

Declinarea responsabilității: Aceasta este o traducere a documentului original în limba engleză, care este disponibil pe site-ul ECHA.

ECHA/NA/12/49

Setul de instrumente „QSAR Toolbox” versiunea 3.0 este acum disponibil

Noua generație a setului de instrumente „QSAR Toolbox” reprezintă un instrument mai complet pentru predicția fiabilă a proprietăților substanțelor chimice.

Helsinki, 31 octombrie 2012 - Setul de instrumente „QSAR Toolbox” le permite întreprinderilor și autorităților să utilizeze metodologiile bazate pe relația cantitativă structură-activitate ((Q)SAR) pentru a grupa substanțele chimice în categorii și pentru a completa datele lipsă prin extrapolare sau prin analiza evoluțiilor în scopul evaluării pericolelor asociate cu (eco)toxicitatea substanțelor chimice care urmează a fi înregistrate în temeiul REACH. Astfel se pot reduce costurile și pot fi evitate testele inutile pe animale vertebrate.

Setul de instrumente „QSAR Toolbox” versiunea 3.0 conține numeroase funcții noi, dintre care cele mai importante sunt:

- o includerea de surse de date suplimentare, inclusiv rezultatele studiilor preluate de pe site-ul de diseminare REACH;
- o compatibilitatea cu IUCLID 5.4;
- o predicția cantitativă a toxicității amestecurilor;
- o predicția seturilor tautomerice și simulator de metabolism;
- o introducerea funcției „Parcursul rezultatelor adverse” (AOP, *Adverse Outcome Pathway*) referitoare la sensibilizarea cutanată, suplimentată de trei noi baze de date care conțin informații privind AOP pentru sensibilizarea cutanată.

De asemenea, setul de instrumente „QSAR Toolbox” conține funcționalități de căutare

îmbunătățite, 22 de modele noi de profilare specifice mecanismelor și efectelor și un

instrument de raportare îmbunătățit pentru amestecuri, tautomeri și metaboliți.

Folosind setul de instrumente „QSAR Toolbox”, utilizatorul poate:

- să identifice analogii¹ unei substanțe chimice, să extragă rezultatele experimentale disponibile pentru acei analogi și să completeze datele lipsă prin extrapolare sau analiza evoluțiilor;
- să grupeze pe categorii un număr mare de substanțe chimice pe baza mecanismelor sau modurilor de acțiune;
- să completeze datele lipsă pentru orice substanță chimică folosind biblioteca de modele (Q)SAR;
- să evalueze fiabilitatea unui potențial analog pentru extrapolare;
- să evalueze caracterul adecvat al unui model (Q)SAR pentru completarea datelor lipsă pentru o anumită substanță chimică vizată;
- să realizeze modele (Q)SAR;
- să realizeze predicția metaboliților sau să genereze tautomerii pentru substanța chimică vizată.

Versiunea 3.0 este versiunea finală a unui proiect de colaborare între OCDE și ECHA desfășurat pe o perioadă de patru ani. Această versiune este acum disponibilă pentru descărcare.

Informații suplimentare

Descărcare gratuită și materiale ajutătoare:

Setul de instrumente „QSAR Toolbox”

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

Guidance on information requirements and chemical safety assessment

Chapter R.6: QSARs and grouping of chemicals

(Ghidul cerințelor privind informațiile și evaluarea securității chimice)

Capitolul R.6: (Q)SAR-uri și gruparea substanțelor chimice

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

¹ Un analog este o substanță chimică pentru care se poate aplica metoda extrapolării (a se vedea și ghidul REACH referitor la (Q)SAR-uri și gruparea substanțelor chimice).