

ECHA/NA/12/49

Na voljo je različica 3.0 orodja QSAR

Nova generacija orodja QSAR je popolnejše orodje za zanesljivo napovedovanje lastnosti kemikalij.

Helsinki, 31. oktobra 2012 – Orodje QSAR omogoča podjetjem in pristojnim organom, da uporabijo metodologijo kvantitativnega razmerja med strukturo in aktivnostjo ((Q)SAR) za razvrščanje kemikalij v kategorije ter pri tem zapolnijo podatkovne vrzeli z uporabo tehnike navzkrižnega branja, analizo trendov in oceno nevarnosti (eko)toksičnosti kemikalij, ki jih je treba registrirati v skladu z uredbo REACH. S tem se zmanjšajo stroški in število nepotrebnih testiranj na vretenčarjih.

Orodje QSAR 3.0 vsebuje številne nove funkcije, med katerimi so najpomembnejše:

- o vključitev dodatnih virov podatkov, vključno z rezultati študij s spletne strani REACH za razširjanje informacij;
- o združljivost z IUCLID 5.4;
- o kvantitativna napoved strupenosti zmesi;
- o napoved tautomerskega sklopa in simulator metabolizma;
- o izvajanje poti z negativnimi učinki (Adverse Outcome Pathways - AOP) v zvezi s preobčutljivostjo kože, dopolnjeno s tremi novimi podatkovnimi zbirkami, ki vsebujejo podatke AOP za preobčutljivost kože.

Orodje QSAR vsebuje tudi izboljšane funkcije za iskanje, 22 novih mehanističnih programov za profiliranje, povezanih s končnimi točkami, in izboljšano orodje za poročanje za obravnavo zmesi, tautomerov in metabolitov.

Z orodjem QSAR lahko uporabnik:

- o opredeli kemikaliji podobne snovi¹, poišče rezultate poskusov, ki so na voljo za te podobne snovi, in zapolni podatkovne vrzeli z navzkrižnim branjem ali analizo trendov;
- o razvrsti obsežne zbirke kemikalij v kategorije glede na njihove mehanizme ali načine delovanja;
- o zapolni podatkovne vrzeli za vsako kemikalijo z uporabo knjižnice modelov (Q)SAR;
- o oceni zanesljivost morebitne podobne snovi za navzkrižno branje;
- o oceni primernost modela (Q)SAR za zapolnitev podatkovnih vrzeli za določeno ciljno kemikalijo;
- o izdelava modele (Q)SAR;
- o napove metabolite ali ustvari tautomere za ciljno kemikalijo.

¹ Podobna snov označuje kemikalijo, za katero se morda lahko uporabi navzkrižno branje (glejte tudi smernice REACH o QSAR in združevanju kemikalij v skupine).

Različica 3.0 je končni rezultat štiriletnega projekta sodelovanja med OECD in agencijo ECHA. Na voljo je za prenos s spletne strani.

Dodatne informacije

Brezplačni prenos in dopolnilno gradivo:

Orodje QSAR

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

Smernice za zahteve po informacijah in oceni kemijske varnosti

Poglavje R.6: QSARs and grouping of chemicals (QSAR in združevanje kemikalij v skupine)

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