



SAR & QSAR en Toxicología Ambiental

Karina Martínez-Mayorga¹, Fernando Cortés-Guzmán¹, Joaquín Barroso-Flores¹, José L. Medina-Franco²,

¹Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, México; ²Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, México
e-mail: kmtzm@unam.mx

La toxicología ambiental estudia los daños causados al organismo por la exposición de compuestos tóxicos que se encuentran en el ambiente. Se pueden determinar diferentes aspectos como son la toxicidad aguda, subaguda, crónica, neurotoxicidad, carcinogénesis, mutagénesis, etc. En los últimos 30 años, los métodos QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships) y SAR (Structure-Activity Relationships) han evolucionado grandemente. El uso original enfocado a la cuantificación de las relaciones estructura-actividad se ha ampliado al área de la toxicología ambiental. Las guías desarrolladas en la *International Conference on Harmonisation (ICH)* en particular la ICH – M7 provee del marco práctico aplicable a la identificación, clasificación, cuantificación y control de impurezas mutagénicas con el fin de limitar el potencial riesgo de carcinogenicidad. En este trabajo se presentan las bases de las metodologías SAR y QSAR empleadas en la predicción de toxicidad aguda, los principios de la OECD (Organization for Economic Cooperation and Development) y ejemplos derivados de productos naturales de la flora mexicana.