

Test in Silico: Nuova frontiera

L. Montironi

Nell'ultimo ventennio lo scenario legislativo in Europa ha portato all'esigenza di sviluppare metodi alternativi alla sperimentazione animale in tutti i campi laddove erano richiesti test di tossicità.

Inevitabilmente ciò ha investito anche il campo della cosmetica in quanto, in un profilo di valutazione di sicurezza dei cosmetici, i test di tossicità rappresentano uno step fondamentale. In questo settore, lo studio di tecniche alternative è stato sollecitato in particolar modo in seguito ad un divieto di sperimentazione sugli animali sancito nel 2003 dal VII Emendamento alla Direttiva base 76/768/CEE sui prodotti cosmetici. Tale modifica ha introdotto nuove disposizioni ed ha portato nel 2004 ad un divieto di realizzazione, sul territorio dell'UE, di sperimentazioni animali relative a prodotti cosmetici finiti e nel 2009 anche ai singoli ingredienti. Tale divieto è stato rafforzato da un divieto di commercializzazione di prodotti cosmetici testati sugli animali, o contenenti ingredienti che erano stati oggetto di una sperimentazione animale, attuato definitivamente, per tutte le aree tossicologiche, a partire dall' 11 Marzo 2013.

In questo contesto si è dunque cercato di sviluppare e ottimizzare risorse alternative che prevedessero approcci non animali. Di notevole utilità si sono dimostrati i test delle culture cellulari *in vitro*, ma la risorsa del futuro nella sperimentazione delle sostanze cosmetiche sembra essere l' approccio computazionale, ovvero i metodi *in silico*, soprattutto per le aree tossicologiche più complesse, quali la tossicità sistemica, la sensibilizzazione cutanea e la carcinogenicità. Questi modelli virtuali sono strumenti innovativi, basati sui risultati esistenti delle prove di laboratorio (test *in vivo* e *in vitro*), che hanno definito i criteri e i modi con cui una sostanza potrebbe essere pericolosa nell'organismo e nell'ambiente. Tra i modelli *in silico* molto importante è il contributo dei concetti QSAR nell'identificazione e codifica dei meccanismi d' azione e nello sviluppo di strategie alternative. I modelli QSAR sono modelli matematici che correlano le proprietà fisiche e strutturali di una sostanza chimica ai suoi effetti biologici sulla salute umana. La disponibilità di implementazioni QSAR, facili da utilizzare gratuitamente, come ad esempio il sistema aperto Toxtree, consente ad ogni scienziato di applicare facilmente le relazioni struttura attività alle sostanze chimiche di interesse.

