

QSAR Toolbox verze 2.2 nyní ke stažení

Verze 2.2 z OECD (Q)SAR Toolbox pro seskupení chemických látek do kategorií je nyní k dispozici ke stažení.

Tento software pomáhá žadatelům a státním orgánům používat metodiku (Q)SAR k seskupování chemických látek do kategorií a k doplňování dat pomocí read-across, analýzy trendů a k posuzování (eko)toxicity chemických látek podle nařízení REACH. To pomáhá snížit náklady a také zbytečné testování na obratlovcích.

Uživatel může pomocí tohoto softwaru:

- identifikovat analogy k chemickým látkám, získat experimentální výsledky pro ty analogy a doplňovat si údaje pomocí read-across nebo analýzou trendů
- kategorizovat velké zásoby chemických látek v souladu s mechanismy nebo způsoby působení
- doplňovat údaje chemických látek pomocí knihovny (Q)SAR modelů
- posoudit odolnost potenciálního analogu pomocí read-across
- vyhodnotit vhodnost (Q)SAR modelů pro doplňování dat konkrétních cílových chemických látek
- sestavovat (Q)SAR modely

Verze 2.2 má vylepšené profilování, softwarové funkce a rozhraní. Dále také obsahuje nové údaje o mutagenitě.

Ke stažení spolu s dalšími materiály naleznete na :<http://www.qsartoolbox.org/>