Un buscador da información sobre toxicidad de compuestos químicos

Un equipo del Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas ha desarrollado una herramienta *on line* que busca en la literatura científica reacciones adversas y toxicidad de compuestos químicos, con especial énfasis en el daño hepático. También permite el acceso a información sobre otros efectos secundarios como nefrotoxicidad y cardiotoxicidad.

SINC 31/5/2017 12:00 CEST

La obtención de información biológica y química relevante es crucial para el conocimiento científico y la toma de decisiones en áreas como la química-biología, desarrollo de fármacos, toxicología y farmacogenética. / Fotolia

Científicos del Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas (CNIO) han desarrollado una herramienta de búqueda *on line*, llamada LimTox que ayuda a encontrar información sobre las reacciones adversas y la toxicidad de los compuestos químicos. Los resultados del trabajo se han publicado en la revista *Nucleic Acids Research*.

El *software* incorpora la última tecnología en minería de textos, lenguaje y aprendizaje automático para potenciar el motor de búsqueda biomédico.

Según sus creadores, LimTox permite la recuperación y clasificación de elementos químicos y biológicos de interés, las interacciones entre ellos, la visualización de las estructuras químicas de los compuestos detectados de forma automática en los textos y la generación de redes de relación entre ellos.

La complejidad de los datos biomédicos requiere motores de búsqueda sofisticados que estén específicamente diseñados para proporcionar resultados que se ajusten a los términos de búsqueda. Además, hay un interés creciente por herramientas que se integren de forma sencilla y que sean capaces de construir bases de conocimiento biológico y de analizar datos experimentales.

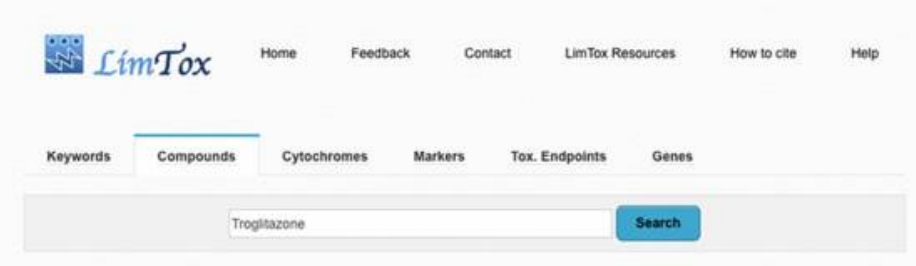

Imagen de la página web de la herramienta LimTox. / CNIO

“El trabajo en minería de datos asociados a genes ha avanzado considerablemente pero en el caso de los compuestos químicos, aún hay mucho por hacer”, explica Martin Krallinger, jefe de la Unidad de Minería de Textos en Biología del CNIO y responsable del artículo. “LimTox supone una aportación importante en este campo”, añade.

La obtención de información biológica y química relevante que aparece tanto en la literatura científica como en los informes de las agencias regulatorias es crucial para el conocimiento científico y la toma de decisiones en áreas como la química-biología, desarrollo de fármacos, toxicología y farmacogenética.

LimTox permite el acceso sistemático a información relevante sobre efectos secundarios de compuestos químicos

LimTox pone especial énfasis en datos relacionados con la alteración de la función hepática y la hepatocarcinogénesis. También permite el acceso sistemático a información relevante sobre otros efectos secundarios (nefrotoxicidad, cardiotoxicidad…), alteraciones de parámetros bioquímicos relacionados con la función del hígado y de enzimas clave del metabolismo de los fármacos (citocromos P450 o CYPs).

“Entre todos los posibles efectos adversos de un fármaco, la hepatotoxicidad representa uno de los más relevantes, y puede condicionar críticamente el desarrollo o la vida de un medicamento. Por ello el hígado es fundamental en los estudios de toxicología, debido a su papel central en el metabolismo, excreción y síntesis bioquímica; además, los mecanismos por los que un fármaco puede desencadenar toxicidad hepática son diversos y complicados”, explica Krallinger.

Hepatoxicidad

La herramienta online proporciona conocimiento estructurado extraído a partir de los abstracts y artículos completos de la biblioteca biomédica PubMed, los informes de la Agencia Europea del Medicamento (EMA, por sus siglas en inglés) y los informes de solicitud de nuevos fármacos de la Agencia Estadounidense de Alimentos y Medicamentos (FDA, por sus siglas en inglés).

El servidor LimTox ayudará a que investigadores y clínicos encuentren de forma rápida y eficaz reacciones adversas a través de sencillas búsquedas por palabras clave o de consultas concretas sobre compuestos químicos o genes. La herramienta es gratuita y está disponible para cualquier usuario.

Derechos: **Creative Commons**

TAGS | BUSCADOR | COMPUESTOS QUÍMICOS | TOXICIDAD | EFECTOS SECUNDARIOS |

Creative Commons 4.0
Puedes copiar, difundir y transformar los contenidos de SINC. Lee las condiciones de nuestra licencia

La ciencia es noticia