È made in Varese un software che permette di identificare precocemente la pericolosità dei composti chimici: si tratta di “QSARINS” (QSAR-INSubria), software realizzato e testato nel corso dell’ultimo decennio dal gruppo di ricerca diretto da Paola Gramatica, ordinario di Chimica dell’Ambiente dell’Università degli Studi dell’Insubria: l’Unità di Ricerca QSAR in Chimica Ambientale ed Ecotossicologia (http:// www.qsar.it).

Messo a disposizione della comunità internazionale QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships) da circa due anni, il software QSARINS sta riscuotendo un grande successo: sono quasi 300 i ricercatori che lo hanno richiesto da quando è stato reso disponibile nel giugno 2014 e, dopo selezione delle richieste da parte di Gramatica, sono 220 le licenze gratuite concesse e già utilizzate da molti autorevoli gruppi QSAR in vari paesi del mondo. Le pubblicazioni già a stampa, che citano l’utilizzo di QSARINS, sono ora oltre una cinquantina, ed altre sono in corso di stampa.

In questo software, che permette di sviluppare e validare modelli QSAR predittivi per proprietà chimico-fisiche (rilevanti per la distribuzione nell’ambiente) ed attività biologiche (come ad esempio la tossicità) di composti chimici dalla sola struttura molecolare, quindi ancor prima della sintesi, sono state implementate tutte le idee ed esperienze della professoressa Gramatica per la realizzazione di validi modelli QSAR, proposte e descritte negli oltre 115 lavori pubblicati con affiliazione Insubria (che da sole sono citate quasi 6000 volte nella letteratura internazionale) nei suoi 20 anni di ricerca a Varese. In particolare, due pubblicazioni sono considerate un riferimento importante per la validazione dei modelli QSAR: “The Importance of Being Earnest” (con circa 1200 citazioni) e “Principles of QSAR Models Validation” (circa 700 citazioni). Significativo è stato anche il contributo di Gramatica, come membro selezionato della Task Force internazionale QSAR dell’OECD (Organizzazione per la Cooperazione e lo Sviluppo Economico: OCSE), e delle sue idee sulla validazione, per la proposta ed accettazione dei 5 Principi OECD per la validazione dei modelli QSAR a scopo di regolamentazione delle sostanze chimiche per la nuova normativa europea REACH (Registration Evaluation Authorization and restriction of Chemicals).

Nel modulo QSARINS-Chem di QSARINS è disponibile l’intero database delle migliaia di composti chimici studiati dal gruppo QSAR in Insubria, comprendente le strutture molecolari in conformazione tridimensionale, i dati sperimentali disponibili e modellati dal gruppo, oltre a numerosi modelli QSAR, sviluppati dal gruppo stesso. Questi modelli potranno essere applicati a composti già esistenti, ma per i quali non esistono dati sperimentali, per predire i dati mancanti, o addirittura a composti non ancora sintetizzati per prevedere a priori la loro potenziale pericolosità. Ogni modello è corredato dal rispettivo QMRF (QSAR Model Reporting Format), che viene richiesto dalla normativa REACH quando vengono utilizzati, per la registrazione dei composti chimici, dati che vengono predetti da modelli QSAR, i quali devono essere opportunamente documentati.

«Uno degli scopi della modellistica QSAR è quello di colmare l’enorme lacuna di informazioni che riguarda i composti chimici in uso, lacuna che porta a spiacevoli “scoperte” di pericolosità di moltissimi composti troppo tardi, quando già gli effetti dannosi si sono manifestati nell’ambiente e sull’uomo.

Inoltre, ogni approccio predittivo a priori permette di “prevenire, anziché curare” e, in particolare, il QSAR, che sfrutta la sola informazione della struttura molecolare, può essere applicato nella progettazione di molecole chimiche più sicure (“benign by design” approach for safer chemicals) nella Green/Sustainable Chemistry» sottolinea la professoressa Gramatica.

La professoressa Gramatica è stata invitata al prossimo convegno internazionale Euro-QSAR, che si terrà a Verona in Settembre, a presentare una plenary lecture e in quella occasione, avvicinandosi il suo pensionamento, traccerà una storia delle sue ricerche in Insubria, che culminano con la diffusione del software QSARINS, come suo lascito insubre alla comunità QSAR nel mondo. Infatti, grazie a QSARINS, il QSAR insubre non sparirà dal panorama internazionale e potrà proseguire con le ricerche di tanti gruppi in vari Paesi, oltre che con quelle dell’Unità di Ricerca insubre, che saranno auspicabilmente portate avanti dall’ attuale ricercatrice Ester Papa.