

ECHA/NA/12/49

Megjelent a QSAR-eszköztár 3.0 verziója

A QSAR-eszköztár új generációja még alkalmasabb a vegyi anyagok tulajdonságainak megbízható becslésére.

Helsinki, 2012. október 31. - A QSAR-eszköztár segítséget nyújt a vállalatoknak és a hatóságoknak a mennyiségi szerkezet-aktivitási összefüggés ((Q)SAR) módszer alkalmazásában a REACH-rendelet alapján regisztrált vegyi anyagok (öko)toxikológiai veszélyeinek értékelése érdekében a vegyi anyagok kategóriákba történő csoportosítása, valamint az adathiány keresztthivatkozással, trendelemzéssel történő megszüntetése során. Hozzájárul ezáltal a költségcsökkentéshez és a gerinces állatokat érintő szükségtelen állatkísérletek elkerüléséhez.

A QSAR-eszköztár 3.0 verziója számos új funkcióval rendelkezik, melyek közül a legfontosabbak az alábbiak:

- További adatforrások beillesztése, ideértve a REACH tájékoztatási honlapjáról származó vizsgálati eredményeket is;
- a IUCLID 5.4 verziójával való kompatibilitás;
- A keverékek toxicitásának mennyiségi előrejelzése;
- Tautomer formák előrejelzése és anyagcsere-szimulátor;
- A bőrszenzibilizációval kapcsolatos káros kimeneti utak (Adverse Outcome Pathways, AOP-k) alkalmazása kiegészítésre került a bőrszenzibilizációra vonatkozó AOP-adatokat tartalmazó három új adatbázissal.

Ezen túlmenően a QSAR-eszköztár továbbfejlesztett keresési funkciókat, 22 új mechanikus és végpont-specifikus profilalkotási rendszert és a keverékek, tautomerek és metabolitok kezelésére szolgáló kiterjesztett jelentésfunkciót tartalmaz.

A QSAR-eszköztárral a felhasználó:

- azonosíthatja a vegyi anyagok analóg anyagait,¹ hozzájuthat az ezen analógokra vonatkozó kísérleti eredményekhez, és keresztthivatkozással vagy trendelemzéssel megszüntetheti az adathiányt;
- kategorizálhatja a vegyi anyagok nagy készleteit hatásmechanizmus vagy hatásmód alapján;
- a (Q)SAR-modellek könyvtárának alkalmazásával megszüntetheti a vegyi anyaggal kapcsolatos adathiányt;
- egy lehetséges analóg anyag megbízhatóságának értékelése keresztthivatkozás céljából;

¹ Az analóg anyag olyan vegyi anyag, amely tekintetében adott esetben alkalmazható keresztthivatkozás (lásd a QSAR-ról és a vegyi anyagok csoportosításáról szóló REACH útmutató dokumentumot).

- Egy adott vegyi anyaggal kapcsolatos adathiány megszüntetése céljából a (Q)SAR-modell alkalmazhatóságának értékelése;
- (Q)SAR-modellek felépítése;
- Az adott vegyi anyag esetében metabolitok becslése vagy tautomerek előállítása.

A 3.0 verzió az OECD és az ECHA négyéves együttműködési projektjének végeredménye. Az alkalmazás már letölthető.

További információ

Díjmentesen letölthető alkalmazás, valamint segédanyag:

QSAR-eszköztár

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

Útmutató a tájékoztatási követelményekhez és a kémiai biztonsági értékeléshez, R.6 fejezet: A QSAR és a vegyi anyagok csoportosítása

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