



# REACH&Colours

Società Unipersonale

REACH&Colours Italia Srl – Via Locatelli, 6 – 20124 Milan – Italy

Phone +39026700319 – Fax +390267386811

Capitale Sociale € 10.000 i.v. / C.C.I.A.A. Milano N.REA 1868147 / P.IVA e C.F. 06053570963

Milano, 24/11/2014

## NUOVO COMUNICATO STAMPA - QSAR COLORANTI -

REACH&Colours Italia e Milano Chemometrics - QSAR Research Group (Università degli Studi di Milano-Bicocca) hanno avviato una collaborazione scientifica (<http://michem.disat.unimib.it/chm/projects/projects.htm>) allo scopo di sviluppare un nuovo software per la predizione *in-silico* di specifiche proprietà tossicologiche e ambientali di coloranti sulla base dell'approccio Relazione Quantitativa Struttura-Attività (QSAR).

Il primo passo per lo sviluppo del software è stato quello di raccogliere circa 4.000 studi sulle proprietà dei coloranti forniti dai principali produttori di queste sostanze, facenti parte di tre grandi consorzi europei REACH.

La prima analisi statistica ha riguardato tre proprietà sperimentali (*endpoints*), nello specifico, il test *in-vitro* delle mutazioni geniche nei batteri (test di Ames), la sensibilizzazione cutanea e la tossicità acuta per i pesci. I modelli QSAR sono stati costruiti mediante l'analisi della similarità strutturale con l'aggiunta di controlli specifici (*alerts*) per correggere i falsi positivi o falsi negativi. I risultati dei modelli consistono nelle stime delle specifiche proprietà di una sostanza di interesse (*target*) con l'indicazione del grado di affidabilità della previsione valutata in base al numero delle sostanze simili e al loro grado di similarità con il target.

I modelli sono stati sviluppati e validati secondo i principi dell'OECD e i requisiti REACH per il QSAR; hanno prestazioni particolarmente soddisfacenti sia in termini di specificità che di sensibilità (85% per il test di Ames, 91% per la sensibilizzazione della pelle e il 79% per la tossicità del pesce) e comunque superiori a quelle dei modelli QSAR già esistenti per le stesse proprietà. In particolare, i modelli proposti sono in grado di ampliare il dominio di applicabilità a strutture disconnesse che tipicamente caratterizzano i coloranti, superando le limitazioni dei modelli QSAR esistenti, che non possono predire le proprietà della maggior parte dei coloranti, essendo stati sviluppati su tipologie di molecole completamente diverse.



REACH&Colours Italia ha presentato il progetto al 9° Congresso mondiale sui metodi alternativi all'uso degli animali nelle scienze della vita ed è stato contattato da ECVAM (Centro europeo per la convalida dei metodi alternativi, JRC, Ispra) e ECOPA (Piattaforma europea per il Consenso sui metodi alternativi) per una possibile collaborazione.

<<Si tratta di un progetto unico e rivoluzionario – dice la d.ssa Michela Kahlberg, amministratore unico di REACH&Colours Italia e manager dei tre Consorzi Europei REACH dei coloranti tessili, carta e cuoio – interamente finanziato dall'industria privata e dall'Università Bicocca, in cui crediamo molto e che permetterà finalmente di comprendere meglio sostanze chimiche importanti ed estremamente diffuse come i coloranti organici, tutelando la salute dell'uomo, salvaguardando l'ambiente ed evitando inutili test sugli animali.>>