

REJESTRACJA SUBSTANCJI CHEMICZNYCH

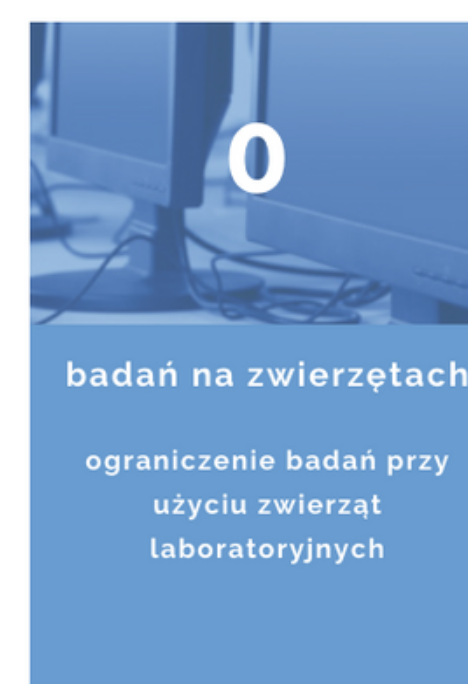
Standardy prawa europejskiego

Rozporządzenie REACH oraz pozostałe rozporządzenia dotyczące substancji chemicznych wprowadzanych do obrotu ściśle określają procedury gromadzenia i oceny informacji dotyczących właściwości substancji i związanych z nimi zagrożeń. Przedsiębiorcy muszą zidentyfikować i kontrolować ryzyka związane z substancjami produkowanymi i wprowadzanymi do obrotu w UE. Największym problemem podmiotów rejestrujących substancje jest wysoki koszt i długi czas procedury rejestracyjnej. Badania w tradycyjnych laboratoriach łączą się również z koniecznością przeprowadzania testów na zwierzętach, co wedle Rozporządzenia REACH, jest dopuszczalne tylko wtedy, gdy wszelkie metody alternatywne nie przyniosły pożądanych wyników.

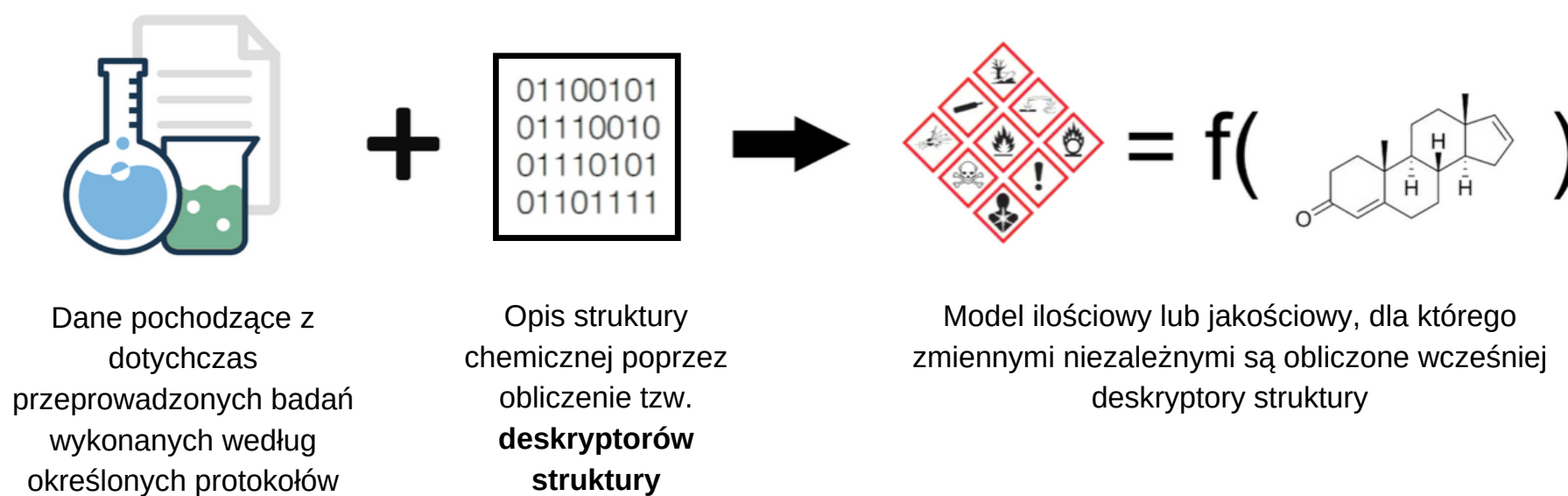
METODY KOMPUTEROWE

Jako alternatywa do badań laboratoryjnych

Metody alternatywne to m. in. metody komputerowe. Wśród nich REACH wskazuje takie jak: **QSAR** (ang. Quantitative Structure-Activity Relationship) oraz **szacowanie przekrojowe** (ang. read-across). Metody komputerowe pozwalają na szybkie przewidywanie określonych właściwości fizykochemicznych i toksyczności substancji, jednocześnie eliminując pracochłonne badania eksperymentalne, jak również czynniki natury etycznej związane z użyciem zwierząt laboratoryjnych.



JAK TO DZIAŁA?

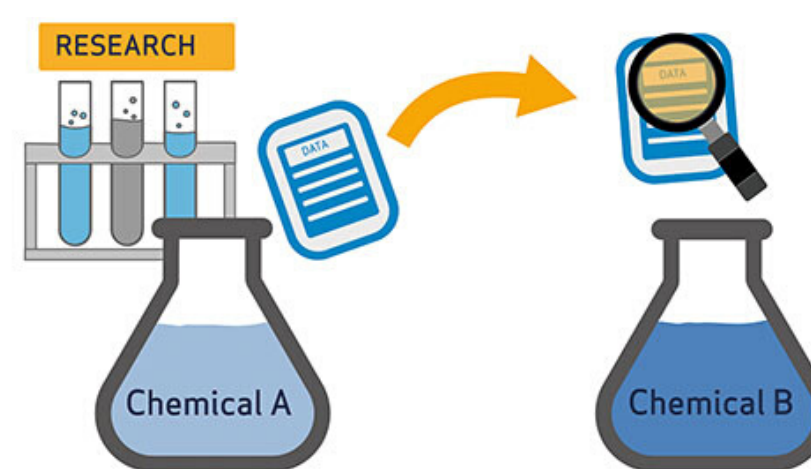


QSAR

czyli badania ilościowej zależności między strukturą związku a jego działaniem, opiera się na założeniu, że właściwości biologiczne substancji są matematyczną funkcją jej parametrów fizykochemicznych (deskryptorów).

READ-ACROSS

czyli szacowanie przekrojowe opiera się na ugruntowanym w chemii medycznej założeniu, że wspólne cechy strukturalne implikują podobne właściwości. Metoda ta polega na przewidywaniu profilu zagrożenia substancji, poprzez powiązanie jej ze strukturalnie podobnymi związkami, których dane eksperymentalne dotyczące efektu są już znane.



KOSZTY BADAŃ

Analiza jednej klasy zagrożenia (tzw. endpointu) np. Oszacowanie toksyczności ditlenku tytanu dla testu: **Toksyczność dawki powtórzonej** (Badanie krótkookresowej toksyczności dawki powtórzonej (28 dni), na jednym gatunku, w odniesieniu do samców i samic, wybór drogi podania stosownie do prawdopodobnej drogi narażenia człowieka: doustnie lub inhalacja lub skóra)

BADANIE W TRADYCYJNYM LABORATORIUM

ok. 260 tys. zł

BADANIE METODAMI KOMPUTEROWYMI

ok. 30 tys. zł

ZESPÓŁ QSAR LAB

QSAR Lab jest spółką typu B+R, o której potencjale stanowi wysoce wykwalifikowana kadra badawcza. Dyrektorem naukowym firmy jest **prof. dr hab. Tomasz Puzyn**, CEO QSAR Lab. Zespół tworzą specjaliści z zakresu komputerowego projektowania nowych, bezpiecznych substancji chemicznych, nanotechnologii, nanotoksykologii, statystyki chemicznej oraz chemometrii.

Firma QSAR Lab jest pionierem w zakresie modelowania aktywności biologicznej/właściwości fizykochemicznych **nanomateriałów**. Członkowie Zespołu QSAR Lab jako pierwsi na świecie dostosowali metodykę QSAR/QSPR do specyfiki nanocząstek.