## **VareseNews**

## Riconoscimento di prestigio per una ricerca dell'Insubria in campo chimico

Pubblicato: Venerdì 23 Settembre 2016



Un riconoscimento di prestigio è stato riservato a un articolo della professoressa Paola Gramatica, ordinario di Chimica dell'Ambiente dell'Università degli Studi dell'Insubria e direttore dell'Unità di Ricerca QSAR in Chimica Ambientale ed Ecotossicologia (http://www.qsar.it). L'autorevole rivista scientifica internazionale *Green Chemistry* della inglese *Royal Society of Chemistry* ha infatti dedicato la copertina del numero di agosto 2016 a una ricerca della docente, realizzata con i suoi collaboratori Stefano Cassani e Alessandro Sangion.

Si è trattato di un numero speciale della rivista dedicato al tema: "Molecular Design for Reduced Toxicity", ideato e organizzato dal padre dei 12 principi fondamentali della Green Chemistry: il professor Paul Anastas della Yale University di Washington (USA).

Negli ultimi anni i chimici sono impegnati nel rendere sostenibili e non dannosi per la salute dell'uomo e dell'ambiente sia i prodotti chimici di nuova concezione sia i processi che portano alla loro produzione: questo ramo della Chimica viene chiamato "Green Chemistry". Paul Anastas ha stilato 12 Principi della Green Chemistry che riassumono le azioni che è necessario intraprendere per sintetizzare prodotti chimici più sicuri con metodologie sempre più sostenibili. Tra questi 2 principi (il 4° ed il 10°) richiedono che siano progettati, già prima di sintetizzarli, prodotti che non siano tossici e non siano persistenti nell'ambiente.

«Proprio il professor Anastas ha personalmente scelto il nostro paper– dal titolo: "Aquatic Ecotoxicity of Personal Care Products: QSAR models and ranking for prioritization and safer alternatives' design" -come significativo per la copertina di questo numero, accomunandoci ad un altro "mostro sacro" della Green Chemistry mondiale, il professor Klaus Kummerer, editor in chief di varie riviste del settore, tra cui: "Sustainable Chemistry and Pharmacy", nel cui Editorial Board sono stata anche io invitata» racconta la professoressa Gramatica.

«Il nostro lavoro, scelto per questa cover, riguarda una ricerca sulla tossicità di circa 500 composti chimici, utilizzati nei prodotti per l'igiene personale, nei riguardi di organismi acquatici che vengono utilizzati come test di regolamentazione: alghe, Dafnie e pesci. I dati sperimentali disponibili sono pochi e su questi sono stati sviluppati modelli QSAR (Relazioni Quantitative Struttura-Attività) che, opportunamente validati, hanno permesso di predire la tossicità di tutti i 500 composti, anche se privi di dato sperimentale. I modelli sono stati sviluppati con il software QSARINS, sviluppato dal nostro gruppo di ricerca QSAR e saranno disponibili per predire la tossicità di altre molecole. Si sono così evidenziati i composti attualmente più pericolosi per l'ambiente acquatico, in particolare questi sono benzotriazoli, utilizzati come filtri delle radiazioni ultraviolette (UV) nelle creme solari (ma anche come deghiaccianti sulle ali degli aerei...)».

La professoressa Gramatica è interessata, da tempo, alla Green Chemistry con la sua modellistica QSAR, che permette di prevedere la pericolosità delle sostanze dalla sola struttura molecolare, quindi anche prima di sintetizzarle, aiutando quindi nella progettazione di nuove molecole più sicure (in quello che viene chiamato l'approccio "benign by design"). Per questa attività la docente è nel Direttivo

del Gruppo Interdivisionale Green Chemistry-Chimica Sostenibile della Società Chimica Italiana e, tra le altre, nell' Editorial Board della nuova rivista della Elsevier: Sustainable Chemistry and Pharmacy.

Redazione VareseNews redazione@varesenews.it