

ECHA/NA/12/49

Aplikacja QSAR Toolbox wersja 3.0 jest już dostępna

Nowa generacja aplikacji QSAR Toolbox stanowi bardziej kompletne narzędzie służące do niezawodnego przewidywania właściwości chemikaliów.

Helsinki, 31 października 2012 r. – QSAR Toolbox pomaga przedsiębiorstwom i organom stosować metody oparte na ilościowej zależności struktura-aktywność ((Q)SAR) w celu grupowania substancji chemicznych w kategorie oraz wypełniania luk w danych poprzez zastosowanie podejścia przekrojowego, a także przeprowadzania analizy kształtowania się tendencji w celu dokonania oceny zagrożeń (eko)toksycznych stwarzanych przez chemikalia, które mają zostać zarejestrowane zgodnie z REACH. Pomaga to ograniczyć koszty oraz niepotrzebne badania na kręgowcach.

QSAR Toolbox 3.0 zawiera wiele nowych funkcji, z których najważniejsze to:

- o uwzględnienie dodatkowych źródeł danych, w tym wyników badań pochodzących ze strony internetowej upowszechniającej REACH;
- o kompatybilność z IUCLID 5.4;
- o ilościowe przewidywanie toksyczności mieszanin;
- o przewidywanie w odniesieniu do mieszanin tautomerów oraz symulator metabolizmu;
- o wprowadzenie łańcuchów niekorzystnych skutków (ang. *Adverse Outcome Pathways*, AOP) w odniesieniu do działania uczulającego na skórę, uzupełnione trzema nowymi bazami danych zawierającymi dane AOP dotyczące działania uczulającego na skórę.

Ponadto QSAR Toolbox zawiera udoskonalone funkcje wyszukiwania, 22 nowe systemy profilowania mechanistycznego oraz w oparciu o parametry docelowe, a także udoskonalony moduł sprawozdawczy umożliwiający uwzględnienie mieszanin, tautomerów i metabolitów.

Przy użyciu QSAR Toolbox użytkownik może:

- o identyfikować analogi¹ dla danej substancji chemicznej, pobierać wyniki badań eksperymentalnych dostępne w odniesieniu do tych analogów, a także wypełniać luki w danych poprzez stosowanie podejścia przekrojowego lub analizy kształtowania się tendencji;
- o klasyfikować duże wykazy chemikaliów stosownie do mechanizmów lub sposobów działania;

¹ Analog określa substancję chemiczną, w odniesieniu do której można zastosować podejście przekrojowe (zob. także wytyczne REACH w sprawie QSAR i grupowania chemikaliów).

- o wypełniać luki w danych w odniesieniu do dowolnej substancji chemicznej dzięki wykorzystaniu biblioteki modeli (Q)SAR;
- o oszacować pewność wyników w odniesieniu do potencjalnego analogu w przypadku podejścia przekrojowego;
- o oszacować adekwatność modelu (Q)SAR do celów wypełnienia luki w danych w odniesieniu do szczególnej docelowej substancji chemicznej;
- o budować modele (Q)SAR;
- o przewidywać metabolity lub generować tautomery w odniesieniu do docelowej substancji chemicznej.

Wersja 3.0 stanowi ostateczne wydanie aplikacji opracowywanej w ramach czteroletniego projektu realizowanego wspólnie przez OECD i ECHA. Jest już ona dostępna do pobrania.

Dodatkowe informacje

Bezpłatne pobranie i materiały pomocnicze:

QSAR Toolbox

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

Poradnik dotyczący wymagań w zakresie informacji i oceny bezpieczeństwa chemicznego

Rozdział R.6: QSAR i grupowanie chemikaliów

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