

*Prohlášení o vyloučení odpovědnosti a záruk: Toto je pracovní překlad dokumentu, který byl původně zveřejněn v anglickém jazyce. Originální dokument je k dispozici na internetových stránkách agentury ECHA.*

ECHA/NA/12/49

## K dispozici je verze 3.0 nástroje QSAR Toolbox

QSAR Toolbox nové generace je ucelenějším nástrojem pro spolehlivé předvídání vlastností chemických látek.

**Helsinky 31. října 2012** - Nástroj QSAR Toolbox pomáhá společnostem a příslušným orgánům používat metodiku kvantitativních vztahů mezi strukturou a aktivitou ((Q)SAR) ke sdružování chemických látek do kategorií a doplňování chybějících údajů pomocí analogického přístupu, analýzy tendencí a posuzování nebezpečí (eko)toxicity chemických látek podle nařízení REACH. Tím přispívá ke snížení nákladů a omezení zbytečných zkoušek na obratlovcích..

Nástroj QSAR Toolbox 3.0 obsahuje mnoho nových funkcí, přičemž nejdůležitější jsou tyto:

- o začlenění dalších zdrojů údajů, včetně výsledků studií z webových stránek REACH sloužících k šíření informací,
- o kompatibilita s nástrojem IUCLID 5.4,
- o kvantitativní odhad toxicity směsí,
- o odhad skladby tautomerů a simulátor metabolismu,
- o zavedení cest nepříznivého výsledku (AOP) týkajících se senzibilizace kůže doplněných třemi novými databázemi obsahujícími údaje AOP pro senzibilizaci kůže.

Kromě toho nástroj QSAR Toolbox obsahuje vylepšené funkce vyhledávání, 22 nových schémat tvorby profilů specifických z mechanistického hlediska a z hlediska sledovaných vlastností a zdokonalený nástroj pro tvorbu zpráv o směsích, tautomerech a metabolitech.

Prostřednictvím nástroje QSAR Toolbox uživatel může:

- o určit analogy<sup>1</sup> chemické látky, vyhledat experimentální výsledky dostupné pro tyto analogy a doplnit chybějící údaje pomocí analogického přístupu nebo analýzy tendencí,
- o třídit do kategorií rozsáhlé seznamy chemických látek podle mechanismů nebo způsobů působení,
- o doplňovat chybějící údaje pro veškeré chemické látky za použití knihovny modelů (Q)SAR,
- o posoudit vhodnost případného analogu pro analogický přístup,
- o posoudit vhodnost použití určitého modelu (Q)SAR k doplnění chybějících údajů v případě konkrétní cílové chemické látky,

<sup>1</sup> Analogem se rozumí chemická látka, u které lze uplatnit analogický přístup (viz také pokyny k nařízení REACH týkající se (QSAR) a sdružování chemických látek).

- vytvářet modely (Q)SAR,
- předvídat metabolity či generovat tautomery pro cílové chemické látky.

Verze 3.0 je konečným výstupem čtyřletého projektu spolupráce mezi OECD a agenturou ECHA. Nástroj je nyní k dispozici ke stažení.

## **Další informace**

Bezplatné stažení a podpůrné materiály:

### **QSAR Toolbox**

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

### **Guidance on information requirements and chemical safety assessment**

#### **Chapter R.6: QSARs and grouping of chemicals**

**(Pokyny k požadavkům na informace a posouzení chemické bezpečnosti**

**Kapitola R.6: QSAR a sdružování chemických látek)**

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