

ECHA/NA/12/49

Išleista QSAR priemonių rinkinio 3.0 versija

Naujos kartos QSAR priemonių rinkinys – tai tobulesnis įrankis, padedantis patikimai numatyti cheminių medžiagų savybes.

Helsinkis, 2012 m. spalio 31 d. Įmonės ir įstaigos, naudodamos QSAR priemonių rinkinį ir taikydamos kiekybinio struktūros ir savybių ryšio ((Q)SAR) metodiką, galės skirstyti chemines medžiagas į kategorijas ir pasitelkdamos analogijos metodą bei tendencijų analizę gauti trūkstamus duomenis, kad galėtų įvertinti cheminių medžiagų, kurios turi būti registruojamos pagal REACH reglamentą, (eko)toksiškumo pavojus. Tai padės sumažinti išlaidas ir nereikalingų bandymų su stuburiniais gyvūnais skaičių.

3.0 versijos QSAR priemonių rinkinyje yra daug naujų funkcijų. Svarbiausios yra šios:

- papildomi duomenų šaltiniai, įskaitant tyrimo rezultatus iš REACH platinimo svetainės;
- suderinamumas su IUCLID 5.4;
- kiekybinis mišinių toksiškumo numatymas;
- tautomerinio rinkinio numatymas ir metabolizmo aktyvatorius;
- su odos jautrinimu susiję nepalankaus poveikio nustatymo būdai (angl. *Adverse Outcome Pathways* – AOP), papildyti trimis naujomis duomenų bazėmis su odos jautrinimo AOP duomenimis.

Be to, QSAR priemonių rinkinys apima patobulintas paieškos funkcijas, 22 naujas mechanines ir konkrečioms įvėčiams skirtas profiliavimo schemas, patobulintą ataskaitų teikimo priemonę, skirtą mišinių, tautomerų ir metabolitų duomenims tvarkyti.

Naudodamas QSAR priemonių rinkinį naudotojas gali:

- nustatyti analogiškas¹ chemines medžiagas, surasti turimus tokių analogiškų cheminių medžiagų eksperimentinių tyrimų rezultatus ir užpildyti trūkstamą informaciją taikant analogijos metodą arba tendencijų analizę;
- grupuoti didelės apimties cheminių medžiagų sąrašus pagal cheminių medžiagų veikimo mechanizmus arba būdus;
- iš (Q)SAR modelių bibliotekos gauti trūkstamus duomenis apie bet kokią cheminę medžiagą;
- analogijos būdu įvertinti galbūt analogiškos cheminės medžiagos tinkamumą;
- įvertinti (Q)SAR modelio tinkamumą, siekiant gauti trūkstamus duomenis apie konkrečią cheminę medžiagą;
- rengti (Q)SAR modelius;
- numatyti konkrečios cheminės medžiagos metabolitus arba rengti tautomerus.

¹ Analogiška cheminė medžiaga – tai cheminė medžiaga, kuriai gali būti taikomas analogijos metodas (taip pat žr. REACH rekomendacinį dokumentą dėl QSAR ir cheminių medžiagų grupavimo).

3.0 versija – tai galutinis ketverius metus trukusio bendro OECD ir ECHA projekto rezultatas. Ji jau pateikta atsisiųsti.

Išsamesnė informacija

Rinkinys nemokamai atsisiųsti ir pagalbinių medžiagų:

QSAR priemonių rinkinys

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

Informacijai keliamų reikalavimų ir cheminės saugos vertinimo rekomendacijos

R.6 skyrius. QSAR ir cheminių medžiagų grupavimas

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