

ECHA/NA/12/49

## L-għodda QSAR verżjoni 3.0 issa disponibbli

Il-generazzjoni l-għdida tal-Għodda QSAR hija għodda aktar kompleta għall-previżjoni affidabbli tal-karatteristiċi tas-sustanzi kimiċi.

**Helsinki, 31 ta' Ottubru 2012** – L-għodda QSAR tgħin lil kumpaniji u lil awtoritajiet jużaw metodoloġiji tar-Relazzjoni Struttura-Attività Kwantitattiva ((Q)SAR) biex jiġbru flimkien f'kategoriji is-sustanzi kimiċi u biex jimlew nuqqasijiet fid-dejta permezz ta' read-across, u analiżi tax-xejriet sabiex jiġu stmati l-perikoli ta' (eko)tossicità ta' sustanzi kimiċi li għandhom jiġu rreġistrati taħt REACH. Dan jgħin biex jitnaqqsu l-ispejjeż u l-ittestjar mhux neċessarju fuq annimali vertebrati.

L-għodda QSAR 3.0 tinkludi hafna karatteristiċi ġodda, fejn l-aktar importanti huma:

- L-inklużjoni ta' sorsi tad-dejta addizzjonali inklużi riżultati tal-istudju mill-websajt ta' disseminazzjoni REACH;
- Il-kompatibbiltà ma' IUCLID 5.4;
- Il-previżjoni tat-tossicità ta' taħlitiet kwantitattivi;
- Il-previżjoni tas-sett tawtomeriku u s-simulatur tal-metaboliżmu;
- L-implimentazzjoni ta' Metodi għal Riżultati Ħżiena [*Adverse Outcome Pathways*] (AOPs) relatati mas-sensitizzazzjoni tal-ġilda issupplimentati minn tliet dejtabejżis ġodda li jinkludu dejta dwar AOPs għas-sensitizzazzjoni tal-ġilda.

Barra minn hekk, il-Kaxxa tal-Għodda QSAR tinkludi funzjonalitajiet ta' tfittxija mtejbja, 22 skema mekkanistikament ġdida u speċifika għall-endpoints u engine rinforzat ta' rappurtar għat-trattament ta' taħlitiet, tawtomeri u metaboliti.

Bil-Kaxxa tal-għodda QSAR, l-utent jista':

- jidentifika analogi<sup>1</sup> għal sustanza kimika, jasal għal riżultati sperimentali disponibbli għal dawk l-analogi u jimla nuqqasijiet fid-dejta permezz ta' read-across jew analiżi tax-xejriet;
- jikkategorizza inventarji kbar ta' sustanzi kimiċi skont mekkanizmi jew mezzi ta' azzjoni;
- jimla nuqqasijiet fid-dejta għal kwalunkwe sustanza kimika billi juża l-librerija ta' mudelli (Q)SAR;
- jivvaluta kemm huwa robust analogu potenzjali għal read-across;
- jivvaluta kemm hu tajjeb mudell (Q)SAR biex jimla nuqqas fid-dejta għal sustanza kimika partikolari mmirata;

<sup>1</sup> Analogu jispeċifika sustanza kimika li għaliha jista' jiġi applikat read-across (ara wkoll id-dokument ta' gwida REACH dwar QSARs u r-raggruppament ta' sustanzi kimiċi).

- jibni mudelli (Q)SAR;
- jipprevedi metaboliti jew jiġġenera tawtomeri għas-sustanza kimika mmirata.

Il-verżjoni 3.0 hija rilaxx finali ta' proġett kollaborattiv ta' erba' snin bejn I-OECD u I-ECHA. Hija issa disponibbli biex titniżżel.

## **Aktar informazzjoni**

Tniżżil mingħajr ħlas u materjal ta' sostenn:

### **Għodda QSAR**

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

### **Gwida dwar rekwiziti tal-informazzjoni u valutazzjoni dwar is-sigurtà kimika Kapitolu R.6: QSARs u r-raggruppament ta' sustanzi kimiċi**

[http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information\\_requirements\\_r6\\_en.pdf](http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r6_en.pdf)