

Παραίτηση από κάθε ευθύνη: Το παρόν κείμενο αποτελεί μετάφραση εργασίας ενός εγγράφου που δημοσιεύθηκε αρχικά στην αγγλική γλώσσα. Το πρωτότυπο κείμενο διατίθεται στον δικτυακό τόπο του ECHA.

ECHA/NA/12/49

Κυκλοφόρησε η έκδοση 3.0 της εφαρμογής QSAR Toolbox

Η νέα γενιά του QSAR Toolbox είναι ένα πληρέστερο εργαλείο για την αξιόπιστη πρόβλεψη των ιδιοτήτων των χημικών προϊόντων.

Ελσίνκι, 31 Οκτωβρίου 2012 - Η εφαρμογή QSAR Toolbox βοηθά τις επιχειρήσεις και τις αρχές να χρησιμοποιούν μεθόδους ποσοτικών σχέσεων δομής-δραστικότητας ((Q)SAR) για την ομαδοποίηση των χημικών προϊόντων σε κατηγορίες και την κάλυψη ελλείψεων σε δεδομένα μέσω σύγκρισης και ανάλυσης τάσεων. Κατ' αυτόν τρόπο διευκολύνεται η αξιολόγηση των κινδύνων (οικο)τοξικότητας των χημικών ουσιών που καταχωρίζονται στο πλαίσιο του κανονισμού REACH, εξοικονομούνται δαπάνες και αποφεύγονται οι περιττές δοκιμές σε σπονδυλωτά ζώα.

Η έκδοση 3.0 του QSAR Toolbox περιλαμβάνει πολλά νέα χαρακτηριστικά, τα σημαντικότερα εκ των οποίων είναι:

- ο η προσθήκη επιπλέον πηγών δεδομένων, περιλαμβανομένων αποτελεσμάτων μελετών από τον δικτυακό τόπο διάδοσης του κανονισμού REACH
- ο συμβατότητα με το IUCLID 5.4
- ο ποσοτική πρόβλεψη τοξικότητας μειγμάτων
- ο πρόβλεψη συνόλων ταυτομερών μορφών και προσομοίωση διαδικασιών μεταβολισμού
- ο εφαρμογή Οδών Δυσμενούς Έκβασης (AOP) που σχετίζονται με την ευαισθητοποίηση του δέρματος, σε συνδυασμό με τις πληροφορίες τριών νέων βάσεων δεδομένων που περιέχουν στοιχεία AOP για την ευαισθητοποίηση του δέρματος.

Επιπλέον, το QSAR Toolbox περιλαμβάνει βελτιωμένες λειτουργίες αναζήτησης, 22 νέους τρόπους κατηγοριοποίησης ουσιών βάσει του μηχανισμού δράσης και των παραμέτρων τους, καθώς και βελτιωμένο μηχανισμό υποβολής εκθέσεων για τη διαχείριση μειγμάτων, ταυτομερών και μεταβολιτών.

Με το QSAR Toolbox, ο χρήστης μπορεί:

- ο να ταυτοποιεί ανάλογα¹ χημικών ουσιών, να αποκτά πρόσβαση σε πειραματικά αποτελέσματα για τα συγκεκριμένα ανάλογα και να συμπληρώνει δεδομένα που λείπουν μέσω συγκριτικής προσέγγισης ή ανάλυσης τάσεων
- ο να κατηγοριοποιεί εκτενείς απαριθμήσεις χημικών ουσιών βάσει του μηχανισμού ή του τρόπου δράσης τους

¹ Ένα ανάλογο προσδιορίζει μια χημική ουσία για την οποία μπορεί να εφαρμόζεται η συγκριτική προσέγγιση (βλ. επίσης έγγραφο καθοδήγησης του κανονισμού REACH σχετικά με τις QSAR και την ομαδοποίηση χημικών ουσιών).

- ο να καλύπτει ελλείψεις στα δεδομένα οποιασδήποτε χημικής ουσίας μέσω της βιβλιοθήκης μοντέλων (Q)SAR
- ο να αξιολογεί το αξιόπιστο μιας ουσίας ως αναλόγου στο πλαίσιο της συγκριτικής προσέγγισης
- ο να αξιολογεί την καταλληλότητα ενός μοντέλου (Q)SAR για τη συμπλήρωση των δεδομένων που λείπουν για μια συγκεκριμένη χημική ουσία
- ο να δημιουργεί μοντέλα (Q)SAR
- ο να προβλέπει μεταβολίτες ή να δημιουργεί ταυτομερή για τη χημική ουσία που τον ενδιαφέρει.

Η έκδοση 3.0 αποτελεί προϊόν ενός τετραετούς έργου συνεργασίας μεταξύ του ΟΟΣΑ και του ECHA. Το λογισμικό είναι πλέον διαθέσιμο για μεταφόρτωση.

Περισσότερες πληροφορίες

Δωρεάν μεταφόρτωση και υλικό υποστήριξης:

QSAR Toolbox

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

Καθοδήγηση σχετικά με τις απαιτήσεις πληροφοριών και την αξιολόγηση χημικής ασφάλειας

Κεφάλαιο R.6: QSAR και ομαδοποίηση χημικών προϊόντων

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