



Aplicación de modelos predictivos *in silico* en toxicología regulatoria

Ponentes: Salvador Moncho Escrivà (Director de Tecnología de ProtoQSAR)
Ágata Llobet Mut (Investigadora en ProtoQSAR)

Lugar: Aulario de la Merced, Murcia

Fecha: 2 de Julio de 2024

Horario: Dos sesiones 16.15-17.45 y 18:00-19:45

Registro: Escribir correo electrónico a toxvet@um.es indicando nombre completo, NIF y teléfono de contacto.

Descripción: Los modelos *in silico* son una herramienta de gran interés en el ámbito toxicológico, se pueden usar para sustituir a los estudios en animales, reduciendo el impacto ético, el coste de recursos y el tiempo de espera. En este taller te vamos a enseñar a como predecir propiedades toxicológicas de manera fácil usando modelos QSAR. Además, te explicaremos las nociones básicas sobre técnicas computacionales para que sepas reconocer las más habituales (read-across, QSAR, etc.) y entender sus principales características, ventajas y limitaciones.

Destinatarios: Este taller va dirigido tanto a estudiantes y recién egresados de ciencias experimentales y de la salud como a profesionales que necesitan evaluar la toxicidad de compuestos químicos, para fines regulatorios o de desarrollo. No requiere conocimientos previos de química computacional.

Requisitos: El taller conlleva una parte práctica, así que es necesario un ordenador con acceso a internet y una dirección de correo electrónico para registrarse en ProtoPRED y activar una cuenta de prueba gratuita durante 6 meses.

Contenidos del taller:

- Uso de modelos computacionales en toxicología regulatoria
- Tipos de modelos *in silico*
- Nociones básicas de QSAR
- ProtoPRED y otras herramientas para predecir
- Ejercicios prácticos
 - Mutagenicidad de impurezas (normativa ICH-M7)
 - Requisitos de información de REACH
 - Predicción de sustancias de riesgo
 - Evaluación de la genotoxicidad combinando varios estudios