

Haftungsausschluss: Hierbei handelt es sich um die Arbeitsübersetzung eines ursprünglich in Englisch veröffentlichten Dokuments. Das Originaldokument ist auf der ECHA-Website verfügbar.

ECHA/NA/12/49

QSAR-Toolbox Version 3.0 ist jetzt verfügbar

Die neue Generation der QSAR-Toolbox ist ein umfassenderes Instrument für die zuverlässige Bestimmung der Eigenschaften chemischer Stoffe.

Helsinki, 31. Oktober 2012 – Die QSAR-Toolbox ermöglicht es Unternehmen und Behörden, anhand der Methoden zur quantitativen Struktur-Wirkungs-Beziehung (QSAR) chemische Stoffe in Kategorien einzuordnen und Datenlücken durch Interpolation bzw. Trendanalysen zu schließen, um die (Öko)Toxizitätsrisiken von chemischen Stoffen zu beurteilen, die gemäß REACH registriert werden müssen. Damit können Kosten gesenkt und unnötige Versuche an Wirbeltieren reduziert werden.

Die QSAR-Toolbox 3.0 hat zahlreiche neue Funktionen. Die wichtigsten sind:

- Aufnahme zusätzlicher Datenquellen, einschließlich der Studienergebnisse der REACH-Verbreitungswebsite;
- Kompatibilität mit IUCLID 5.4;
- quantitative Toxizitätsvorhersage für Gemische;
- Vorhersage von Tautomerien und Stoffwechselsimulator;
- Implementierung von Adverse Outcome Pathways (AOP) im Zusammenhang mit der Hautsensibilisierung, ergänzt durch drei neue Datenbanken, die AOP-Daten zur Hautsensibilisierung enthalten.

Darüber hinaus enthält die QSAR-Toolbox verbesserte Suchfunktionen, 22 neue mechanistische und endpunktspezifische Profiling-Systeme sowie ein erweitertes Berichterstattungsmodul zur Handhabung von Gemischen, Tautomeren und Metaboliten.

Mit der QSAR-Toolbox können Nutzer:

- analoge Stoffe für einen bestimmten chemischen Stoff ermitteln,¹ vorhandene Versuchsergebnisse für diese analogen Stoffe abrufen und Datenlücken durch Interpolation bzw. Trendanalysen schließen;
- umfangreiche Verzeichnisse chemischer Stoffe nach Wirkungsmechanismen oder Wirkungsweisen kategorisieren;
- Datenlücken für chemische Stoffe mithilfe der Sammlung von (Q)SAR-Modellen schließen;
- beurteilen, ob ein potenzieller analoger Stoff für die Interpolation von Daten geeignet ist;

¹ Ein analoger Stoff ist ein chemischer Stoff, der sich für die Interpolation von Daten eignet (siehe dazu auch die REACH-Leitlinien zu QSAR und Gruppierung von Stoffen).

- beurteilen, ob ein (Q)SAR-Modell geeignet ist, eine Datenlücke für eine bestimmte Zielchemikalie zu schließen;
- (Q)SAR-Modelle erarbeiten;
- Metaboliten vorhersagen oder Tautomere für die Zielchemikalie erzeugen.

Version 3.0 ist die endgültige Fassung und das Ergebnis eines vierjährigen Kooperationsprojekts zwischen OECD und ECHA. Sie steht jetzt zum Download bereit.

Weitere Informationen

Kostenloser Download und Begleitmaterial:

QSAR-Toolbox

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

Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung Kapitel R.6: QSARs and grouping of chemicals (QSAR und Gruppierung von Chemikalien)

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