

Ansvarsfraskrivelse: Dette er en oversættelse til arbejdsbrug af et dokument, som oprindeligt blev offentliggjort på engelsk. Det originale dokument findes på ECHA's hjemmeside.

ECHA/NA/12/49

QSAR-værktøjskassen version 3.0 er nu tilgængelig

Den nye generation af QSAR-værktøjskassen er et mere komplet redskab til pålidelig forudsigelse af kemikaliers egenskaber.

Helsingfors, den 31. oktober 2012 – QSAR-værktøjskassen gør det muligt for virksomheder og myndigheder at inddele kemikalier i kategorier ved hjælp af kvantitative sammenhænge mellem struktur og aktivitet ((Q)SAR-metoder) og udfylde datahuller ved hjælp af analogislutning og trendanalyser med henblik på at vurdere de (øko)toksikologiske risici ved et bestemt kemikalie, der skal registreres i henhold til REACH. Dette bidrager til at nedbringe omkostninger og undgå unødige forsøg med hvirveldyr.

QSAR-værktøjskassen 3.0 indeholder mange nye funktioner, hvoriblandt de vigtigste er:

- medtagelse af yderligere datakilder, herunder undersøgelsesresultater fra REACH-formidlingswebstedet
- IUCLID 5.4 kompatibilitet
- kvantitativ forudsigelse af blandingers toksicitet
- forudsigelse for tautomere par og metabolismesimulator
- implementering af AOP'er (Adverse Outcome Pathways, veje til negative udfald) i relation til hudsensibilisering med hjælp fra tre nye databaser med AOP-data om hudsensibilisering.

Desuden indeholder QSAR-værktøjskassen forbedrede søgefunktioner, 22 nye mekanistiske specifikke og effektparameterspecifikke profileringsmetoder og et forbedret rapporteringsredskab til håndtering af blandinger, tautomerer og metabolitter.

Med QSAR-værktøjskassen kan brugeren:

- identificere analoger¹ til kemiske stoffer, indhente forsøgsresultater for disse analoger og udfylde datahuller ved hjælp af analogislutning eller trendanalyse
- inddele store fortegnelser over kemiske stoffer i kategorier i overensstemmelse med virkningsmekanisme eller virkningsmåde
- udfylde datahuller for et hvilket som helst kemisk stof ved hjælp af samlingen af (Q)SAR-modeller
- vurdere, om en potentiel analog udgør et tilstrækkelig solidt grundlag for en analogislutning

¹ En analog specificerer kemiske stoffer, for hvilke der kan anvendes en analogislutning (se også vejledende REACH-dokument om [QSAR og inddeling af kemikalier](#)).

- vurdere om en (Q)SAR-model er hensigtsmæssig til at udfylde et datahul for et bestemt målkemikalie
- opbygge (Q)SAR-modeller
- forudsige metabolitter eller generere tautomerer for målkemikaliaet.

Frigivelsen af version 3.0 er det sidste led i det firårige samarbejdsprojekt mellem OECD og ECHA. Den kan nu downloades.

Yderligere oplysninger

Gratis download og støttemateriale:

QSAR-værktøjskasse

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

Guidance on information requirements and chemical safety assessment (Vejledning om informationskrav og kemikaliesikkerhedsvurdering)

Kapitel R.6: QSAR'er og kategorisering af kemikalier

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