

# Strategie per valutare potenziali sostituti delle sostanze perfluoroalchiliche

Gianluca Selvestrel  
Head of Unit

Istituto di Ricerche Farmacologiche  
Mario Negri IRCCS, Milano, Italy



ISTITUTO DI RICERCHE  
FARMACOLOGICHE  
MARIO NEGRI · IRCCS

# A paradigm-shift: è arrivata l'era del Green Deal!

Una nuova visione, globale, orientata al futuro

Sostituzione

SSbD

LCA

Effetti  
benefici

Sfida  
globale

One Health

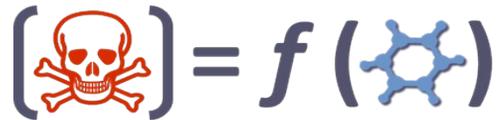
**Is a Seismic Shift in the Landscape of PFAS Uses Occurring?**

Martin Schering,\* Ian T. Cousins, and Greta Goldenman

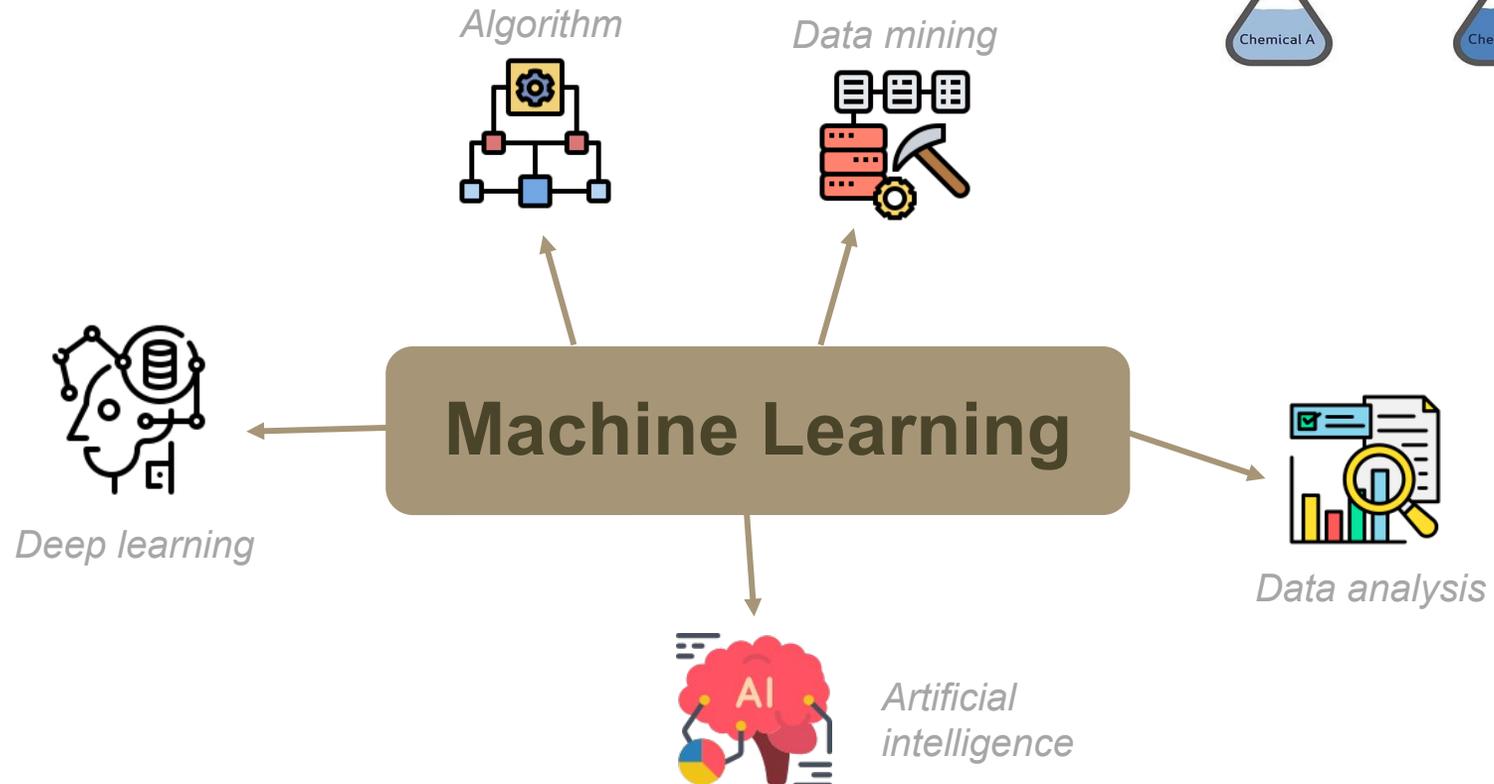
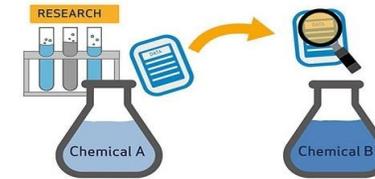
<https://doi.org/10.1021/acs.est.4c01947?urlappend=%3Fref%3DPDF&jav=VoR&rel=cite-as>

# Le metodiche offerte

QSAR

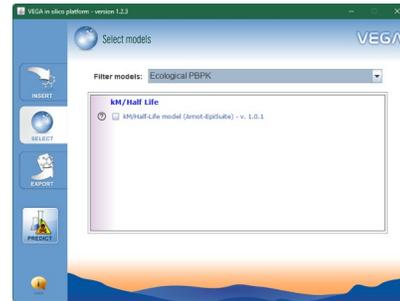


Read-across

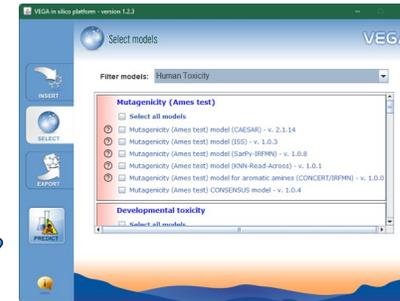


# QSAR - VEGA

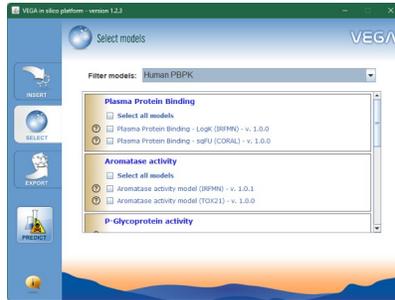
Ecological PBPK



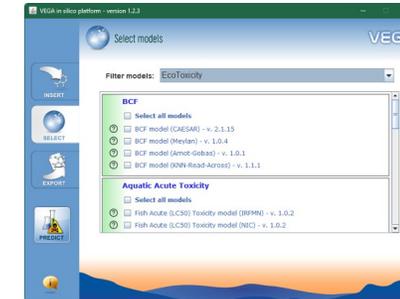
Human toxicity



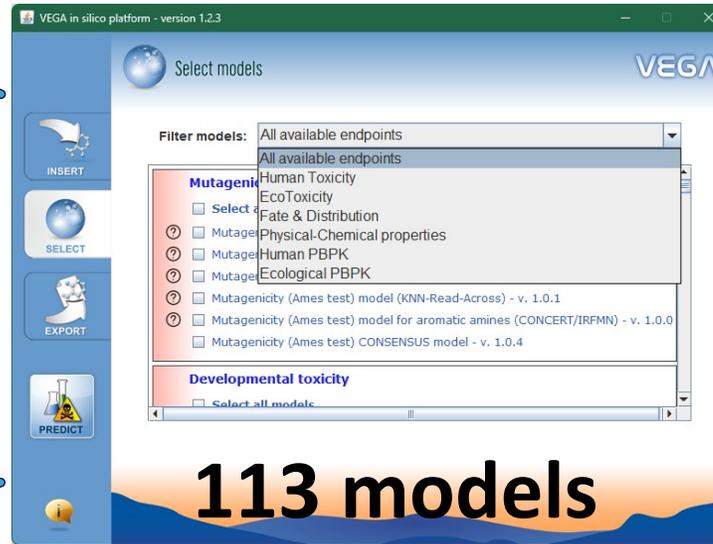
Human PBPK



Eco-toxicity



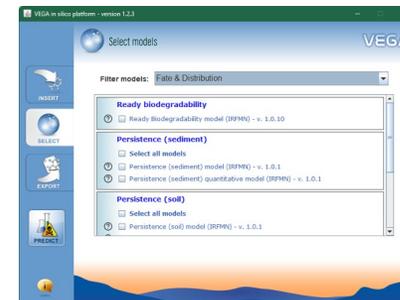
113 models



Physico-chemical prop

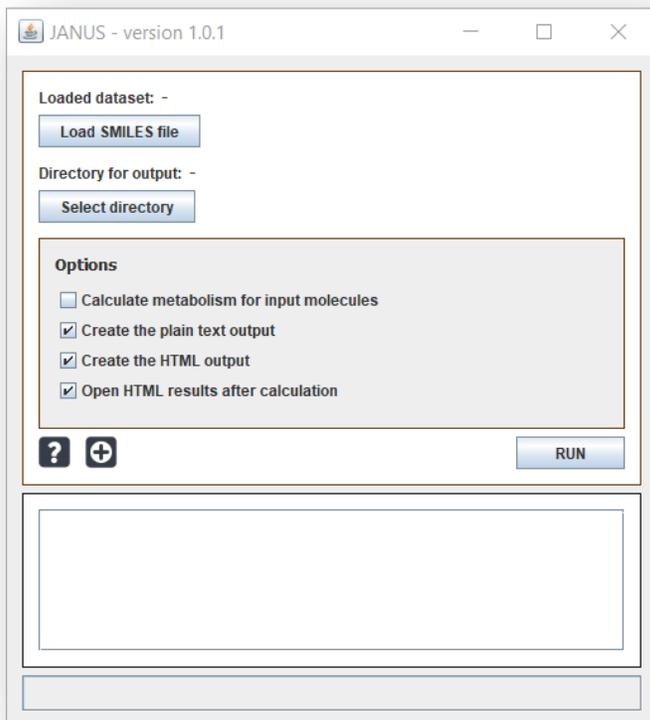


Environmental prop





# QSAR - JANUS



Limiti CE- REACH

**P** Persistence

**B** Bioaccumulation

***aquaT*** Aquatic Toxicity

**C** Carcinogenicity

**M** Mutagenicity

**R** Reprotoxicity

**ED** Endocrine disruptors

## The final scores

vPvB P and B

SVHC CMR, ED

PBT PBT, CMR, ED

# JANUS – applicazione pratica per i PFAS

## JANUS



HOME MINISTRO MINISTERO TEMI MEDIA AMMINISTRAZIONE TRASPARENTE PNRR

- Studio finalizzato all'individuazione di potenziali sostituti delle sostanze perfluoroalchiliche (PFAS) a catena lunga di minore impatto ambientale e sanitario

**Presentazione:** le sostanze perfluoroalchiliche (PFAS) più studiate e utilizzate nei differenti comparti industriali sono l'acido perfluorottanoico e l'acido perfluorottansolfonico e i loro rispettivi sali. Le sostanze PFAS a catena lunga sono quelle che destano maggiori preoccupazioni sotto il profilo ambientale e sanitario, a causa della loro persistenza nell'ambiente, spesso associata a un'elevata capacità di bioaccumulo e tossicità.

Lo studio effettuato dall'Istituto di Ricerche Farmacologiche "Mario Negri" ha avuto come obiettivo principale l'individuazione di potenziali sostituti delle sostanze perfluoroalchiliche (PFAS) con sostanze di minore impatto ambientale e sanitario mediante l'analisi dei dati presenti nella letteratura scientifica e l'applicazione di modelli predittivi *in silico*.

• Utilizzato per la selezione di alternative "unlikely to be persistent organic pollutants"

• Analisi delle proprietà **PBT** (Persistente, Bioaccumulabile, Tossico), **CMR** (Cancerogenicità, Mutagenicità, Tossicità per la Riproduzione), **ED** (interferenti endocrini)

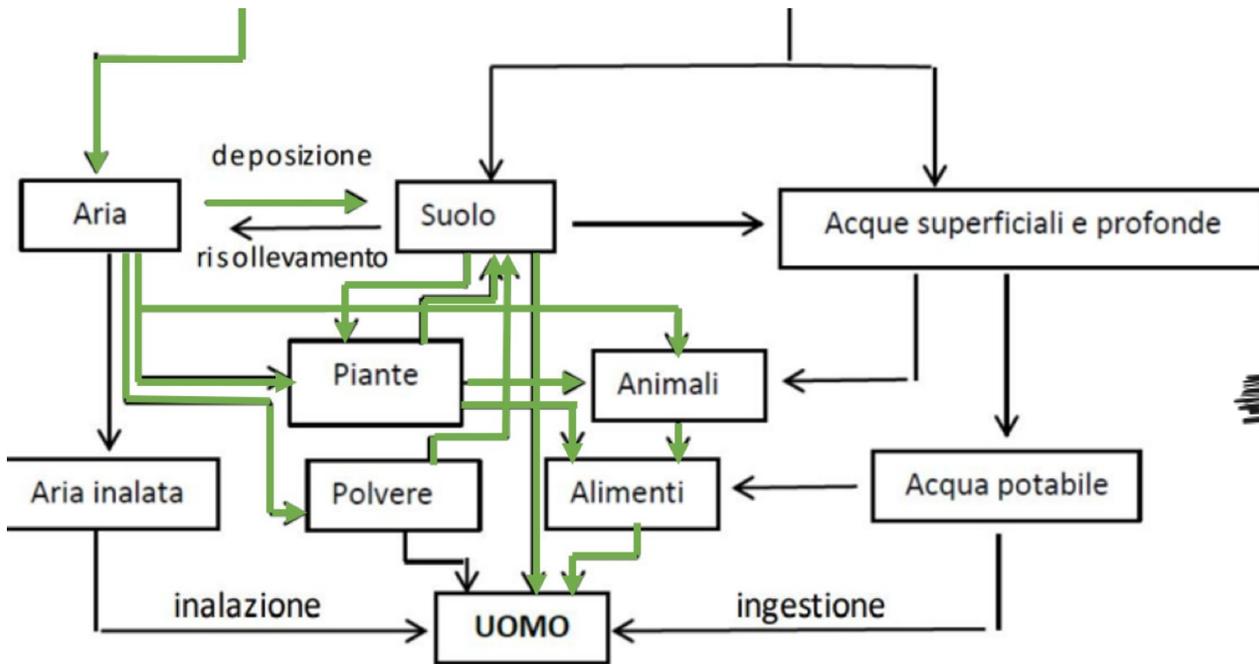
• Fornisce un **indice di affidabilità (0-1)** per le predizioni



Le alternative ai PFAS includono sia **composti fluorurati a catena più corta**, sia **opzioni non fluorurate**. Il software JANUS ha permesso una **valutazione preliminare** delle sostanze in base ai loro **rischi ambientali e sanitari**

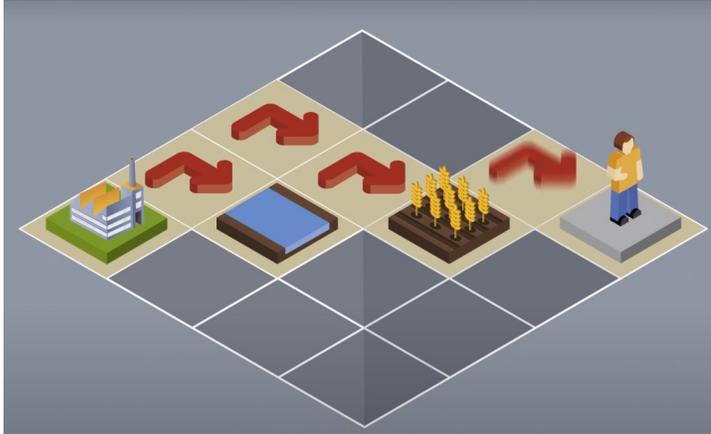
# Esposizione e destino ambientale

## MERLIN-Expo



# Valutazione Integrata di Impatto Ambientale e Sanitario



Multimedia modelling



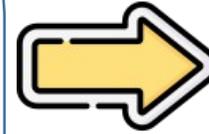
Modelli in silico



Analisi chimiche



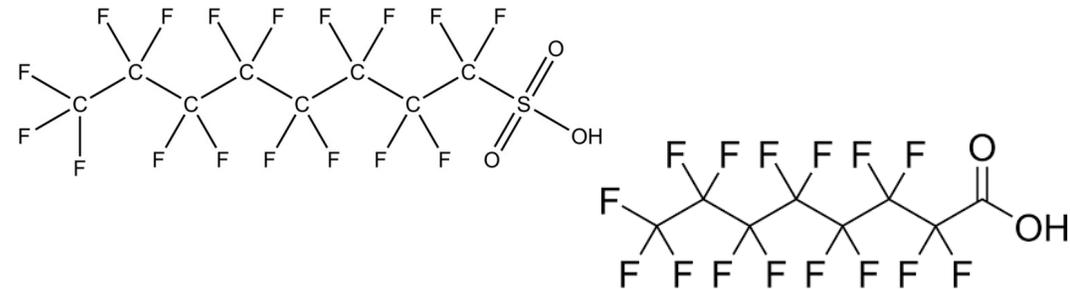
Test in vitro



VALUTAZIONE INTEGRATA DI  
IMPATTO SANITARIO ED  
AMBIENTALE  
(VIIAS)



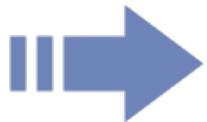
Indice di Rischio - ISS



ToxEraser identifica molecole o componenti molecolari associati ad un effetto avverso e suggerisce composti alternativi più sicuri, offrendo soluzioni innovative per il processo di **sostituzione**.



L'obiettivo è quello di **ridurre il numero di sostanze dannose**, favorendo la prevenzione della salute umana.



ToxEraser è linea con il nuovo paradigma del **Safe and Sustainable by Design (SSbD)**

# SSbD – il progetto PARC e l'SSbD Toolbox

- *E' un progetto a supporto della **EU's Chemical Strategy for Sustainability (CSS)** e del **Green Deal**, con l'obiettivo di **ridurre significativamente le sostanze dannose per l'uomo e per l'ambiente**, in un approccio **ONE HEALTH**.*
- *Durata di **7 anni**, prevede oltre **200 partners** in tutta Europa e ha un budget di **400 milioni di euro**.*
- *Sviluppo del **SSbD Toolbox**:*
  - *integrazione di tools per affrontare le diverse fasi del framework SSbD*
  - *strumento per sostenere Green Deal e CSS*
  - ***sicurezza** dei composti chimici durante **l'intero ciclo di vita**, **sostenibilità** ambientale e socio-economica*
  - *pensato per supportare il mondo accademico, i regolatori e l'industria nella realizzazione di un prodotto sicuro e sostenibile*

The P.A.R.C SSbD Toolbox is a structured collection of tools to support designers, developers, risk assessors of chemicals and materials from industry, academia and governments in addressing questions about functionality, chemical safety and environmental sustainability. In addition the toolbox will in time cover socio-economic aspects to support the exploratory work on a potential 5th step of the framework.

The goals of the toolbox are to provide:

- a structured inventory and overview of tools suited for SSbD assessment and (re-)design;
- structured workflows for applying the tools to answer SSbD assessment and (re-)design questions;
- an evaluation and decision support approach to support interpretation and follow up (re-)design actions;
- a clear connection with the commercial developmental stages of a chemical or material;
- incorporating the foreseen production, use conditions and end-of-life of the chemical, material or product.

## Latest Announcement

We are pleased to announce that the SSbD toolbox will soon be entering its initial testing phase. If you wish to participate, please use the button below.

PARC SSbD Toolbox v0.1 will be initially accessible only to 25 selected stakeholders, so as to receive feedback on testing its functionality and stability and providing feedback in the specific form. The reason for limiting the number of users is to ensure the stability of the platform, while being used concurrently by a large, but limited number of users. Access to additional users will be provided in batches of 25 as the testing phase progresses.

[Apply for an account](#)



Contact Support



Register / Login



Submit Feedback



Guidebook



Release Note

Safety

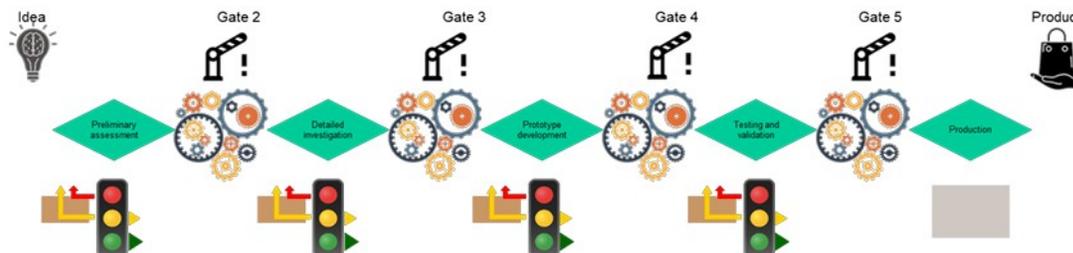
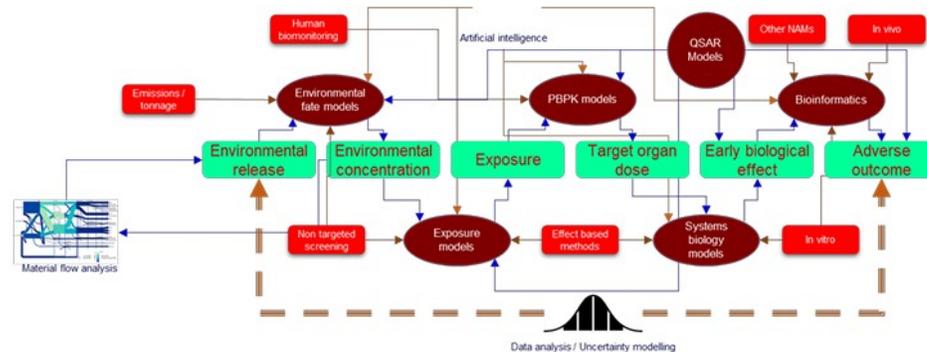


Databases



Queries

SSbD framework



50 software

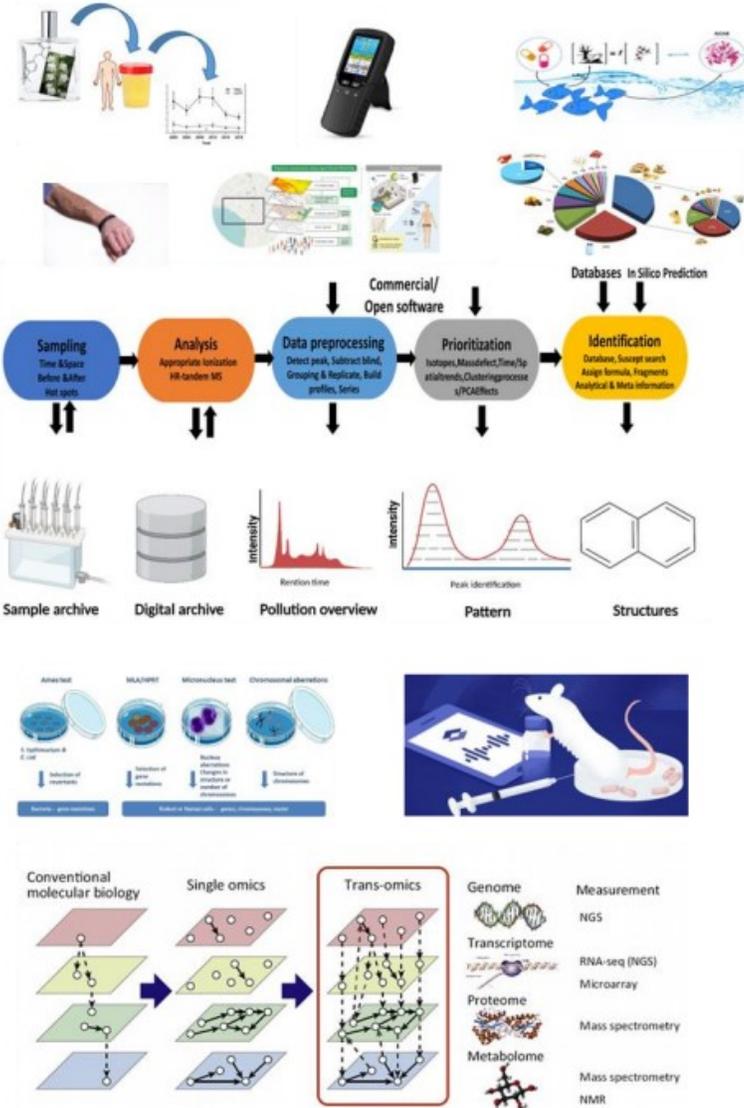


38 database



# Early Warning Systems

## Sources of information



## Organisation of data



**Analisi PFAS**  
(es: monitoraggio SPM e fish in Germania)

# Conclusioni

- Problema complesso
- Criticità ambientale con processo a cascata
- Paradigma SSbD – sostituzione progressive
- Contributo di tutti è l'unica soluzione
- Insieme per raggiungere target sempre più alti e un future migliore



Grazie per l'attenzione

