



**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