

ISSTOX Guida all'uso:

Ogni evento tossicologico e' rappresentato da una base di dati differente. Al loro interno, ogni base di dati e' costituita da tre file, che possono essere scaricati liberamente e separatamente (per esempio, *ISSCAN_vvv_nnn_ddddddd.xls*, *ISSCAN_vvv_nnn_ddddddd.pdf*, *ISSCAN_vvv_nnn_ddddddd.sdf*).

Il nome dei file contiene l'indicazione della versione, del numero di sostanze, e della data. Per esempio, *ISSCAN_v1a_774_10Dec04.xls* indica le versione v1a, con 774 sostanze, del 10 dicembre 2004 della base di dati ISSCAN.

Il file *ISSCAN_vvv_nnn_ddddddd.xls* è leggibile con il programma Microsoft Excel. Per ogni sostanza, esso contiene vari identificativi ed i dati tossicologici.

Il file *ISSCAN_vvv_nnn_ddddddd.pdf* è leggibile con il programma Adobe Acrobat Reader, e contiene le strutture chimiche in forma grafica.

Il file *ISSCAN_vvv_nnn_ddddddd.sdf* è leggibile con programmi specializzati. In aggiunta alle informazioni contenute nel file *ISSCAN_v1a_774_10Dec04.xls*, contiene le formule chimiche in formato .sdf (structure-data file).

Per la sua particolare struttura, questa base di dati può essere usata a vari livelli e per scopi diversi. Il livello d' uso più semplice è la ricerca di informazioni nel file .xls, attraverso il nome (e sinonimi) ed il numero CAS delle sostanze. La struttura, se necessario, può essere reperita nel file .pdf secondo la comune convenzione grafica.

Una peculiarità di queste basi di dati è la codifica delle strutture chimiche sia in forma SMILES che in forma .sdf. Queste codifiche sono lette da una vasta serie di programmi specializzati (per esempio, Chemoffice, Sybyl, Maestro, Insight II, Tsar, Daylight Toolkits, etc...). Essi permettono una amplissima gamma di operazioni, dalla visualizzazione in 3 dimensioni della molecola, fino al calcolo di descrittori e proprietà molecolari che possono essere usati in studi di relazioni quantitative tra struttura chimica ed attività biologica (Quantitative Structure-Activity Relationships, QSAR).

Inoltre, particolarmente importante per il ruolo di queste basi di dati come supporto alle decisioni di esperti è la possibilità di fare ricerche per sottostrutture chimiche o gruppi funzionali, e di leggerle come basi di dati relazionali, con la possibilità di combinare domande sulla struttura chimica con domande sull'informazione biologica. A tale scopo devono essere applicati al file .sdf programmi specializzati, di tipo Basi di Dati Chimiche Relazionali (Chemical Relational Database (CRD)). Tra tali programmi specializzati citiamo: Leadscope, Chemfolder, Hyleos.

Ulteriori informazioni sui programmi citati, sul concetto di Basi di Dati Chimiche Relazionali, sui tipi di file e sulla loro utilizzazione possono essere trovate nel sito del Progetto DSSTox (<http://www.epa.gov/nheerl/dsstox/>).

Nota: I programmi commerciali citati non devono in alcun modo essere considerati come i preferiti dai responsabili della presente base di dati. Vengono elencati per pura informazione ed a scopo esemplificativo, senza ordine di preferenze e senza pretesa di esaustività.

Caveat

Le informazioni contenute in questa base di dati sono state tutte attentamente controllate, e, quando esistenti, piu' sorgenti di dati sono state confrontate. Tuttavia i curatori non possono assicurare che esse siano esenti da errori, e saranno lieti di accogliere suggerimenti e segnalazioni.

Per usi di particolare rilevanza e delicatezza (per esempio, per scopi regolamentativi), si invita a consultare la sorgente originaria dei dati, in quanto il risultato finale di un saggio tossicologico e' in genere il riassunto di una mole notevole ed articolata di dati.

Ringraziamenti

Si ringraziano per i loro contributi allo sviluppo di ISSTOX: Chiara Laura Battistelli, Celestina D'Ascoli, Laura Passerini, Anna Pino, Maria Rosaria Vari'. Si ringraziano Ann M. Richard e Chia-hae Yang per gli utili commenti e discussioni.

Referenze principali

Benigni, R., Bossa, C. 2011. Mechanisms of chemical carcinogenicity and mutagenicity: a review with implications for predictive toxicology. Chem.Revs. 111, 2507-2536.

Benigni, R., Bossa, C., Richard, A. M., & Yang, C. 2008. A novel approach: chemical relational databases, and the role of the ISSCAN database on assessing chemical carcinogenicity. Ann.Ist.Super.Sanita' 44, 48-56.

Hansch, C., Hoekman, D., Leo, A., Weininger, D., & Selassie, C. D. 2002. Chem-bioinformatics: comparative QSAR at the interface between chemistry and biology. Chem.Rev. 102, 783-812.

Tomatis, L. & Huff, J. 2001. Evolution of cancer etiology and primary prevention. Environ.Health Perspect. 109, 5-7.

Worth, A. P., Bassan, A., de Bruijn, J., Gallegos Saliner, A., Netzeva, T. I., Pavan, M., Patlewicz, G., Tsakovska, I., & Eisenreich, S. 2007. The Role of the European Chemicals Bureau in Promoting the Regulatory Use of (Q)SAR Methods. SAR QSAR Environ.Res. 18, 111-125.