

ECHA/NA/12/49

## La version 3.0 de QSAR Toolbox désormais disponible

**La nouvelle génération de la boîte à outils QSAR est plus complète pour prévoir de façon fiable les propriétés des produits chimiques.**

**Helsinki, le 31 octobre 2012** - La boîte à outils QSAR permet aux entreprises et aux autorités d'utiliser les méthodologies (Q)SAR (Quantitative Structure Activity Relationship, relation quantitative structure-activité) pour regrouper les substances par catégories et de combler les lacunes de données grâce à des références croisées ou à une analyse des tendances afin d'évaluer les risques (éco)toxicologiques des substances chimiques devant être enregistrées conformément au règlement REACH. Elle peut contribuer à réduire les coûts et à éviter des essais inutiles sur des animaux vertébrés.

La version 3.0 de QSAR Toolbox contient de nombreuses fonctionnalités, les plus importantes étant:

- Inclusion de sources de données supplémentaires, y compris les résultats d'étude provenant du site internet de diffusion des informations relatives à REACH;
- Compatibilité avec IUCLID 5,4;
- Prédiction quantitative de la toxicité des mélanges;
- Prédiction de la forme tautomérique et simulateur de métabolisme;
- Mise en œuvre de parcours de résultats nocifs (AOP) relatifs à la sensibilisation cutanée, complétée par trois nouvelles bases de données contenant des données AOP sur la sensibilisation cutanée.

En outre, la boîte à outils QSAR contient des fonctionnalités de recherche améliorées, 22 nouveaux modèles de profilage spécifiques aux mécanismes et aux effets et un outil de rapport avancé pour les mélanges, les tautomères et les métabolites.

À l'aide de la boîte à outils QSAR, l'utilisateur peut:

- identifier des substances analogues<sup>1</sup> à une substance chimique, récupérer les résultats expérimentaux disponibles pour ces substances analogues et combler les lacunes de données grâce à une analyse de tendance ou de références croisées;
- classer les substances chimiques des grands inventaires par catégories, en fonction de leur mécanisme ou de leur mode d'action;

---

<sup>1</sup> Une substance analogue désigne une substance chimique pour laquelle on peut utiliser des références croisées (voir également le guide REACH concernant les QSAR et le regroupement de substances chimiques).

- combler les lacunes de données pour chaque substance chimique, en consultant la bibliothèque de modèles (Q)SAR;
- évaluer la robustesse d'une substance potentiellement analogue pour les références croisées;
- évaluer le caractère approprié d'un modèle (Q)SAR pour combler une lacune de données pour une substance chimique ciblée en particulier;
- élaborer des modèles (Q)SAR;
- prévoir les métabolites ou produire les tautomères pour la substance chimique ciblée.

La version 3.0 est l'édition finale d'un projet de collaboration de quatre ans entre l'OCDE et l'ECHA. Elle est dès à présent téléchargeable.

## **Informations complémentaires:**

Téléchargement gratuit et documentation:

### **QSAR Toolbox**

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

### **Guide sur les exigences d'information et l'évaluation de la sécurité chimique Chapitre R.6: RQSA et regroupement des produits chimiques**

[http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information\\_requirements\\_r6\\_fr.pdf](http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r6_fr.pdf)