

PROF.SSA VERUSCKA LESO

Università degli Studi di Napoli Federico II



Applicazione di strumenti di intelligenza artificiale per l'implementazione del quadro Europeo di sicurezza e sostenibilità sin dalla progettazione di sostanze chimiche e materiali

Prof.ssa Veruscka Leso

Dipartimento di Sanità Pubblica

Università degli Studi di Napoli Federico II



Sicurezza e sostenibilità fin dalla progettazione

“**Sicurezza e sostenibilità sin dalla progettazione**” (SSbD) si riferiscono a un approccio alle sostanze chimiche pre-commercializzazione, che si concentra sulla fornitura di una funzione (o di un servizio) evitando contemporaneamente i volumi e le proprietà chimiche che potrebbero essere nocive per la salute umana o per l'ambiente, in particolare per i gruppi di sostanze chimiche potenzialmente (eco)tossiche, persistenti, bioaccumulabili o mobili.

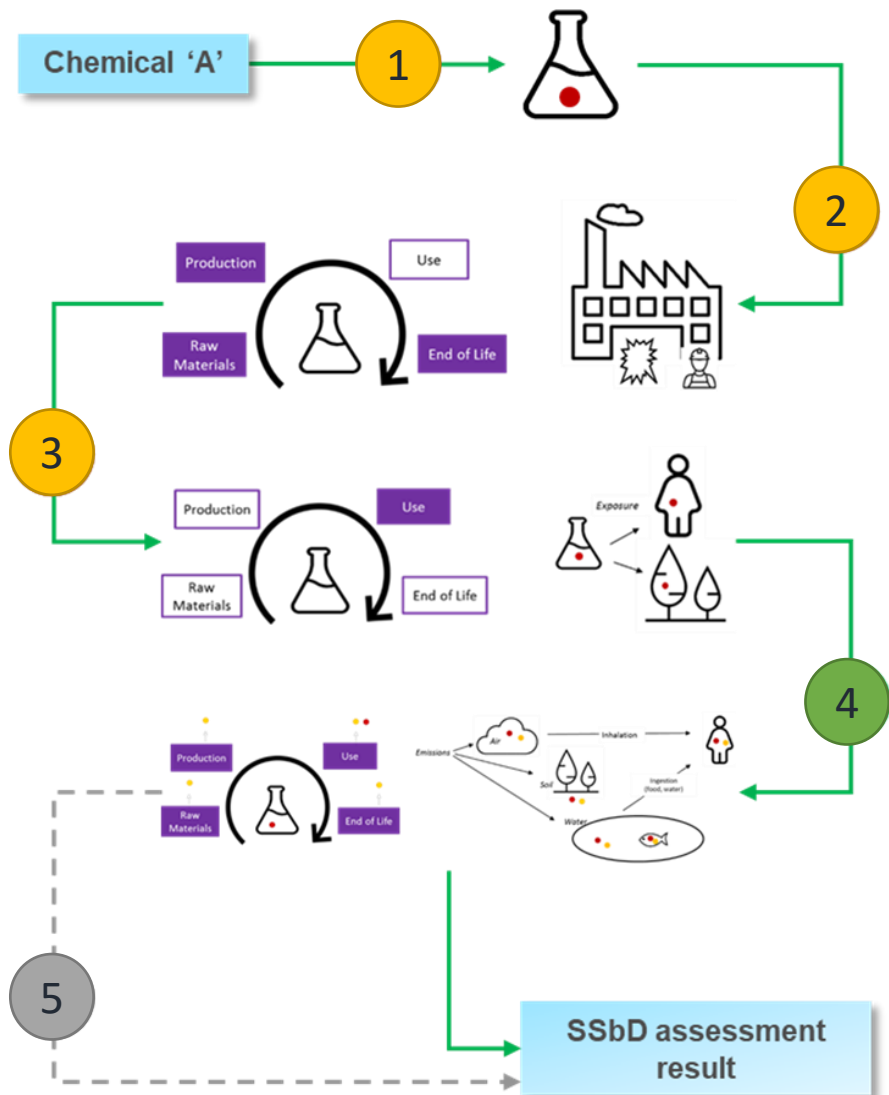
La Commissione Europea, nel 2022, ha proposto il **Quadro per la futura definizione di criteri di sicurezza e sostenibilità sin dalla progettazione e per la procedura di valutazione di sostanze chimiche e materiali** che può essere applicato allo sviluppo di sostanze chimiche e materiali nuovi o a una nuova valutazione di quelli esistenti.

Il quadro SSbD comprende le due componenti seguenti:

1. lo **stadio di (ri)progettazione** in cui sono proposti i principi guida per sostenere la progettazione sicura e sostenibile di sostanze chimiche e materiali;
2. Lo **stadio di valutazione della sicurezza e della sostenibilità** in cui sono valutate la sicurezza e la sostenibilità delle sostanze chimiche o dei materiali in questione.



Sicurezza e sostenibilità delle sostanze chimiche



Passaggio 1: Valutazione dei pericoli (proprietà intrinseche)

Passaggio 2: Aspetti della produzione e lavorazione legati alla salute umana e alla sicurezza

Passaggio 3: Aspetti dell'applicazione finale connessi alla salute umana e all'ambiente

Passaggio 4: Valutazione della sostenibilità ambientale (approccio che consideri tutto il ciclo vitale)

Passaggio 5: Valutazione sociale ed economica

Nel caso di sostanze chimiche e materiali esistenti, il quadro può essere usato:

1. per sostenere la **riprogettazione dei loro processi di produzione** così da renderli più sicuri e più sostenibili valutando processi alternativi, o
2. per **confrontarli usando i criteri SSbD** (ad esempio per l'innovazione tramite la sostituzione con sostanze chimiche e materiali dalle prestazioni migliori).



Il toolbox sviluppato nell'ambito del progetto PARC

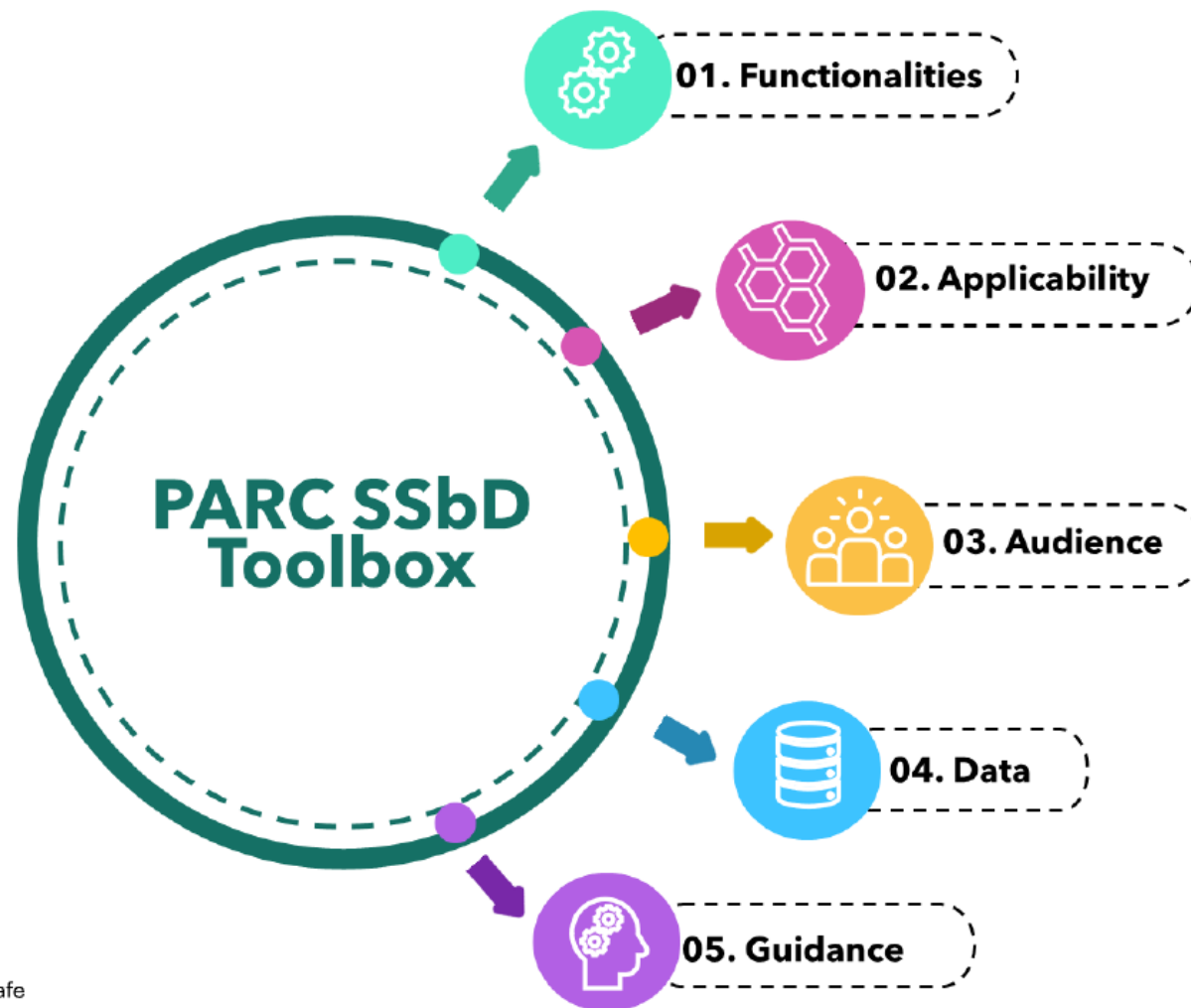


Partnership for the Assessment of Risks from Chemicals (2022 - 2029) aims to develop next-generation chemical risk assessment to protect human health and the environment.

It supports the European Union's Chemicals Strategy for Sustainability and the European Green Deal's "Zero pollution" ambition with new data, knowledge, methods and tools, expertise and networks.



Safe
&
Sustainable
by
Design



Il caso-studio: bisfenolo A e sostanze chimiche alternative

Obiettivo

Scenario 1- Sostituire il bisfenolo A in bottiglie riutilizzabili in polycarbonato



Scenario 2- Sostituire il bisfenolo A in vernici a base di resine epossidiche

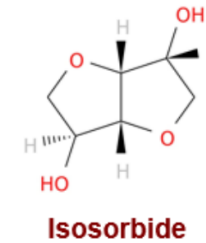
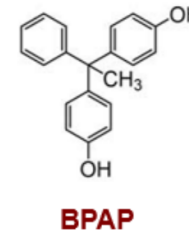
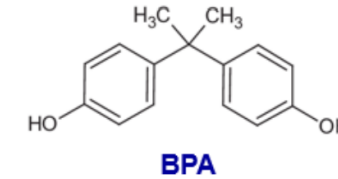


Figure 3: Structure of the substances used in the case studies.

Table 2: General Information of the substances used in the case studies.

Name	Acronym	EC	CAS	ECHA dossier	SMILES	Mol. weight
4,4'-isopropylidenediphenol	BPA	201-245-8	80-05-7	https://echa.europa.eu/el/registration-dossier/-/registered-dossier/15752	CC(C)(C1=CC=C(O)C=C1)C1=CC=C(O)C=C1	228.28 (g/mol)
1,1-bis(4-hydroxyphenyl)-1-phenylethane	BPAP	433-130-5	1571-75-1	https://echa.europa.eu/el/registration-dossier/-/registered-dossier/9115/1/1	CC(C1=CC=CC=C1)(C1=CC=C(O)C=C1)C1=CC=C(O)C=C1	290.36 (g/mol)
1,4:3,6-dianhydro-D-glucitol	Isosorbide	211-492-3	652-67-5	https://echa.europa.eu/el/registration-dossier/-/registered-dossier/5661/1/1	C1C(C2C(O1)C(CO2)O)O	146.14 (g/mol)

- Verificare l'applicabilità degli strumenti di valutazione
- Determinare l'accuratezza delle previsioni
- Identificare flussi di lavoro automatizzati
- Disseminazione, educazione e formazione



Il caso-studio: bisfenolo A e sostanze chimiche alternative

Gli strumenti di valutazione

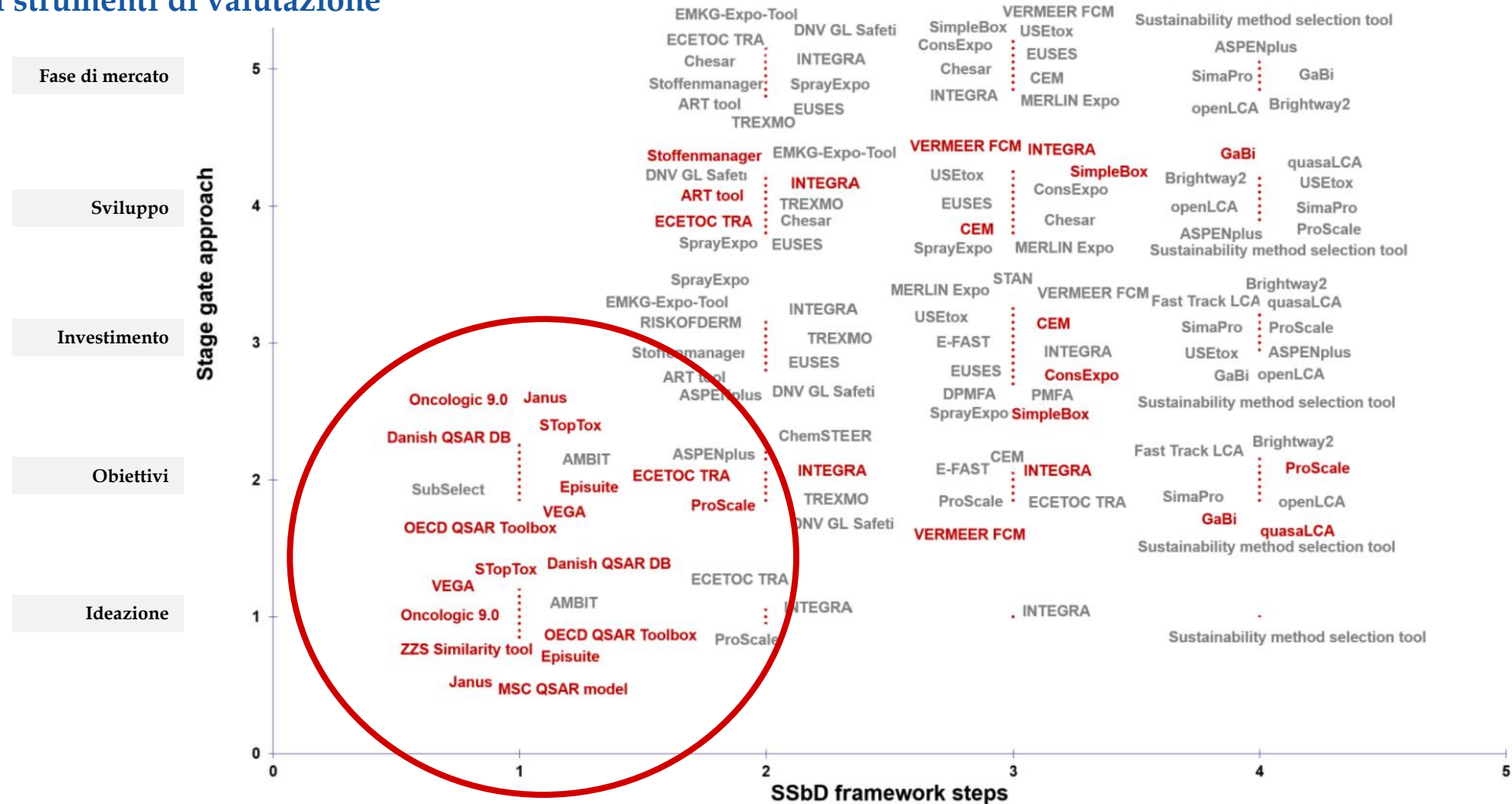


Figure 7: Model pipeline of the case study through the SSbD steps and the innovation stages.



Il caso-studio: bisfenolo A e sostanze chimiche alternative

Risultati

Previsione delle proprietà pericolose e confronto tra sostanze

Chemicals	Human health hazards													
	Carcinogenicity	Mutagenicity	Reproductive toxicity	ED (HH)	Respiratory sensitization	STOT-RE	Skin sensitization	Acute toxicity - oral	Acute toxicity - dermal	Acute toxicity - inhalation	Skin corrosion/irritation	Eye damage/irritation	Aspiration hazard	STOT-SE
BPA	NEG	NEG	POS	POS	POS	MISS	POS	POS	POS	NEG	POS	POS	NEG	MISS
BPAP	NEG	NEG	POS	POS	POS	MISS	POS	NEG	POS	NEG	POS	POS	NEG	MISS
Isosorbide	NEG	NEG	NEG	NEG	INC	MISS	NEG	NEG	NEG	NEG	NEG	NEG	NEG	MISS

Table 7: Color coding explanation

POS	Positive prediction
NEG	Negative prediction
MISS	Data Missing
INC	Inconclusive results



Il caso-studio: bisfenolo A e sostanze chimiche alternative

Risultati

Fase 1: La valutazione ha mostrato che i modelli *in silico* possono prevedere un'ampia gamma di endpoint con requisiti di input semplici, ma la loro copertura e affidabilità risultano disomogenee.

Fasi 2 e 3: Non esiste uno strumento adatto a tutte le fasi dell'innovazione. Difficoltà applicative per limitatezza di dati tossicologici.

Fase 4: È emerso che gli attuali strumenti di *Life Cycle Assessment* (LCA) non sono ancora sufficientemente sviluppati per supportare l'approccio SSbD, rendendo necessarie linee guida più chiare, una migliore integrazione dei metodi e una più forte incorporazione delle evidenze di pericolo ed esposizione delle fasi iniziali.

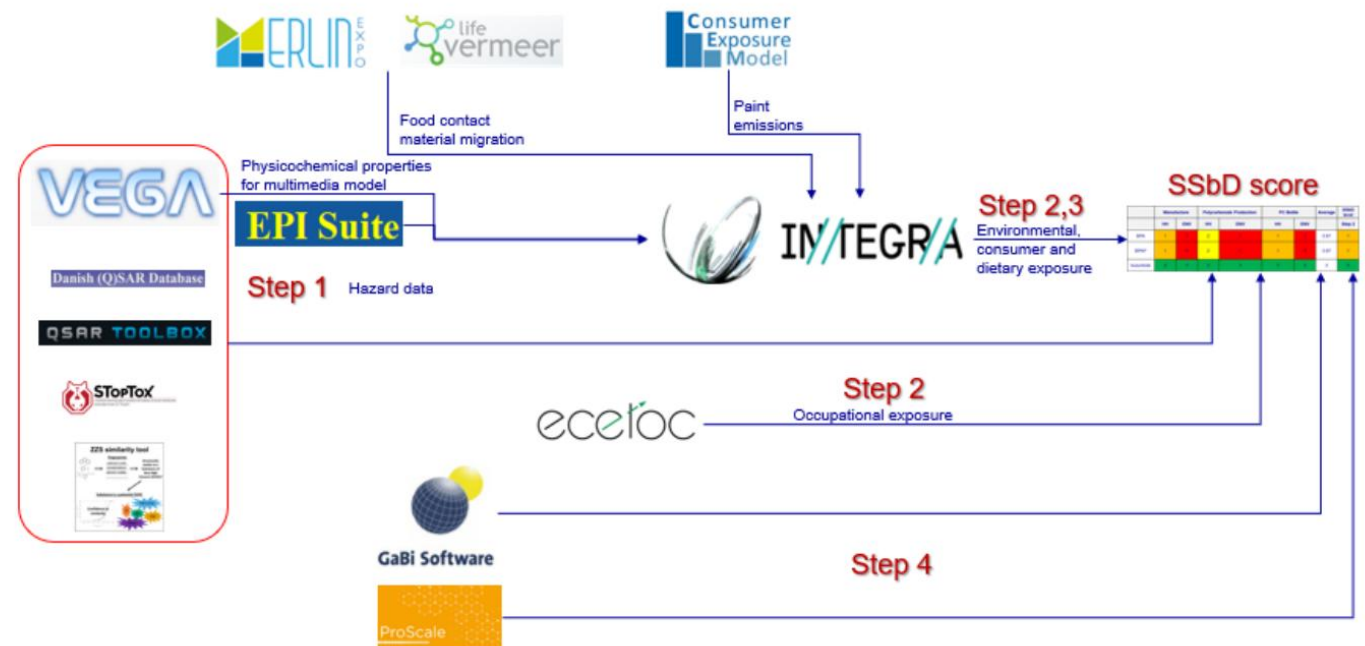
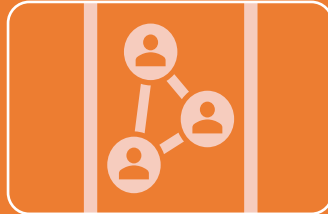


Figure 8: Model pipeline of the case study



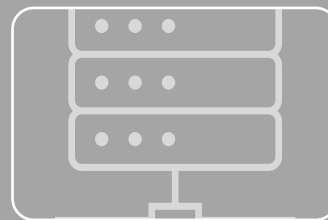
Il caso-studio: bisfenolo A e sostanze chimiche alternative

Conclusioni



Selezione e validazione di strumenti e modelli

- Selezione di strumenti
- Comprendere i limiti di strumenti e modelli
- Strumenti per la fase precoce dell'innovazione



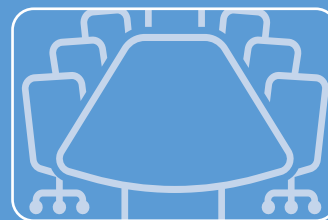
Qualità e interpretazione dei dati

- Garantire input di alta qualità
- Interpretazione dei risultati
- Documentazione e trasparenza



Combinazione di modelli

- Quadro di integrazione
- Valutare diversi approcci
- Strategie specifiche per caso



Considerazioni politiche e regolatorie

- Coinvolgere gli stakeholder
- Influenza degli aspetti di policy



Grazie dell'attenzione

veruscka.leso@unina.it



**UNIVERSITÀ
CATTOLICA
del Sacro Cuore**

Dipartimento di Sicurezza e Bioetica
Sezione di Medicina del Lavoro



Società Italiana di Medicina del Lavoro
Comitato Scientifico

**SIMPOSIO
"IA e Salute e Sicurezza sul Lavoro:
Innovazione, Prevenzione ed Etica"**

Lunedì 15 dicembre 2025

Università Cattolica del Sacro Cuore
Facoltà di Medicina e Chirurgia "Agostino Gemelli"
Sala Italia del Centro Congressi Europa
Largo Francesco Vito 1 - Roma

