

ECHA/NA/12/49

QSAR-verktyget version 3.0 är här

Den nya generationen av QSAR-verktyget är ett mer komplett verktyg för att tillförlitligt förutse kemikaliers egenskaper.

Helsingfors den 31 oktober 2012 - QSAR-verktyget hjälper företag och myndigheter att använda metoderna för kvantitativt struktur-aktivitetssamband ((Q)SAR) för att dela in kemikalier i kategorier och för att åtgärda databrister genom strukturjämförelser och trendanalys för att bedöma de (eko)toxikologiska farorna med kemikalier som ska registreras enligt Reach. Detta bidrar till att sänka kostnaderna och minska antalet onödiga försök på ryggradsdjur.

QSAR-verktyget 3.0 innehåller många nya funktioner. De viktigaste är följande:

- Ytterligare datakällor har införlivats, bland annat studieresultat från webbplatsen för spridning enligt Reach.
- Kompatibelt med IUCLID 5.4.
- Kvantitativa förutsägelser av blandningars toxicitet.
- Förutsägelse av tautomeriska uppsättningar och simulator för ämnesomsättning.
- Genomförande av Adverse Outcome Pathways (AOPs) vid hudsensibilisering kompletterat med tre nya databaser med AOP-uppgifter för hudsensibilisering.

Dessutom innehåller QSAR-verktyget förbättrade sökfunktioner, 22 nya särskilda mekanistiska och endpointspecifika profileringsystem och en bättre rapporteringsmotor för hantering av blandningar, tautomerer och metaboliter.

Med QSAR-verktyget kan användaren

- identifiera analoger¹ för en kemikalie, få tillgång till försöksresultat som finns för dessa analoger och åtgärda databrister genom strukturjämförelser eller trendanalys,
- kategorisera stora register över kemikalier enligt verkningsmekanismer eller verkningsätt,
- åtgärda databrister för alla kemikalier med hjälp av biblioteket med (Q)SAR-modeller.
- bedöma en potentiell analogs robusthet för strukturjämförelser,
- bedöma en (Q)SAR-modells lämplighet för att åtgärda en databrist för en särskild målkemikalie,
- bygga (Q)SAR-modeller,
- förutse metaboliter eller generera tautomerer för målkemikalien.

¹ En analog definierar en kemikalie för vilken strukturjämförelse kan användas (se även Reach-vägledningen om QSAR och gruppering av kemikalier).

Version 3.0 är en slutlig version i ett fyraårigt samarbetsprojekt mellan OECD och Echa. Den finns nu tillgänglig för nedladdning.

Mer information

Material för gratis nedladdning och support:

QSAR-verktyget

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

Vägledning om informationskrav och kemikaliesäkerhetsbedömning

Kapitel R.6: QSAR och gruppering av kemikalier

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