

Realizzare un software in grado di predire la tossicità di un colorante. E' l'obiettivo dell'accordo siglato tra REACH&Colours Italia Srl di Milano e l'Università degli Studi di Milano-Bicocca. Grazie ad una serie di algoritmi, il software, unico nel suo genere, sarà in grado di modellare le relazioni quantitative tra la struttura molecolare dei coloranti organici e le proprietà degli stessi (QSAR).

---

In pratica, il modello che metteranno a punto i ricercatori del Dipartimento di Scienze Ambiente e Territorio e Scienze della Terra dell'Università di Milano-Bicocca, guidati dal professore Roberto Todeschini, docente di Chemiometria, sarà in grado di predire la tossicità dei coloranti, riducendo notevolmente i costi della ricerca per le aziende.

Attualmente non esistono software in grado di modellare sostanze complesse e ioniche come i coloranti organici. Grazie ai dati sperimentali estratti dal database della REACH&Colours Italia Srl, i ricercatori del Milano Chemometrics and QSAR Research Group dell'Università di Milano-Bicocca, costituito nel 1991 dal professor Todeschini e composto da Viviana Consonni, Davide Ballabio e Andrea Mauri, si stanno quindi preparando a sviluppare un nuovo software QSAR dedicato alla valutazione delle proprietà dei coloranti, in grado di individuare le sostanze potenzialmente pericolose per la salute e per l'ambiente.

«L'idea – spiega il professor Todeschini – è di sviluppare una tecnica innovativa che permetta di ottenere risultati affidabili per i coloranti organici, basandosi su similarità strutturali valutate attraverso nuove descrizioni della struttura molecolare e modelli di classificazione».

REACH&Colours Italia, in stretta collaborazione con la società di consulenza REACH Mastery Srl di Como, è oggi il manager tecnico ed amministrativo dei tre Consorzi Europei REACH Coloranti, i cui membri sono le principali multinazionali del settore, proprietarie di numerosi studi tossicologici ed eco-tossicologici su tali sostanze.

«Grazie agli studi esistenti – dice Michela Kahlberg, amministratore unico di REACH&Colours Italia - e a quelli nuovi che i membri dei tre consorzi stanno svolgendo per le registrazioni REACH di oltre 600 coloranti da ultimare entro maggio 2018, per la prima volta nella storia, è stato possibile costruire un database di informazioni completo e strutturato, in continua evoluzione e implementazione. Il database è il punto di partenza per lo sviluppo del software che, mediante metodologie statistiche e chemiometriche, ha l'obiettivo di stimare gli effetti sull'uomo e sull'ambiente di sostanze simili a quelle già analizzate e presenti nel database».