



以勒标准
Jireh Standard

QSAR CHINA

计算毒理服务

Computational Toxicology

计算毒理方法

计算毒理方法融合了毒理学、计算化学、化学/生物信息学等多学科资源,通过构建数学或计算机(*in silico*)模型,以实现物质危害性的高效预测。与传统实验相比,具有经济、快速、便捷等优点。常用的计算毒理方法有QSAR, Read-across以及TTC等。

计算毒理方法主要用于原药等同性评估 (Technical Equivalence), 也即TE评估。TE评估中, 当有新杂质出现或者现有杂质含量产生增加时, 需要进一步关注该杂质的毒性是否会对原药整体毒性产生重要影响。鉴于原药杂质种类繁多且含量较低, 无法一一通过实验验证其毒性, 因此欧盟、墨西哥、巴西、澳大利亚以及俄罗斯等国家和地区均推荐采用计算毒理方法进行杂质的危害性筛选。



农药领域



医药领域

计算毒理方法主要用于 ICH M7 遗传毒性杂质鉴别和分类。遗传毒性杂质是指在较低水平时也有可能直接引起 DNA 损伤, 导致 DNA 突变, 可能引发癌症的 DNA 反应性物质, 如亚硝酸胺类物质。ICH M7 要求企业提供两种互补的 QSAR 预测模型 (分别基于专家规则和统计学模型) 来评估医药中遗传毒性杂质的致突变性。

欧盟REACH法规可以接受理化、健康和生态毒理多个节点的计算毒理预测数据。中国《新化学物质环境管理登记指南》同样规定, 对于无法进行实际测试的特殊情况, 申请数据也可以来自QSAR和Read-across等预测数据。



化学品领域



化妆品领域





鉴于欧盟“动物实验禁令”, 计算毒理方法在化妆品领域应用广泛, 特别是化妆品原料风险评估; 中国《化妆品安全评估技术导则》要求, 对于部分缺乏系统毒理学研究数据的化妆品原料可以采用TTC或Read-across的方法进行风险评估。



QSAR 研发服务

-  QSAR 建模
-  分子模拟
-  量子化学计算
-  软件及数据库服务

QSAR 应用服务

-  农药原药等同性评估QSAR服务
-  医药ICH M7遗传毒性杂质分析QSAR服务
-  化学品欧盟REACH和中国新化学物质登记QSAR服务
-  化妆品原料风险评估QSAR服务

我们的优势

· 丰富预测经验

为企业提供一站式计算毒理服务,丰富的合规预测经验,超过100+物质的成功案例。

· 顶尖科研团队

与全国顶尖高校科研团队成为合作单位,拥有国内最专业的技术和人才支持。

· 透明定价策略

拥有在国际上充满竞争力的价格优势,定价规则清晰透明合理。

QSAR NET 计算毒理服务平台

作为全国领先的计算毒理服务平台, QSAR NET致力于计算毒理技术的普及和推广,促进计算毒理方法在产品、合规贸易和风险评估中的应用,以提高企业效益、保护动物福利、保障人类健康和环境安全。

网站包含五大板块,从技术到应用,从资讯到交流,让您一站式全方位了解计算毒理技术。

- 计算毒理培训:** 全面详尽的计算毒理培训,从基础知识到实际应用,多形式多方面,为您提供专业定制的培训教程;
- QSAR 资讯:** 全球最新鲜的 QSAR 资讯,专业的文章解读,轻松的小 liu 说 QSAR,一站式了解计算毒理最新资讯和动态;
- 资源中心:** 各国法规监管要求、指南文件、QSAR 软件等海量资源免费下载;
- 服务与案例:** 农药、医药以及新化学物质领域计算毒理方法的应用实例一目了然;
- 问答交流:** 互动留言与疑难解答。

 QSAR NET www.qsarchina.com 

联系我们



杭州以勒标准技术有限公司
Mail: infor@jirehstandard.com

Tel: 0571-85190521 Web: www.jirehhz.com
Add: 杭州市莫干山路18号蓝天商务中心1502室