

ECHA/NA/12/49

QSAR Toolbox versie 3.0 nu beschikbaar

De nieuwe generatie van de QSAR Toolbox is een completere tool voor betrouwbare voorspelling van eigenschappen van chemische stoffen.

Helsinki, 31 oktober 2012 – De QSAR Toolbox dient om bedrijven en instanties te helpen (Q)SAR-methodes (kwantitatieve structuur-activiteitsrelatiemodellen) toe te passen om chemische stoffen in categorieën te groeperen en via *read-across* en trendanalyse lacunes in gegevens aan te vullen om de (eco)toxiciteit van in het kader van REACH te registreren chemische stoffen te beoordelen. Daardoor kunnen de kosten en onnodige testen op gewervelde dieren worden beperkt.

De QSAR Toolbox 3.0 bevat veel nieuwe kenmerken. De belangrijkste daarvan zijn:

- o opname van aanvullende gegevensbronnen, waaronder onderzoeksresultaten van de REACH-website;
- o compatibiliteit met IUCLID 5.4;
- o voorspelling van de kwantitatieve toxiciteit van mengsels;
- o voorspelling van tautomere vormen en metabolismesimulator;
- o opname van ongewenste effecten (*Adverse Outcome Pathways* - AOP's) die verband houden met huidsensibilisering, aangevuld met drie nieuwe AOP-databases betreffende huidsensibilisering.

Daarnaast bevat de QSAR Toolbox verbeterde zoekfuncties, 22 nieuwe mechanistisch specifieke en eindpuntspecifieke profielen en een verbeterd rapportageprogramma dat mengsels, tautomeren en metabolieten kan verwerken.

De QSAR Toolbox kan voor het volgende worden gebruikt:

- o analoge stoffen¹ voor een chemische stof achterhalen, de voor de analoge stoffen beschikbare experimentele resultaten opvragen en lacunes in gegevens vullen door *read-across* of trendanalyse;
- o uitgebreide inventarissen van chemische stoffen naar mechanisme of werkingwijze aanleggen;
- o voor alle chemische stoffen lacunes in gegevens vullen door gebruik te maken van de bibliotheek van (Q)SAR-modellen;
- o beoordelen of een potentiële analoge stof kan dienen voor *read-across*;
- o beoordelen of een (Q)SAR-model geschikt is voor het vullen van een lacune in gegevens voor een bepaalde chemische stof;

¹ Onder een analoge stof wordt een chemische stof verstaan waarop *read-across* kan worden toegepast (zie ook het REACH-richtsnoer over QSAR's en het groeperen van chemische stoffen).

- (Q)SAR-modellen maken;
- metabolieten voorspellen of tautomeren genereren voor de betreffende chemische stof.

Versie 3.0 is de definitieve versie van een vier jaar durend samenwerkingsproject tussen de OESO en ECHA en kan nu worden gedownload.

Meer informatie

Gratis download en ondersteunend materiaal:

QSAR Toolbox

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

Richtsnoer informatie-eisen en beoordeling chemische veiligheid

Hoofdstuk R.6: QSAR's en het groeperen van chemische stoffen

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