



**Corso teorico-pratico:
applicazione dei metodi computazionali nel Replacement**
c/o aula G del Dipartimento di Scienze degli Alimenti e del Farmaco, Università di
Parma, Campus delle Scienze, via Langhirano, 43124 Parma

Programma

Mercoledì 27 settembre 2023

10.30-11.30 **Thomas HARTUNG**, *John Hopkins University of Baltimore - CAAT*
Computational approaches as NAMs in Replacement: from read-across to organoids

ore 11.30-13.30 (teoria) e 15.00-17.00 (pratica)
Antonio FACCHIANO, *IDI-IRCCS*
DBsearch, database searching

Giovedì 28 settembre 2023

ore 08.30-10.30 (teoria) e 14.00-16.00 (pratica)
Orazio NICOLOTTI, Fulvio CIRIACO, Nicola GAMBACORTA, Daniela TRISCIUZZI, *Università degli Studi di Bari*
QSAR – 1, PLATO: a drug discovery platform for target fishing and bioactivity prediction

ore 10.30-12.30 (teoria) e 16.00-18.00 (pratica)
Emilio BENFENATI, Alessandra RONCAGLIONI, Gianluca SELVESTREL
Istituto Ricerche Farmacologiche Mario Negri (IRFMN)
QSAR – 2, the VEGAHUB tools

Venerdì 29 settembre 2023

ore 08.30-10.30 (teoria) e 14.00-16.00 (pratica)
Chiara Laura BATTISTELLI, Cecilia BOSSA, Olga TCHEREMENSKAIA
Istituto Superiore di Sanità (ISS)
QSAR – 3, the QSAR toolbox – a free software application to support chemical hazard identification

ore 10.30-12.30 (teoria) e 16.00-18.00 (pratica)
Pietro COZZINI, Federica AGOSTA
Università degli Studi di Parma
MolDock, modelling interactions by molecular docking – a tool for structure-based drug discovery and toxicology

La partecipazione è limitata a 20 iscritti previa adesione come socio a IPAM.

L'organizzazione offrirà le cene di mercoledì 27 e giovedì 28 settembre 2023, mentre altre spese di vitto e le spese di alloggio sono a carico dei partecipanti.

Per iscriversi: <https://www.ipamitalia.org/form-iscrizione/>

NB: L'accesso alle esercitazioni pratiche avverrà con i laptop dei partecipanti stessi.

*Le istruzioni per l'arrivo alla sede universitaria sono contenute al seguente link:
<https://www.saf.unipr.it/it/dipartimento/dove-siamo>*

Comitato organizzatore:

Italian Platform on Alternative Methods (IPAM): Stefano Lorenzetti (ISS)
per conto di: Maurilio Calleri (LIMAV Italia OdV), Francesca Caloni (Università degli Studi di Milano), Isabella De Angelis (ISS), Cristina Maria Failla (IDI-IRCCS), Paola Granata (Federchimica – Aispec – Gruppo MAPIC), Michela Kuan (LAV), Stefano Lorenzetti (ISS), Francesco Nevelli (Merck KGaA), Augusto Vitale (ISS)

Università di Parma: Pietro Cozzini, Federica Agosta