

Lunedì 10 febbraio 2020

SALA FALCO

11.00-18.30 CORSO PRE CONGRESSUALE NON ECM: LINKING IN SILICO METHODS TO NAVIGATION OF CHEMICAL SAFETY/RISK ASSESSMENT

Moderatore: *Corrado Lodovico Galli (Milano)*

Speakers:

Marina Marinovich (Milan University)
Elena Fioravanzo (ToxNavigation), Mark Cronin (LJMU)
Chihae Yang (MN-AM)
Christof Schwab (MN-AM)

TOPICS:

Structure Representation:

Scientific Problem Statement:

structure representation for knowledge and chemical safety

Technical/Chemoinformatics Solution:

- How chemical structures are represented and stored by computers (SD and MOL files, SMILES, InChI)
- Structure-based descriptors: fingerprints (ToxPrints, MACCS keys, RDKit fingerprints, etc.)
- How to handle UVCBs

DB Searching & Calculation:

Scientific Problem Statement: similar structures vs. analogues

Technical/Chemoinformatics Solution:

- Calculation of fingerprints, molecular descriptors and physicochemical properties
- Methods for quantitatively evaluating the similarity between chemical compounds
- Structure-based similarity, physicochemical property-based similarity, biological similarity

Case Study:

Scientific Problem Statement:

description of cases, both common and difficult

Technical/Chemoinformatics Solution:

- (Quantitative) Structure-Activity Relationships: QSAR and Structural rules/alerts
- Read across approach
- Threshold of Toxicological Concern (TTC)

Informazioni Generali

SEDE DEL CONGRESSO

Savoia Hotel Regency
Via del Pilastro 2 - 40127 Bologna
www.savoia.it

SEGRETERIA ORGANIZZATIVA



Adria Congrex srl
Via Sassonia, 30 - 47922 Rimini
T 0541 305873 - @ c.imola@adriacongrex.it
www.adriacongrex.it

QUOTE DI ISCRIZIONE

	ENTRO IL 15/11/2019	DALL' 1/11/2019 AL 12/02/2020
Socio SITOX (*)	€ 180,00	€ 230,00
Non socio SITOX (**)	€ 305,00	€ 366,00
Socio SITOX under 35 strutturato (*)	€ 100,00	€ 150,00
Non Socio under 35 strutturato (**)	€ 195,20	€ 256,20
Socio SITOX under 35 non strutturato (*)	€ 80,00	€ 130,00
Non Socio under 35 non strutturato (**)	€ 170,80	€ 231,80
Specializzandi (**)	€ 122,00	€ 122,00
Socio Sitox Corsi ECM del 10 febbraio (*)	€ 100,00	€ 100,00
Non Socio Sitox Corsi ECM del 10 febbraio (**)	€ 195,20	€ 195,20
Socio Sitox Corso "Linking In Silico Methods to Navigation of Chemical Safety/Risk Assessment" del 10 febbraio (*)	€ 100,00	€ 100,00
Non Socio Sitox Corso "Linking In Silico Methods to Navigation of Chemical Safety/Risk Assessment" (**)	€ 195,20	€ 195,20

(*) IVA non applicabile ex Art. 4 DPR 633/72

(**) IVA inclusa

NB: Per le quote SOCIO SITOX sarà emessa ricevuta su carta intestata SITOX. Ai soci che per motivi di rimborso hanno necessità di presentare fattura verrà emessa fattura maggiorando di Iva la quota socio previa pagamento dell'Iva corrispondente.