

## 5. praktiline juhend

Kuidas esitada (Q)SAR-mudeleid

# ABC



Versioon	Muudatused	Kuupäev
Versioon 1.0	Esimene versioon	Märts 2010
Versioon 2.0	Praktilise juhendi ülesehituse ja sisu läbivaatamine. Versiooni uuendused: <ul style="list-style-type: none"> <li>Mittetöötavate hüperlinkide parandamine kogu dokumendis.</li> <li>Uued IUCLID-kuvahõived ja selgem tekst.</li> <li>2. peatükk „(Q)SAR-mudelite kasutamine“, mis käsitleb uurimis-arendusprojektides loodud vahendite kasutamist</li> </ul>	Detsember 2012

## 5. praktiline juhend – Kuidas esitada (Q)SAR-mudeleid

**Viide:** ECHA-10-B-10.1-ET  
**ISBN-13:** 978-92-9217-004-2  
**ISSN:** 1831-6727  
**Avaldamiskuupäev:** detsember 2012  
**Keel:** ET

© Euroopa Kemikaaliamet, 2012

Esikaas © Euroopa Kemikaaliamet

Vastutamatusesäte. See on algselt inglise keeles avaldatud dokumendi tõlke töövariant. Algdokument on ECHA veebilehel.

Reprodutseerimine on lubatud allikale viitamisel, lisades viite „Allikas: Euroopa Kemikaaliamet, <http://echa.europa.eu/>” ja saates avaldamise kohta kirjaliku teate ECHA teabetalitusele ([publications@echa.europa.eu](mailto:publications@echa.europa.eu)).

Kui teil tekib selle dokumendiga seoses küsimusi või tähelepanekuid, saate need esitada teabenõude vormil (märkige ülalesitatud viide ja väljaandmise kuupäev). Teabenõude vorm on ECHA veebilehel kontaktandmete jaotises: <http://echa.europa.eu/contact>

### EUROOPA KEMIKAALIAMET

Postiaadress: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Soome  
 Külastusaadress: Annankatu 18, Helsinki, Soome

## Sisukord

<b>1. Sissejuhatus .....</b>	<b>5</b>
<b>2. (Q)SAR-mudelite kasutamine .....</b>	<b>6</b>
2.1 Aine iseloomustamine.....	6
2.2 (Q)SAR-mudelid .....	6
2.3 Sobivuse üldine hindamine ja teatamine .....	6
<b>3. (Q)SAR-mudelite REACH-määruse kohane kasutamine ja teatamine.....</b>	<b>7</b>
3.1 Asjakohased juhendid.....	7
3.2 Kas (Q)SAR-mudel on kehtiv? .....	7
3.3 Kas aine on (Q)SAR-mudeli kohaldatavuspiirkonnas?.....	8
3.4 Kas mudeli prognoos on klassifitseerimise ja märgistuse ja/või riskihindamise jaoks sobiv?.....	8
3.5 Kuidas esitada (Q)SAR-mudeli prognoosi IUCLID 5 toimikus? .....	8
<b>4. Lisateave .....</b>	<b>14</b>

## 1. Sissejuhatus

Määrus (EÜ) nr 1907/2006, mis käsitleb kemikaalide registreerimist, hindamist, autoriseerimist ja piiramist (edaspidi REACH-määrus), näeb ette, et ainete ohutuse hindamiseks kasutatakse rohkem mittekatselisi meetodeid, näiteks struktuuri-aktiivsuse (kvantitatiivset) seost ((Q)SAR), ainete rühmitamist ja analoogmeetodit. Konkreetselt määratleb REACH-määruse eesmärgid selgroogsetega toimuvate tarbetute loomkatsete vältimise suhtes määruse põhjendus 47:

*„[...] on vaja asendada, vähendada või täiustada selgroogsete loomadega tehtavaid katseid. Käesoleva määruse rakendamine peaks põhinema alternatiivsete katsemeetodite kasutamisel igal võimalusel, kui need sobivad kemikaalidest tulenevate terviseriskide ja keskkonnaohu hindamiseks. Loomade kasutamist tuleks vältida, kasutades komisjoni või rahvusvaheliste asutuste kinnitatud või komisjoni või ameti poolt asjakohaseks ja käesoleva määruse alusel teabele esitavatele nõuetele vastavaks tunnustatud alternatiivseid meetodeid.“*

Neid meetodeid ja muid andmeallikaid tuleb kasutada enne seda, kui kaalutakse loomkatseid selgroogsetega. Käesolev praktiline juhend annab ülevaate struktuuri-aktiivsuse (kvantitatiivse) seose ((Q)SAR) mudelite abil ainete omaduste prognoosimise olulistest aspektidest, nagu need on määratletud REACH-määruses. Üksikasjalik lisateave on juhendites (vt jaotis 3.1).

Käesolev praktiline juhend ei kirjelda nõudeid, mis peavad olema täidetud tehnilise täielikkuse kontrolli läbimiseks; neid kirjeldab toodud andmete esitamise 5. käsiraamat „Kuidas täita tehnilist toimikut registreerimiste ja PPORD-teadete jaoks“.

## 2. (Q)SAR-mudelite kasutamine

(Q)SAR-mudelite tarkvara kasutamine on üsna lihtne. Hindamiseks, kas prognoosid on klassifitseerimise ja märgistuse ja/või riskihindamise jaoks usaldusväärsed ja adekvaatsed ning kas neid saab seega kasutada katsete asemel, on vaja siiski kogemust ja (Q)SAR-mudeli põhjalikku tundmist.

Registreerijatel tuleb olla uurimis-arendustegevuses loodud vahendite ja muude uuenduslike meetodite kasutamisel ainete omaduste prognoosimisel ja andmete esitamisest loobumisel ettevaatlik, sest need meetodid ei pruugi olla REACH- ja CLP-määruse regulatiivraamistikus asjakohased. Tuleb meeles pidada, et sellised prognoosid võivad olla piiratud, võivad oleneda üksnes valitud konkreetsest mudelist ja sobida ainult konkreetset juhul. Samas võib olla, et uuenduslikud ja muud kui standardmeetodid võivad koos tõendite kaalukuse meetodiga või integreeritud katsetamisstrateegiaga anda aine teatud omadusest täielikuma pildi ka siis, kui üksnes uuenduslike või muude kui standardmeetodite endiga ei saa omadust REACH- ja CLP-määruse nõuete täitmiseks adekvaatselt prognoosida.

### 2.1 Aine iseloomustamine

Keemiline struktuur tuleb määratleda kooskõlas REACH-määruse kohase identifitseerimise ja nimetamise juhendiga. Mitme koostisosaga ainete korral tuleb käsitleda iga koostisosa. Täpselt määratletud ainete koostises tuleb märkida ka kõik teadaolevad lisandid (ja lisaained, kui neid on). UVCB-ainete korral on vaja eksperdi hinnangut, et otsustada, kas saab nimetada aine iseloomulikke struktuuriosi. Stabiilsete muundumissaaduste olemasolul tuleb need nimetada. Tavaliselt nõutakse kemikaali struktuuri asjakohast esitusviisi (SMILES, molekulvalem jne). Vajaduse korral tuleb arvesse võtta stereokeemilisi vorme.

### 2.2 (Q)SAR-mudelid

SAR- ja QSAR-mudelid (üldnimetus kokku „(Q)SAR“) on teoreetilised mudelid, millega saab ühendi keemilise struktuuri põhjal kvantitatiivselt või kvalitatiivselt prognoosida füüsikaliskemilisi, bioloogilisi (nt ökotoksikoloogilisi) ja keskkonnas käitumise omadusi. SAR tähendab (all)struktuuri ja omaduse või toime esinemise või puudumise kvalitatiivset seost. QSAR on matemaatiline mudel, mis seostab üht või mitut keemilisest struktuurist tuletatud kvantitatiivset parameetrit omaduse või toime kvantitatiivse väärtusega. Kemikaali omaduse prognoosimiseks tuleb hinnata valitud (Q)SAR-mudeli kehtivust ja kontrollida, kas kemikaal on mudeli kohaldatavuspiirkonnas ja prognoos seega usaldusväärne.

### 2.3 Sobivuse üldine hindamine ja teatamine

Et koostada REACH-määruses sätestatud teabele esitatavatele nõuetele vastav adekvaatne prognoos, kas aine teatud omadus on olemas või puudub, peab (Q)SAR-tulemus täitma REACH-määruse XI lisa punktis 1.3 loetletud tingimusi: i) kasutada tuleb (Q)SAR-mudelit, mille teaduslik kehtivus on kindlaks määratud, ii) aine kuulub (Q)SAR-mudeli kohaldatavuspiirkonda, iii) prognoos on regulatiiveesmärgiks asjakohane ning iv) teave on piisavalt ja usaldusväärselt dokumenteeritud. Kui aine omadusi prognoositakse (Q)SAR-mudelite abil, peab hinnang esimese kolme loetletud punkti kohta sisalduma registreerimistoimikus. Kui kõigi tingimuste täitmiseks ei ole piisavalt teavet, saab prognoosi kasutada tõendite kaalukuse meetodi osana või lisateabena. Mida lähemal on tulemus regulatiivsele otsusepunktile (nt aine klassifitseerimine ohtlikuks või mitte), seda täpsem peab olema prognoos ja üksikasjalikumad põhjendused. Prognoositud omaduste põhjal tehtava võimaliku vale otsuse tagajärgede suuruse alusel saab hinnata, mil määral on prognoosi määramatus vastuvõetav.

## 3. (Q)SAR-mudelite REACH-määruse kohane kasutamine ja teatamine

### 3.1 Asjakohased juhendid

(Q)SAR-mudelite abil saadud mittekatseliste andmete kasutamise kokkuvõte on teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendi punktis R.4.3.2.1 „(Q)SAR-mudelite andmed“:

[Peatükk R.4: „Olemasoleva teabe hindamine“](#)

Spetsiaalne arvutusmeetodite osa on teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendi peatükis R.6.1 „(Q)SAR-mudelite kasutamine“:

[Peatükk R.6: „\(Q\)SAR-mudelid ja kemikaalide rühmitamine“](#)

Eri näitajate korral kasutatavad vahendid ja meetodid on loetletud näitajate kaupa teabele esitavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendis:

[Peatükk R.7: „Konkreetse näitaja juhised“](#)

Inimtervise seisukohalt saab olemasolevaid (Q)SAR-mudeleid kasutada peamiselt ohtude tuvastamiseks, eelkõige koos tõendite kaalukuse meetodiga, nagu on kirjeldatud teabele esitavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendis:

[Peatükk R.8: „Annuse \[kontsentratsiooni\] inimtervisele avalduva toime kirjeldus“](#)

Mitu (Q)SAR-mudelit, mille abil saab määrata PNEC-väärtusi, on loetletud teabele esitavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendi punktis R.10.2.2.2 „(Q)SAR-mudelid ja rühmitamismeetod“:

[Peatükk R.10: „Annuse \[kontsentratsiooni\] keskkonnale avalduva toime kirjeldus“](#)

PBT-ainete mittekatseliste lagunemis- ja bioakumuleerimisandmete teave on teabele esitavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendis:

[Peatükk R.11: „PBT-omaduste hindamine“](#)

### 3.2 Kas (Q)SAR-mudel on kehtiv?

(Q)SAR-mudelite kehtivust regulatiiveesmärgiks iseloomustatakse ja dokumenteeritakse OECD viie kokkulepitud põhimõtte järgi, nagu on kirjeldatud peatükis R.6.1 „(Q)SAR-mudelite kasutamine“:

1. (Q)SAR-mudel tuleb seostada kindlaksmääratud näitajaga.
2. (Q)SAR-mudel tuleb väljendada üheselt mõistetava algoritmina.
3. (Q)SAR-mudel tuleb seostada määratletud kohaldatavuspiirkonnaga.
4. (Q)SAR-mudel tuleb seostada mudeli asjakohase parameetriga (mudeli statistiline kvaliteet, stabiilsus ja prognoositavus).
5. (Q)SAR-mudel tuleb seostada inimtervise ja ökotoksikoloogia näitajate mehhanistliku tõlgendamise, kui võimalik.

Toimiku esitajale tuleb kasuks ja on väga soovitatav viidata hästi dokumenteeritud mudelile või lisada toimikule (Q)SAR-mudeli teatamise vorm (QRMF). QRMF-vormi koostamise üksikasjalikud juhised on teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendi peatüki R.6 „(Q)SAR-mudelid ja kemikaalide rühmitamine“ punktis R.6.1.9.1.

NB! Teadusuuringute Ühiskeskuse (JRC) (Q)SAR-mudelite andmebaasi (QMDB) eesmärk on anda teavet JRC-le eelretsenseerimiseks esitatud (Q)SAR-mudelite kohta

([http://qsar.db.jrc.it/qmrf/search\\_catalogs.jsp](http://qsar.db.jrc.it/qmrf/search_catalogs.jsp)).

(Q)SAR-mudelite ametlik vastuvõtmise kord puudub. (Q)SAR-mudelite kehtivust, kohaldatavust ja regulatiiveesmärgiks sobivust hinnatakse igal üksikjuhul eraldi.

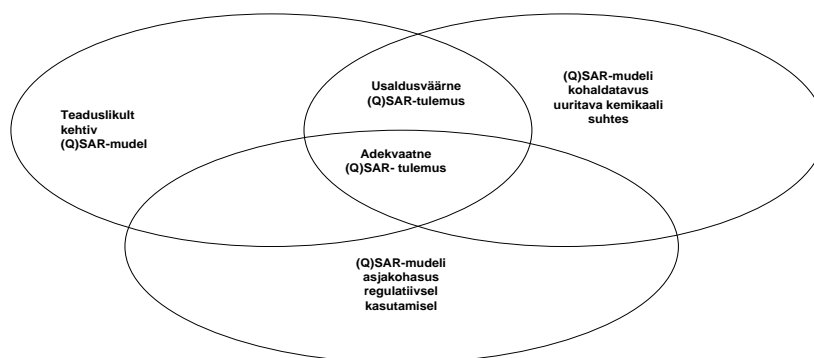
MÄRKUS. Kehtiv (Q)SAR-mudel ei taga tingimata usaldusväärset prognoosi. Tuleb hinnata, kas aine kuulub (Q)SAR-mudeli kohaldamispiirkonda, kas tulemused on klassifitseerimise, märgistuse ja/või riskihindamise jaoks adekvaatsed ning kas kasutatud meetodi kohta on esitatud adekvaatne ja usaldusväärne dokumentatsioon.

### 3.3 Kas aine on (Q)SAR-mudeli kohaldatavuspiirkonnas?

Usaldusväärse prognoosi saamiseks tuleb kontrollida, kas kemikaal kuulub mudeli kohaldatavuspiirkonda. Kohaldatavuspiirkonna mõiste võeti kasutusele eesmärgil hinnata tõenäosust, kas (Q)SAR-mudel kirjeldab kemikaali ja prognoos on kemikaali suhtes usaldusväärne. Mudeli kohaldatavatus võib põhineda näiteks molekulide (all)struktuuridel ja/või mitmel molekule kirjeldavatel näitajatel või prognoosiväärtustel. Kohaldatavuspiirkonna saab määratleda ka selliste kemikaalide (või ainevahetus- või lagunemissaaduste) järgi, mille reaktsioonimehhanismid on samad (nt reageerivuse või biomolekulidega vastasmõju tüüp). Mõnikord ei reageeri biomolekulidega kemikaal ise, vaid reageerivad selle ainevahetus- või lagunemissaadused, mistõttu on oluline uurida ka ainevahetus- ja lagunemisprotsesse ning nende saaduste reageerivust. Lisateave on teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise peatüki R.6 „(Q)SAR-mudelid ja kemikaalide rühmitamine” punktis R.6.1.5.3.

### 3.4 Kas mudeli prognoos on klassifitseerimise ja märgistuse ja/või riskihindamise jaoks sobiv?

Et (Q)SAR-mudeli prognoos oleks adekvaatne, peab see olema ühtaegu usaldusväärne ja regulatiivseks otsustamiseks asjakohane. Mudeli prognoosi adekvaatus klassifitseerimise ja märgistuse ja/või riskihindamise jaoks sõltub suuresti näitajast ning hindamiseks, kas koostatud prognoos on regulatiivseks otsustamiseks adekvaatne, võib olla vaja lisateavet. Sel põhjusel tuleb iga prognoosi kohta hinnata eraldi nii usaldusväärset (kas mudeli teadusliku usaldusväärset viisi OECD põhimõtet on täidetud?), kohaldatavust (kas mudeli kohaldamisel aine suhtes saab eeldada usaldusväärseid prognoose?) kui ka asjakohasust (kas sellega koostatakse riskihindamiseks ja/või klassifitseerimiseks ja märgistuseks nõutavat teavet?).



### 3.5 Kuidas esitada (Q)SAR-mudeli prognoosi IUCLID 5 toimikus?

Koos IUCLID 5 toimikus sisalduva (Q)SAR-mudeli prognoosiga tuleb esitada järgmised andmed:



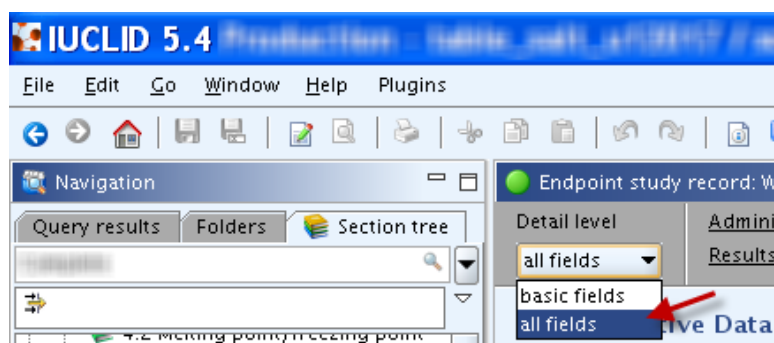
1. (Q)SAR-mudeli usaldusväarsuse teave
2. Kontrolliandmed, et aine kuulub (Q)SAR-mudeli kohaldatavuspiirkonda
3. Hinnang, kas tulemus on klassifitseerimise ja märgistuse ja/või riskihindamise jaoks adekvaatne

Kõigi kolme punkti teave tuleb koostada (Q)SAR-mudeli prognoosi esitamise vormi (QPRF) kohaselt. QRMF-vormi lisateave on teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendi peatüki R.6 „(Q)SAR-mudelid ja kemikaalide rühmitamine” punktis R.6.1.10.1.

NB! Registreeritav aine võib sisaldada mitut koostisosa ja/või lisandit. Sellistel juhtudel võib olla vaja koostada iga koostisosa kohta eraldi näitaja uuringu kirje, et käsitleda iga kemikaali eraldi (soovitav, kui eri koostisosadel on erinevad omadused ja seega tuleb kasutada eri mudeleid, hinnanguid vms).

Teave esitatakse IUCLID 5 toimiku näitaja uuringu kirje vormil järgmiselt.

Valige rippmenüüst „Detail level” (üksikasjalikkus) punkt „all fields” (kõik väljad).



### Plokk „Administrative data” (haldusteave)

- Väljale „Purpose flag” (eesmärgi lipp) märgitakse, kas hinnangut kasutatakse võtmeuringuna, lisatebena või tõendite kaalukuse hindamiseks.
- Väljale „Study result type” (uuringutulemuse liik) märgitakse „(Q)SAR”.
- Väljale „Reliability” (usaldusväarsus) märgitakse usaldusväarsuse hinnang, kusjuures (Q)SAR-mudeli prognooside usaldusväarsus on tavaliselt kuni 2.

**Administrative Data**

Purpose flag: weight of evidence  robust study summary  used for classification  used for MSDS

Data waiving:

Justification for data waiving:

Study result type: (Q)SAR  Study period:

Reliability: 2 (reliable with restrictions)

### Plokk „Data source” (andmeallikas)

- Väljale „Reference type” (viite liik) märgitakse viite liik: publikatsioon, tarkvara abiteave, ettevõttesisene mudel vms.
- Väljadele „Author” (autor) ja „Year” (aasta) märgitakse mudeli väljatöötajate andmed ja mudeli koostamise/avaldamise aasta. Väljale „Title” (pealkiri) märgitakse tarkvara

ja/või väljaande pealkiri ja versioon ning väljale „Bibliographic source“ (kirjandusviide) mudeli avaldamise kirjandusviide.

- Väljale „Data access“ (andmete kättesaadavus) märgitakse prognoosi kättesaadavuse teave.

**Data source**

Reference

Reference type	Author	Year	Title	Bibliographic sou...	Testing laboratory	Report no.	Owner company	Company study no.	Report date
publication	Pavan M, Worth AP, Netzeva TI	2005	Preliminary analysis of an aquatic toxicity dataset and assessment of QSAR models for narcosis.	JRC Report No. 21749 BN.					2009-08-28

Add... Edit... Delete Move up Move down Select Insert

Data access

data submitter is data owner

### Plokk „Materials and methods“ (materjalid ja meetodid)

- Kindlasti tuleb täita väli „Test guideline“ (katsesuunis), nt märges „other guideline“ (muu suunis) ja selle selgitus. Vajaduse korral saab tsiteerida (Q)SAR-mudelite valideerimise REACH-juhendit või katsesuunist, mida kasutati mudeli väljatöötamiseks andmete koostamisel.
- Väljale „Principles of method other than guideline“ (muu meetodi kui suunise põhimõtted) märgitakse mudeli nimetus.

**Materials and methods**

Test guideline

Qualifier	Guideline	Deviations
	other guideline: REACH guidance on QSARs R.6, May/July 2008	

Add... Edit... Delete Move up Move down

Principles of method if other than guideline

General model for narcosis (polar and non-polar)

### Plokk „Test materials“ (katsematerjalid)

- Kui (Q)SAR-mudelit kohaldatakse ainele nii, nagu on märgitud IUCLID 5 toimiku jaotises 1.1, valige rippmenüüst „Test material same as for substance defined in section 1 (if not read across)“ (katsematerjal sama kui 1. jaotises määratletud aine korral (v.a analoogmeetod) valik „yes“ (jah). Kui (Q)SAR-mudeli prognoos on tehtud aine ühe koostisosa kohta, valige „no“ (ei) ja märkige koostisosa nimetus väljale „Test material identity“ (katsematerjali identifitseerimisandmed).
- Väljale „Test material identity“ (katsematerjali identifitseerimisandmed) märgitakse selle aine teave, mille kohta prognoos tehti. NB! Registreeritav aine võib sisaldada mitut koostisosa ja/või lisandit. Iga koostisosa/lisandi kohta on soovitatav koostada eraldi näitaja uuringu kirje, et käsitleda iga kemikaali eraldi.
- SMILES-indeks tuleb märkida tabelisse „Test material identity“ (katsematerjali identifitseerimisandmed) või väljale „Details on test material“ (katsematerjali andmed).

- Konfidentsiaalse teabe saab märkida väljale „Confidential details on test material“ (katsematerjali konfidentsiaalsed andmed).

**Test materials**

Identity of test material same as for substance defined in section 1 (if not read-across)

yes

Test material identity

Identifier	
EC number	208-882-8
CAS number	328-37-0
IUPAC name	2,6-bis(2,3-dimethylbutyl)-6-methylphenol
other: SMILES	CC1=CC(=C(C=C1)C(C)C(C)C(C)C(C)C(C)C

Add... Edit... Delete Move up Move down

Details on test material

SMILES: CC1=CC(=C(C=C1)C(C)C(C)C(C)C(C)C(C)C

**SMILES to be reported in one of these fields**

### Plokk „Results and discussion“ (tulemused ja arutelu)

- Tavaliselt tuleb tulemused esitada ettenähtud tulemuseväljadel, sest nii saab IUCLID 5 kemikaaliohutuse aruande pistikprogrammiga kanda teabe tulemusväljadelt automaatselt üle kemikaaliohutuse aruandesse. Plokis „Results and discussions“ (tulemused ja arutelu) täidetavate väljade loetelu on näitajast. Tulemuste märkimist kirjeldatakse üksikasjalikult andmete esitamise 5. käsiraamatus „Kuidas täita tehnilist toimikut registreerimiste ja PPORD-teadete jaoks“.
- Väljale „Details on results“ (tulemuste andmed) või „Any other information on results incl. tables“ (tulemuste muu teave, sh tabelid) märgitakse mudeli liigi kirjeldus, mudeli kohaldatavuspiirkond ja selle mehhanistlik kohaldatavuspiirkond (toksilisuse ja ökotoksilisuse näitajate jaoks, kui asjakohane). Samale väljale tuleb märkida ka mudeli kehtivuse, aine mudeli kohaldatavuspiirkonda kuulumise ja prognoosi usaldusväärsuse/määramatuse arutelu.

**Results and discussions**

Effect concentrations

Duration	Endpoint	Effect conc.	Nominal/Measured
96	LC50	1.5 mg/L	

Add... Edit... Delete Move up Move down

Any other information on results incl. tables

Normal Arial 10 A B I U

Discuss whether the substance falls in the applicability domain of the model, reference to the type of model used, description and results of any possible structural analogues of the substance to assess the reliability of the prediction, uncertainty of the prediction and the mechanistic domain.

### Plokk „Overall remarks, attachments” (üldmärkused, manused) ja/või „Applicant’s summary and conclusions” (taotleja kokkuvõte ja järeldused)

- Regulatiivkasutuseks (riskihindamine, klassifitseerimine ja märgistus, PBT-analüüs) adekvaatsuse hinnang tuleb esitada väljadel „Overall remarks” (üldmärkused), „Conclusion” (järeldus) ja/või „Executive summary” (kommenteeritud kokkuvõte).

**Overall remarks, attachments**

Remarks on results including tables and figures

Adequacy assessment of the (Q)SAR results.

---

**Applicant’s summary and conclusion**

Validity criteria fulfilled

Conclusions

Adequacy assessment of the (Q)SAR results.

Executive summary

Adequacy assessment of the (Q)SAR results.

Soovitav on lisada ka (Q)SAR-proгноosi- ja (Q)SAR-mudeli teatamisvorm (OPRF ja QMRF) väljal „Attached background material” (lisatud taustteave). OPRF-vorm on avaldatud teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhendi punktis R.6.1.10 ja QMRF-vorm punktis R.6.1.9:

[http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information\\_requirements\\_r6\\_en.pdf](http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r6_en.pdf)

**Attached background material**

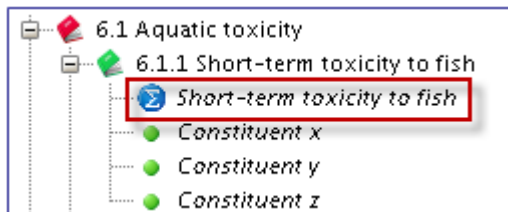
Attached document

Q SAR Prediction Reporting Format.doc

Ka (Q)SAR-mudeli prognoosi koostamisel kasutatud .mol-vormingus faili saab esitada väljal „Attached background material” (lisatud taustteave).

## Näitajauuringu kokkuvõte

Mitme näitajauuringu kirje olemasolu korral on soovitatav koostada näitajauuringu kokkuvõte ja anda selles näitaja kokkuvõtlik hinnang. IUCLID 5 kemikaaliohutuse aruande pistikprogrammiga saab selle teabe automaatselt üle kanda kemikaaliohutuse aruandesse.



## 4. Lisateave

- Teabele esitatavate nõuete ja kemikaaliohutuse hindamise juhend  
<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-information-requirements-and-chemical-safety-assessment>
- Rakendus (Q)SAR Application Toolbox  
<http://www.oecd.org/chemicalsafety/testingofchemicals/oecdquantitativestructure-activityrelationshipsprojectqsars.htm>
- OECD määratud OECD kategooriad  
<http://webnet.oecd.org/hpv/ui/ChemGroup.aspx>
- OECD ülemaailmne portaal (eChemPortal)  
[http://www.echemportal.org/echemportal/index?pageID=0&request\\_locale=en](http://www.echemportal.org/echemportal/index?pageID=0&request_locale=en)
- Andmete esitamise 5. käsiraamat „Kuidas täita tehnilist toimikut registreerimiste ja PPORD-teadete jaoks“  
[http://echa.europa.eu/documents/10162/13653/dsm5\\_tech\\_dossier\\_en.pdf](http://echa.europa.eu/documents/10162/13653/dsm5_tech_dossier_en.pdf)
- IUCLID 5 lõppkasutaja käsiraamat  
<http://iuclid.echa.europa.eu/index.php?fuseaction=home.documentation&type=public>



EUROOPA KEMIKAALIAMET  
ANNANKATU 18, P.O. BOX 400,  
FI-00121 HELSINKI, SOOME  
ECHA.EUROPA.EU