

ECHA/NA/12/49

Ilmunud on rakenduse QSAR Toolbox versioon 3.0

Rakenduse QSAR Toolbox uus, 3. põhiversioon on senisest täielikum vahend, millega usaldusväärset prognoosida kemikaalide omadusi.

Helsingi, 31. oktoober 2012 – QSAR Toolbox on rakendus, mis aitab ettevõtetel ja ametiasutustel kasutada struktuuri-aktiivsuse kvantitatiivse seose ((Q)SAR) meetodeid, et rühmitada kemikaale kategooriatesse ja täita andmelünki analoogmeetodi ning suundumuste analüüsi abil, millega hinnata REACH-määruse kohaselt kemikaalide tervise- ja keskkonnatoksilisuse ohte. See aitab vähendada kulusid ja vältida tarbetuid loomkatseid selgroogsetega.

Rakenduse QSAR Toolbox versioonis 3.0 on palju uusi funktsioone, millest kõige olulisemad on järgmised:

- Täiendavad andmeallikad, sealhulgas REACH-teabe levitamise veebilehelt pärit uuringutulemused
- Ühilduvus tarkvaraga IUCLID 5.4
- Segude toksilisuse kvantitatiivne prognoosimine
- Tautomeeride ja metaboliitide prognoosimine
- Naha sensibiliseerimisega seotud kahjuliku toime viisid (AOP) ja kolm uut selleteemalist andmebaasi

Samuti on rakenduses QSARi Toolbox täiustatud otsingufunktsioonid, 22 uut mehhanistlikku ja näitajaomast profileerimisskeemi ning täiustatud aruandlusvahend (segud, tautomeerid ja metaboliidid).

Rakendusega QSAR Toolbox saab kasutaja

- leida kemikaali analoogid¹, otsida nende olemasolevaid katsetulemusi ning täita analoogmeetodite või suundumuste analüüsi abil andmelünki;
- liigitada suuri kemikaaliloetelusid toimemehhanismi või –viisi järgi;
- täita mis tahes kemikaali andmelünki, kasutades rakenduse (Q)SAR-mudelite kataloogi;
- hinnata võimaliku analoogi põhjendatust analoogmeetodi jaoks;
- hinnata (Q)SAR-mudeli sobivust konkreetse sihtkemikaali andmelünkade täitmiseks;
- koostada (Q)SAR-mudeleid;
- prognoosida sihtkemikaali metaboliite või luua tautomeere.

¹ Analoog on kemikaal, millele võib rakendada analoogmeetodit (vt ka QSAR-meetodite ja kemikaalide rühmitamise REACH-juhend).

Versioon 3.0 on OECD ja ECHA neli aastat kestnud koostööprojekti tulemus. Versiooni saab alla laadida lisateabes märgitud aadressilt.

Lisateave

Tasuta allalaadimine ja abimaterjal:

QSAR Toolbox

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

Teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhend

Peatükk R.6 „QSAR-meetodid ja kemikaalide rühmitamine”

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