UNIVERSITÀ DI PISA

METODI IN SILICO ALTERNATIVI ALLA SPERIMENTAZIONE IN VIVO

GABRIELLA MARIA PIA ORTORE

Academic year	2022/23
Course	CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE
Code	343CC
Credits	3

Modules	Area	Type	Hours	Teacher(s)
METODI IN SILICO ALTERNATIVI ALLA SPERIMENTAZIONE IN VIVO	CHIM/08	LEZIONI	29	GABRIELLA MARIA PIA ORTORE

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze
Il corso si propone di fornire agli studenti una visione aggiornata delle sperimentazioni richieste per commercializzare le sostanze chimiche alla luce del regolamento europeo, in particolare dei casi in cui è possibile sostituire le sperimentazioni in vivo con metodi in silico. Obiettivo del corso è l'apprendimento delle metodiche di base per la predizione di dati sperimentali.

Modalità di verifica delle conoscenze
Per l'accertamento delle conoscenze saranno proposti test di valutazione.

Capacità
Lo studente dovrà essere capace di adeguare il metodo di predizione e l'uso dei software alle molecole in valutazione.

Modalità di verifica delle capacità
Per la verifica delle capacità saranno effettuati test in itinere.

Prerequisiti (conoscenze iniziali)
Conoscenze di chimica generale, chimica organica, fisica e biologia.
Propedeuticità: Chimica Organica I (obbligatoria).

Programma (contenuti dell'insegnamento)
Regola delle 3R. Metodi alternativi utilizzati in chimica tossicologica al fine di contenere l´uso degli animali nella sperimentazione in ottemperanza alla più recente normativa. REACH: Agenzia ECHA. Ambiti di applicazione. Chemicals Safety Assessment. Valutazione e autorizzazione delle sostanze chimiche. Cenni sugli endpoints richiesti per l'autorizzazione: bioconcentrazione, mutagenicità, cancerogenicità, tossicità dello sviluppo, irritazione e sensibilizzazione cutanea, tossicità acuta, da dose ripetuta e per la riproduzione. Predittività degli endpoints in silico.
OECD QSAR project. Fondamenti di QSAR/QSPR: selezione dei composti, descrittori, costruzione e validazione del modello. Metodi 2D o 3D. Altri metodi di predizione della tossicità: trend analysis, read across. Identificazione di caratteristiche strutturali rilevanti e meccanismi o modalità di azione potenziali di una sostanza chimica bersaglio. Identificazione di altre sostanze chimiche che hanno le stesse caratteristiche strutturali e/o meccanismi o modalità d'azione. Uso di dati sperimentali esistenti per predizione di dati ADMET.
Esercitazioni in laboratorio informatico
L'insegnamento prevede 15 ore di esercitazioni in laboratorio informatico con l'utilizzo di software per la predizione della tossicità ai fini REACH. Gli studenti eseguiranno direttamente alcuni studi su molecole di interesse chimico-farmaceutico-tossicologico, utilizzando programmi quali Volsurf, Metasite, QSAR-Toolbox, Toxtree e/o analoghi, distinguendo approcci 2D e 3D.

Bibliografia e materiale didattico
Durante il corso verranno fornite indicazioni per il reperimento (prevalentemente in Internet) di materiale didattico.

Modalità d'esame

L'esame è costituito da un report su un composto di interesse chimico-farmaceutico-tossicologico, corredato da risultati ottenuti con le attività svolte nel laboratorio informatico.

Ultimo aggiornamento 28/08/2022 11:10