

Практикум «Достоверное моделирование опасных свойств химических веществ с использованием QSAR Toolbox.»

QSAR – количественное соотношение структуры и свойств химических веществ является процедурой построения моделей, позволяющих по структурам химических соединений предсказывать их разнообразные свойства.

QSAR является существенной альтернативой проведению новых дорогостоящих токсикологических испытаний на животных.

Методы QSAR – это свежее моделирование, прямой перенос данных и read-across.

В данном практикуме будут представлены рекомендации по использованию передового настольного приложения QSAR Toolbox для этих целей.