

ECHA/NA/12/49

QSAR-työkalun versio 3.0 on nyt saatavilla

Uuden sukupolven QSAR-työkalu on entistä monipuolisempi apuväline kemikaalien ominaisuuksien luotettavaan ennustamiseen.

Helsinki, 31. lokakuuta 2012 – QSAR-työkalun avulla yritykset ja viranomaiset voivat käyttää kvantitatiivisen rakenne-aktiivisuussuhteen ((Q)SAR) menetelmiä kemikaalien ryhmittelemiseen eri luokkiin ja puuttuvien tietojen tuottamiseen interpolaation ja suuntausanalyysin kautta REACH-asetuksen mukaisesti rekisteröitävien kemikaalien (eko)toksisuuden arvioimista varten. Tämä vähentää kustannuksia ja tarpeetonta testausta selkärankaisilla eläimillä.

QSAR-työkalussa 3.0 on paljon uusia ominaisuuksia, joista tärkeimpiä ovat seuraavat:

- o enemmän tiedonlähteitä, muun muassa REACH-tiedonjakosivuston sisältämät tutkimustulokset;
- o yhteentoimivuus IUCLID 5.4 -järjestelmän kanssa;
- o määrällinen seosten toksisuuden ennustaminen;
- o tautomeerisen yhdisteen ennustaminen ja aineenvaihduntaan liittyvä ennustaminen;
- o epäsuotuisaan lopputulokseen päätymistä kuvaavat mallit (Adverse Outcome Pathways, AOP) ihon herkistymisen osalta sekä kolme uutta tietokantaa, jotka sisältävät ihon herkistymiseen liittyviä AOP-tietoja.

Lisäksi QSAR-työkalun hakutoimintoja on parannettu, siinä on 22 uutta mekanistista ja tutkittavan ominaisuuden mukaista profiloitijärjestelmää, ja siihen on kehitetty parempi raportointiohjelma seosten, tautomeerien ja aineenvaihduntatuotteiden käsittelyyn.

QSAR-työkalun avulla käyttäjä voi

- o tunnistaa tietyn kemikaalin analogeja¹, hakea kyseisiä analogeja varten saatavissa olevia koetuloksia ja tuottaa puuttuvia tietoja interpolaation tai suuntausanalyysin avulla;
- o luokitella suuria määriä kemikaaleja niiden mekanismien tai toimintatapojen mukaan;
- o antaa mistä tahansa kemikaalista puuttuvia tietoja (Q)SAR-mallien kirjaston avulla;
- o arvioida mahdollisen analogin soveltuvuutta interpolaatioon;
- o arvioida jonkin (Q)SAR-mallin soveltuvuutta tietyistä kohdekemikaalista puuttuvien tietojen täyttämiseen;
- o rakentaa (Q)SAR-malleja;
- o ennustaa aineenvaihduntatuotteita tai tuottaa tautomeereja kohdekemikaalia varten.

¹ Analogi määrittää kemikaalia, jonka osalta voidaan käyttää interpolaatiota (ks. myös kvantitatiivisia rakenne-aktiivisuussuhteita ja kemikaalien ryhmittelyä koskeva ohjeasiakirja).

Versio 3.0 on OECD:n ja ECHAN nelivuotisen yhteistyöhankkeen lopputulos. Se on nyt ladattavissa.

Lisätietoja

Ilmainen lataaminen ja tukiaineistoa:

QSAR-työkalu

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

Tietovaatimuksia ja kemikaaliturvallisuusarviointia koskevat ohjeet

Luku R.6: Kvantitatiiviset rakenne-aktiivisuussuhteet ja kemikaalien ryhmittely

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