

ECHA/NA/12/49

## Verzia 3.0 súboru nástrojov QSAR Toolbox je teraz k dispozícii

Nová generácia súboru nástrojov QSAR Toolbox predstavuje komplexnejší nástroj na spoľahlivé predpovedanie vlastností látok.

**Helsinki, 31. októbra 2012** – Súbor nástrojov QSAR Toolbox pomáha spoločnostiam a orgánom využívať metodiky kvantitatívnych vzťahov štruktúry a aktivity ((Q)SAR) na zoskupovanie chemických látok do kategórií a doplniť chýbajúce údaje pomocou krížového prístupu, analýzy trendov na účely posúdenia nebezpečnosti (eko)toxicity chemických látok, ktoré majú byť registrované podľa nariadenia REACH. Pomáha znížiť náklady a zabrániť zbytočnému testovaniu na stavovcoch.

Súbor nástrojov QSAR Toolbox 3.0 obsahuje viaceré nové funkcie, z ktorých najdôležitejšie sú:

- o zahrnutie ďalších zdrojov údajov vrátane výsledkov zo štúdií z webovej stránky REACH na šírenie informácií,
- o kompatibilita s IUCLID 5.4,
- o predpovedanie toxicity na základe kvantitatívneho zloženia zmesí,
- o predpovedanie tautomérov a simulátor metabolizmu,
- o vykonávanie Adverse Outcome Pathways (AOP) vzťahujúcich sa ku každej senzibilizácii doplnené o tri nové databázy obsahujúce AOP údaje pre senzibilizáciu pokožky.

Okrem toho súbor nástrojov Toolbox QSAR obsahuje vylepšené vyhľadávacie funkcie, 22 nových profilovacích schém, ktoré sú špecifické z mechanického hľadiska a pre sledované parametre a prostriedok vylepšeného hlásenia pre spracovanie zmesí, tautomérov a metabolitov.

So súborom nástrojov QSAR užívateľ môže:

- o identifikovať analógy<sup>1</sup> chemickej látky, získať dostupné experimentálne výsledky pre tieto analógy a doplniť chýbajúce údaje pomocou krížového prístupu alebo analýzy trendov,
- o kategorizovať rozsiahle zoznamy chemikálií podľa mechanizmov alebo spôsobov účinku,
- o doplniť chýbajúce údaje pre ktorúkoľvek chemikáliu pomocou knižnice modelov (Q)SAR),
- o vyhodnotiť stálosť potenciálnej analogickej zlúčeniny pre krížový prístup,
- o posúdiť vhodnosť modelu (Q)SAR na doplnenie chýbajúcich údajov pre danú cieľovú chemikáliu,

<sup>1</sup> Analóg určuje chemickú látku, pre ktorú možno použiť prevzaté údaje v rámci krížového prístupu (pozri tiež usmerňujúci dokument k nariadeniu REACH o QSAR a zoskupovaní chemických látok).

- vytvoríť modely kvantitatívneho vzťahu štruktúry a aktivity (Q)SAR,
- predpovedať metabolity alebo vytvoríť tautoméry pre cieľovú chemickú látku.

Verzia 3.0 je konečná verzia štvorročného projektu spolupráce medzi OECD a ECHA. Teraz je k dispozícii na prevzatie.

## Ďalšie informácie

Bezplatné prevzatie a podporný materiál:

### QSAR Toolbox

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

### Usmernenie k požiadavkám na informácie a k hodnoteniu chemickej bezpečnosti: Kapitola R.6: QSAR a zoskupovanie chemických látok

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