

Declaração de exoneração de responsabilidade: Esta é uma versão de trabalho de um documento originalmente publicado em inglês. O documento original está disponível no sítio web da ECHA.

ECHA/NA/12/49

Versão 3.0 da caixa de ferramentas QSAR já disponível

A nova geração da caixa de ferramentas QSAR é uma ferramenta mais completa para prever com fiabilidade as propriedades dos produtos químicos.

Helsínquia, 31 de outubro de 2012 – A caixa de ferramentas QSAR ajuda as empresas e as autoridades a utilizar as metodologias de Relação Quantitativa Estrutura/Atividade ((Q)SAR) para agrupar substâncias químicas em categorias e para preencher lacunas de dados através do método comparativo por interpolação, bem como a analisar tendências a fim de avaliar os perigos (eco)toxicológicos das substâncias químicas ao abrigo do Regulamento REACH. Isto ajuda a reduzir os custos e a evitar a realização de testes desnecessários com animais vertebrados.

A caixa de ferramenta QSAR 3.0 contém muitas novas funcionalidades. As mais importantes são:

- o inclusão de fontes de dados adicionais, nomeadamente resultados de estudos do sítio Web de divulgação do REACH;
- o compatibilidade com a IUCLID 5.4;
- o previsão quantitativa dos efeitos tóxicos de misturas;
- o previsão de formas tautoméricas e simulador de metabolismo;
- o implementação de Vias de efeito adverso (AOP, Adverse Outcome Pathways) relacionadas com a sensibilização da pele, complementadas por três novas bases de dados que contêm dados AOP de sensibilização da pele.

A caixa de ferramenta QSAR contém ainda funcionalidades de pesquisa melhoradas, 22 novos métodos mecanísticos e de elaboração de perfis específicos de parâmetros e um sistema de comunicação de informações melhorado sobre o manuseamento de misturas, tautómeros e metabolitos.

Com esta ferramenta, o utilizador pode:

- o identificar análogos¹ de uma substância química, aceder aos resultados experimentais existentes sobre esses análogos e preencher lacunas de dados através do método comparativo por interpolação ou análise das tendências;

¹ Uma substância análoga é uma substância química à qual é possível aplicar o método comparativo por interpolação (ver também documento de orientação REACH sobre QSAR e agrupamento das substâncias químicas).

- o categorizar inventários extensos de substâncias químicas segundo mecanismos ou módulos de ação;
- o preencher as lacunas existentes nos dados de qualquer substância química servindo-se da biblioteca de modelos (Q)SAR;
- o avaliar a robustez de um potencial análogo em termos de interpolação;
- o avaliar a adequação de um modelo (Q)SAR para o preenchimento de uma lacuna existente nos dados de determinada substância química alvo;
- o construir modelos (Q)SAR;
- o prever metabolitos ou gerar tautómeros para a substância química-alvo.

A versão 3.0 é uma versão final que se inscreve no âmbito de um projeto de colaboração de quatro anos entre a OCDE e a ECHA. A ferramenta está agora disponível para descarregamento.

Informações adicionais

Descarregamento gratuito e material de apoio:

Caixa de ferramentas QSAR

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

Guia de Orientação sobre requisitos de informação e avaliação da segurança química Capítulo R.6: QSAR e agrupamento de substâncias químicas

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