

Útil base de datos gratuita ComTox de la EPA

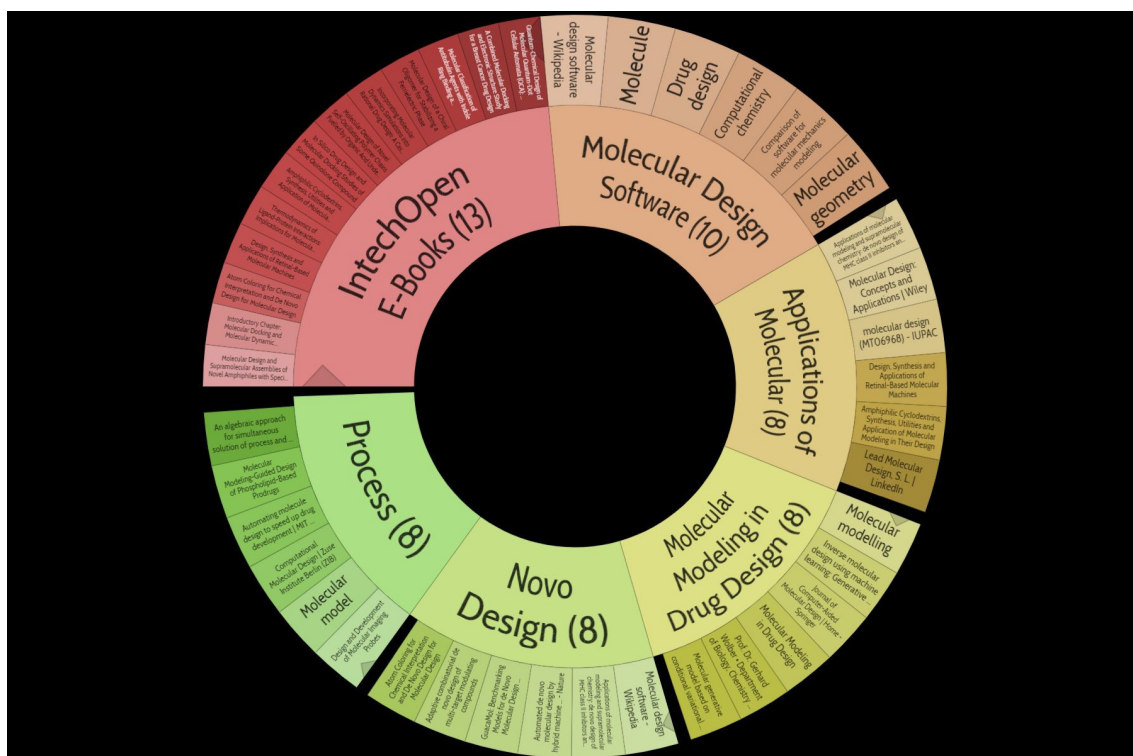


Ilustración 1- Diagrama de búsqueda en Carrot2 sobre diseño molecular realizado con Circles™

A pesar de una abundancia de fuentes en línea que proporcionan acceso a datos químicos, hay una creciente demanda por bases de alta-calidad, estructura-curada y datos abiertos para satisfacer las diversas necesidades de investigadores y científicos.

El CompTox Chemistry Dashboard de la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (EPA, por sus iniciales en inglés) satisface estas necesidades mediante la integración de varios tipos de datos relevantes a través de una capa de quimioinformática (cheminformatics), construida sobre una base de datos de sustancias vinculadas a estructuras químicas. Se incluyen datos fisicoquímicos, destino y transporte ambiental, exposición, uso, toxicidad en vivo y datos de bioensayos in vitro, que surgieron a través de un centro de integración con enlaces a datos adicionales de la EPA y recursos en línea de dominio público.

La búsqueda por lotes permite la asignación directa de identificadores químicos (ID) y la descarga de múltiples flujos de datos en varios formatos diferentes. Esto facilita el acceso rápido a los datos disponibles de estructura, propiedad, toxicidad y bioensayo para colecciones de productos químicos (cientos a miles a la vez). Las capacidades avanzadas de búsqueda están disponibles para apoyar, por ejemplo, el análisis no dirigido y la identificación de productos químicos mediante espectrometría de masas. El contenido de la base de datos de química, que actualmente contiene más de 800.000 sustancias, está disponible como datos de dominio público para su descarga.

Referencia: <https://comptox.epa.gov/dashboard>