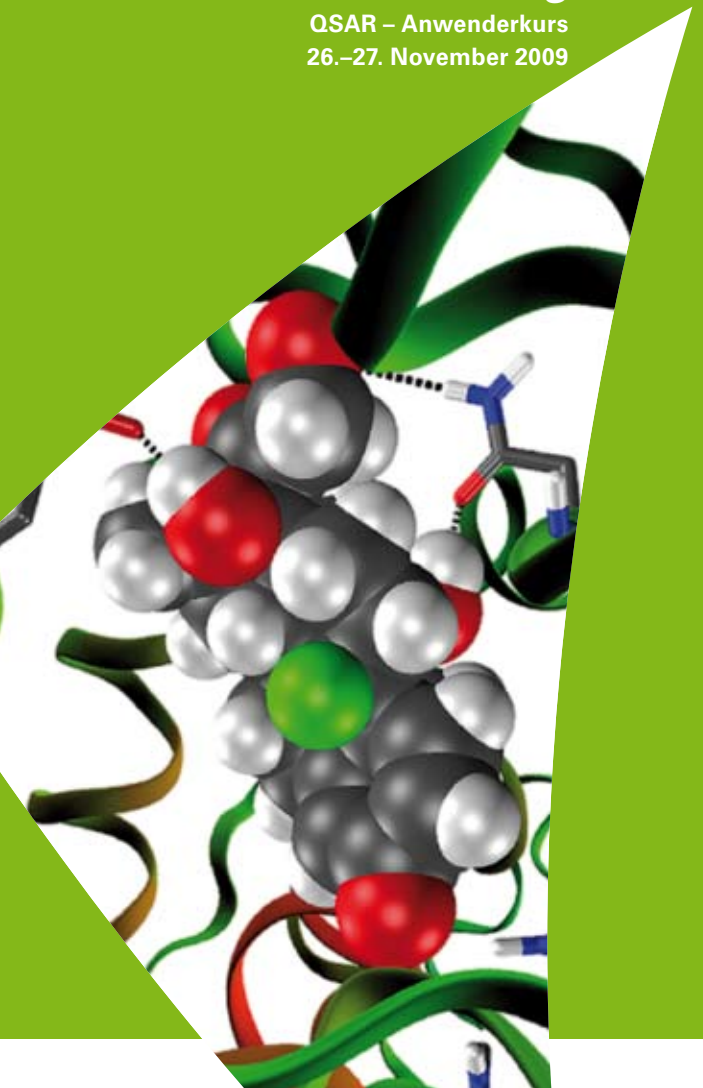




In silico Modelle für die Risikobewertung

QSAR – Anwenderkurs
26.–27. November 2009



Kursinhalt

In silico Methoden zur computergestützten Vorhersage von toxischen Effekten sind ein nützliches Werkzeug, um Lücken in vorhandenen Daten zur Toxizität von Chemikalien zu schliessen. Im ersten Teil des Kurses soll ein Überblick über den Einsatz von QSAR (Quantitative Structure Activity Relationship) Modellen in der Risikobewertung vermittelt und die Möglichkeiten und Grenzen der Methodik erläutert werden.

Drei ausgewählte Modelle werden anschliessend behandelt und von den Teilnehmern selbst auf eigene Beispiele angewendet. Dabei handelt es sich zum einen um das QSAR Toolbox Modell der OECD, eine frei verfügbare, umfangreiche Software-Anwendung, die zur Erstellung einer quantitativen Beziehung zwischen der pharmakologischen, chemischen, biologischen oder physikalischen Wirkung eines Moleküls mit seiner chemischen Struktur angewendet wird.

Die beiden weiteren Modelle sind als Ergänzung zum OECD Programm gedacht. ChemProp wurde im Rahmen des EU-Projektes OSIRIS entwickelt. Das Programm soll als EDV-Werkzeug zur Unterstützung der REACH-Bewertung von Chemikalien am Ende des OSIRIS Projektes für die Öffentlichkeit frei nutzbar sein. Virtual Tox Lab ist ein an der Universität Basel entwickeltes rezeptorbindungs-basiertes Modell.

Die Teilnehmer verfügen während des Kurses über eine temporäre Lizenz, und jeder Teilnehmer hat die Möglichkeit, ausgewählte Stoffe (z.B. zu einem aktuellen Problem) zu berechnen.

Programm:

Donnerstag, 26. November 2009

- 08.45 Ausgabe der Dokumentation
- 09.00 **Begrüssung**
Prof. Dr. Rik Eggen
- 09.15–10.30 ***In silico* Modelle für die Risikobewertung:
Möglichkeiten und Grenzen**
Prof. Dr. G. Schüürmann
- 10.30–10.45 Kaffeepause
- 10.45–12.30 **Einführung ChemProp**
Prof. Dr. G. Schüürmann
- 12.30–13.15 Mittagessen (Restaurant Aqa)
- 13.15–15.00 **Übungen ChemProp**
Prof. Dr. G. Schüürmann
- 15.00–15.15 Kaffeepause
- 15.15–17.00 **Einführung OECD QSAR Toolbox**
Dr. F. Stock

Programm:

Freitag, 27. November 2009

09.00–10.45 **Übungen OECD QSAR Toolbox**

Dr. F. Stock

10.45–11.00 Kaffeepause

11.00–12.00 **Einführung Virtual Tox Lab**

Prof. Dr. A. Vedani

12.00–13.00 Mittagessen

13.00–14.45 **Übungen Virtual Tox Lab**

Prof. Dr. A. Vedani

14.45–15.00 Kaffeepause

15.00–16.00 **Übungen Virtual Tox Lab**

Prof. Dr. A. Vedani

16.00–16.45 **Kurssynthese und Diskussionsrunde**

Zielpublikum

Der Kurs richtet sich an Fachleute aus Verwaltung, Vollzug, Industrie, Beratung und Wissenschaft, welche QSARs als ergänzende Modelle in einer Risikobewertung benutzen möchten. Die Teilnehmerzahl ist auf 12 begrenzt.

Die Kursteilnehmerinnen und Kursteilnehmer erhalten eine Teilnahmebestätigung.

Der Kurs und die Kursunterlagen sind auf Deutsch.

Teilnahmegebühr

CHF 600.– inkl. Kursunterlagen, Mittagessen, Pausenverpflegung und MWSt.

Anmeldeschluss

16. November 2009

info@oekotoxzentrum.ch

Kursort

Multimediarraum B15
Forum Chriesbach (FC)

Eawag
Überlandstrasse 133
8600 Dübendorf
(Wegbeschreibung auf Rückseite)

Referenten



Prof. Dr. Gerrit Schüürmann

Departmentleiter Ökologische Chemie am Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung in Leipzig, Professor für Theoretische und Ökologische Chemie an der TU Freiberg, Honorarprofessor für Chemische Ökotoxikologie an der Universität Leipzig, Gastprofessor der Dalian University of Technology, China

Studium der Chemie, Physik, Mathematik an der Universität Münster, Doktorat in Theoretischer Organischer Chemie an der Universität Münster, Habilitation in Ökologischer Chemie an der Universität Leipzig



Dr. rer. nat. Frauke Stock

Mitarbeiterin im Umweltbundesamt Deutschland, Fachbereich Chemikaliensicherheit, Fachgebiet Chemikalien
Studium der Biologie an der Universität Bremen, Doktorat in Bioorganischer Chemie an der Universität Bremen.



Prof. Dr. Angelo Vedani

Professor am Departement Pharmazeutische Wissenschaften an der Universität Basel, Präsident der Stiftung Biografiklabor 3R in Basel

Promotion in Chemie an der Universität Zürich, Postdoktorale Weiterbildungen an der Texas A&M University (USA) und an der ETH Zürich. Assistenz-Professor an der University of Kansas (USA). Habilitation in Chemie an der Universität Basel.

Das Oekotoxzentrum

Das Oekotoxzentrum erarbeitet Grundlagen und entwickelt Methoden, um Risiken von Chemikalien zu erkennen, zu beurteilen und zu minimieren. Es wurde im Jahre 2008 im Auftrag von Bundesrat und Parlament als unabhängige Institution im ETH-Bereich gegründet, um die Forschung, Beratung und Weiterbildung in angewandter Ökotoxikologie zu stärken und längerfristig sicherzustellen. Der Hauptsitz des Oekotoxzentrums ist an der Eawag, dem Wasserforschungs-Institut des ETH-Bereichs, in Dübendorf. Der zweite Standort mit Schwerpunkt terrestrische Ökotoxikologie befindet sich an der EPF in Lausanne.

Die Hauptaufgaben des Oekotoxzentrums sind:

- 1) angewandte Forschung mit Schwerpunkt auf der Entwicklung einer anwenderfreundlichen multi-metrischen Testplattform,
- 2) Weiterbildung von Fachleuten zu aktuellen und anwenderrelevanten Themen in der Ökotoxikologie,
- 3) Informationsdrehscheibe, mit Schwerpunkt auf Expertisen und Gremienarbeit.

Wegbeschreibung



Öffentliche Verkehrsmittel: Ab Zürich Hauptbahnhof mit der S-Bahn via Stadelhofen bis Stettbach (S3, S9, S12) oder Dübendorf (S14, S9), dann weiter zu Fuss (ca. 15 Minuten, siehe Plan) oder mit dem Bus Nr. 796 bis Haltestelle Dübendorf, Empa.

Ab Zürich-Flughafen mit dem Zug nach Zürich HB, dann mit der S-Bahn nach Stettbach oder mit dem Bus Nr. 759 bis Haltestelle Neugut Süd

Auto: Autobahn A1, Ausfahrt Wallisellen/Dübendorf, rechts weiter in Richtung Dübendorf, nach der grossen Kreuzung nach 300 Meter links ins Eawag-Empa-Gelände einbiegen.

Oekotoxzentrum, Eawag

Überlandstrasse 133, CH-8600 Dübendorf

T +41 (44) 823 55 62, F+41 (44) 823 58 63

info@oekotoxzentrum.ch, www.oekotoxzentrum.ch