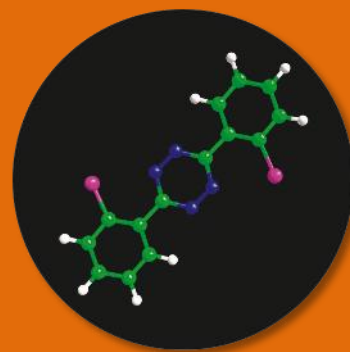


Prédire les propriétés des substances par méthodes QSAR/QSPR

Vers une utilisation réglementaire



DURÉE : 1 jour

PRIX : 690 € HT

SESSION

A – 12/09/17 – Paris
Paris

PUBLIC

Ingénieurs des services santé, sécurité, environnement de l'industrie chimique, ingénieurs en charge de REACH, consultants des bureaux d'études, chargés d'affaires réglementaires.

LE REPAS EST OFFERT

Objectifs

Comprendre les principes de base des méthodes fondées sur les relations structure-propriété pour l'(éco)toxicité et les propriétés physicochimiques. Juger de la pertinence des prédictions issues des méthodes QSAR*/QSPR* et « read-across » dans un contexte réglementaire (REACH). Connaître les sources d'information (base de données, logiciels) les plus pertinentes pour l'utilisation de ces méthodes.

Contenu

Rappels sur l'utilisation des méthodes prédictives QSAR/QSPR et « read-across » dans le contexte de REACH pour l'acquisition des données et la limitation d'essais sur animaux.

Le concept de similarité chimique dans les méthodes QSAR/QSPR : définition et implications en (éco)toxicologie et physicochimie prédictive.

Analyse des sources d'incertitudes liées à la dérivation et à l'application de ces méthodes :

- validation des approches QSAR/QSPR : les principes de l'OCDE et leur application pratique,
- stratégies à adopter lors de l'analyse critique d'outils QSAR/QSPR.

Présentation des documents officiels pour l'utilisation d'un modèle QSAR/QSPR dans le cadre de REACH.

Développer un « read-across » ou former une catégorie chimique.

Réalisation d'études de cas portant sur les principes généraux et les erreurs à éviter lors de l'utilisation d'un modèle QSAR/QSPR et « read-across ».

* QSAR : Quantitative Structure-Activity Relationships.

* QSPR : Quantitative Structure-Property Relationships.