

ECHA/NA/12/49

## QSAR Toolbox: ora disponibile nella versione 3.0

**La nuova generazione del QSAR Toolbox si presenta come uno strumento più completo per prevedere in modo affidabile le proprietà delle sostanze chimiche.**

**Helsinki, 31 ottobre 2012** – Il QSAR Toolbox aiuta le aziende e le autorità ad applicare le metodologie di relazione quantitativa struttura-attività ((Q)SAR) allo scopo di raggruppare le sostanze chimiche in categorie e colmare i divari fra i dati tramite read-across, l'analisi delle tendenze e la valutazione dei rischi di (eco)tossicità delle sostanze chimiche soggette alla registrazione ai sensi del regolamento REACH. Ciò contribuisce ad abbattere i costi e a evitare inutili sperimentazioni sugli animali vertebrati.

Il QSAR Toolbox 3.0 contiene numerose nuove funzioni, le più importanti delle quali sono:

- o inclusione di fonti di dati supplementari, compresi i risultati di studi dal sito Internet di divulgazione delle informazioni riguardanti il regolamento REACH;
- o compatibilità con IUCLID 5.4;
- o previsione quantitativa della tossicità delle miscele;
- o previsione delle forme tautomeriche e simulatore di metabolismo;
- o applicazione di percorsi che conducono a esiti avversi (Adverse Outcome Pathways - AOPs) correlati alla sensibilizzazione cutanea integrati da tre nuove banche dati che contengono i dati relativi agli AOP per la sensibilizzazione cutanea.

Inoltre, il QSAR Toolbox contiene funzionalità di ricerca migliorate, 22 nuovi schemi di definizione profilo meccanicistici e specifici dell'endpoint e un motore di rendicontazione avanzato per gestire miscele, tautomeri e metaboliti.

Grazie al QSAR Toolbox, l'utente può:

- o individuare gli analoghi<sup>1</sup> di una sostanza chimica, recuperare risultati sperimentali disponibili per tali analoghi e colmare i divari presenti tra i dati ricorrendo al read-across o all'analisi delle tendenze;
- o classificare elevate scorte di sostanze chimiche sulla base di meccanismi o modalità di azione;
- o colmare le lacune relative ai dati per qualsiasi sostanza chimica utilizzando la biblioteca dei modelli (Q)SAR;

<sup>1</sup> Un analogo definisce una sostanza chimica alla quale può essere applicato il read-across (v. anche il documento di orientamento REACH sulle QSAR e sul raggruppamento di sostanze chimiche).

- valutare se una sostanza potenzialmente analoga sia efficace per il read-across;
- valutare l'idoneità di un modello (Q)SAR per colmare il divario tra i dati di una particolare sostanza chimica bersaglio;
- costruire modelli (Q)SAR;
- prevedere metaboliti o generare tautomeri per la sostanza chimica bersaglio.

La versione 3.0 è il risultato finale di un progetto quadriennale di collaborazione tra l'OCSE e l'ECHA. Al momento può essere scaricata gratuitamente.

## **Ulteriori informazioni**

Scaricamento gratuito e materiale di supporto:

### **QSAR Toolbox**

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

### **Guida alle prescrizioni in materia d'informazione e alla valutazione della sicurezza chimica**

#### **Capitolo R.6: QSAR e raggruppamento delle sostanze chimiche**

[http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information\\_requirements\\_r6\\_it.pdf](http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r6_it.pdf)