

ECHA/NA/12/49

Ya está disponible la versión 3.0 de QSAR Toolbox

La nueva generación de la QSAR Toolbox es una herramienta más completa que permite predecir las propiedades de las sustancias químicas con fiabilidad.

Helsinki, 31 de octubre de 2012 - La QSAR Toolbox ayuda a empresas y a autoridades a utilizar metodologías de relación cuantitativa entre estructura y actividad (QSAR) con el fin de agrupar las sustancias químicas en categorías y corregir deficiencias en los datos por extrapolación o análisis de tendencias para evaluar los peligros de (eco)toxicidad de las sustancias químicas sujetas a registro conforme a REACH. Esto ayuda a reducir costes y ensayos innecesarios con animales vertebrados.

La QSAR Toolbox 3.0 contiene muchos elementos nuevos, siendo los más importantes los siguientes:

- Inclusión de fuentes de información adicionales, como los resultados de los estudios publicados en la web de divulgación de REACH.
- Compatibilidad con IUCLID 5.4.
- Predicción cuantitativa de la toxicidad de las mezclas.
- Predicción tautomérica y simulador metabólico.
- Aplicación de las «vías de resultado adverso» (AOP) relacionadas con la sensibilización cutánea, complementadas por tres nuevas bases de datos que contienen datos de AOP sobre sensibilización cutánea.

Además, la QSAR Toolbox contiene funcionalidades de búsqueda mejoradas, 22 sistemas nuevos para crear perfiles específicos mecanísticamente y por parámetros y un motor de informes mejorado para mezclas, tautómeros y metabolitos.

Con la QSAR Toolbox, el usuario puede:

- Identificar sustancias análogas¹ de una sustancia química, recuperar resultados de experimentos disponibles para dichas sustancias análogas, y corregir deficiencias en los datos por extrapolación o análisis de tendencias.
- Clasificar grandes inventarios de sustancias químicas según sus mecanismos o modos de acción.
- Corregir las deficiencias en los datos de cualquier sustancia química utilizando la biblioteca de modelos (Q)SAR.

¹ Una sustancia análoga es aquella que permite realizar una extrapolación (véase también el documento de orientación de REACH sobre QSAR y agrupación de sustancias químicas).

- Evaluar la idoneidad de una posible sustancia análoga para la extrapolación.
- Evaluar la idoneidad de un modelo (Q)SAR para corregir una deficiencia de datos de una determinada sustancia química.
- Construir modelos (Q)SAR.
- Predecir metabolitos o generar tautómeros para la sustancia química objetivo.

La versión 3.0 es la versión definitiva tras cuatro años de colaboración entre la OCDE y la ECHA. Ya se puede descargar de Internet.

Más información

Descarga gratuita y material complementario:

QSAR Toolbox

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

Documento de orientación sobre los requisitos de información y sobre la valoración de la seguridad química

Capítulo R.6: Los modelos QSAR y la agrupación de sustancias químicas

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