

Atruna: Šis ir sākotnēji angļu valodā publicētā dokumenta darba tulkojums. Oriģināldokuments ir pieejams ECHA tīmekļa vietnē.

ECHA/NA/12/49

Jau ir pieejama QSAR rīkkopas 3.0 versija

Jaunās paaudzes QSAR rīkkopa ir pilnveidota, lai drošāk prognozētu ķīmikāliju īpašības.

Helsinki, 2012. gada 31. oktobris. Uzņēmumi un iestādes ar QSAR rīkkopas palīdzību var izmantot kvantitatīvo struktūras aktivitātes attiecību ((Q)SAR) metodi, lai grupētu ķīmikālijas kategorijās un iegūtu trūkstošos datus atbilstoši analogijas principam un tendenču analīzei, lai novērtētu saskaņā ar REACH reģistrējamo ķīmikāliju (eko)toksicitātes bīstamību. Šādā veidā var samazināt izmaksas un atteikties no nevajadzīgiem testiem ar mugurkaulniekiem.

QSAR 3.0 rīkkopai ir daudzas jaunas funkcijas, svarīgākās no tām ir šādas:

- o iespēja iekļaut papildu datu avotus, tostarp pētījumu rezultātus no REACH izplatīšanas tīmekļa vietnes;
- o savietojamība ar IUCLID 5.4;
- o kvantitatīva maisījumu toksicitātes prognozēšana;
- o tautomēru prognozēšana un metabolisma modelēšana;
- o negatīvo rezultātu iegūšanas veidu [Adverse Outcome Pathways (AOP)] saistībā ar ādas sensibilizāciju ieviešana, papildinot tos ar trim jaunām datu bāzēm ar AOP datiem attiecībā uz ādas sensibilizāciju.

Turklāt QSAR rīkkopa satur paplašinātas meklēšanas funkcijas, 22 jaunas mehānistiskas un uz konkrētu parametru orientētas profilēšanas shēmas un uzlabotu ziņošanas rīku darbībām ar maisījumiem, tautomēriem un metabolītiem.

Ar QSAR rīkkopu lietotājs var:

- o apzināt ķīmikālijas analogus¹, izgūt par šiem analogiem pieejamos izmēģinājumu rezultātus un noskaidrot trūkstošos datus, izmantojot analogijas principu vai tendenču analīzi;
- o iedalīt kategorijās lielu ķīmikāliju skaitu atbilstoši iedarbības mehānismam un veidiem;
- o noskaidrot trūkstošos datus par jebkādu ķīmikāliju, izmantojot (Q)SAR modeļu bibliotēku;
- o novērtēt iespējamā analoga piemērotību analogijas principa izmantošanai;
- o novērtēt (Q)SAR modeļa piemērotību datu trūkuma novēršanai saistībā ar konkrēto mērķa ķīmikāliju;
- o veidot (Q)SAR modeļus;
- o prognozēt metabolītus vai ģenerēt tautomērus mērķa ķīmikālijai.

¹ "Analogi" nozīmē ķīmikāliju, kurai var piemērot analogijas principu (skatīt arī REACH vadlīniju dokumentu par QSAR un ķīmikāliju grupēšanu).

3.0 versija ir *OECD* un *ECHA* četru gadu sadarbības projekta galarezultāts. Tagad tas ir pieejams lejupielādei.

Papildu informācija

Bezmaksas palīgmateriāli lejupielādei:

QSAR rīkkopa

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

Vadlīnijas par informācijas prasībām un ķīmiskās drošības novērtējumu.

R.6 nodaļa: QSAR un ķīmikāliju grupēšana

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