиране на химични вещества

http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r6_en.pdf