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».