



La carriera di Paola Gramatica celebrata con un numero speciale di una rivista internazionale

Varese e Como, 16 settembre 2019 - Importante riconoscimento per Paola Gramatica, Senior Professor dell'Università dell'Insubria, dove è stata professore ordinario di Chimica dell'ambiente e dei Beni culturali e, tra altri ruoli, delegato per le Relazioni internazionali fino al marzo 2018, quando è andata in pensione: la sua carriera, con particolare riferimento agli ultimi 20 anni di ricerche svolte in questo ateneo, è stata celebrata sulla rivista «**Molecular Informatics**», di grande rilievo internazionale, in un numero speciale che raccoglie quasi 30 articoli a lei dedicati da un centinaio di scienziati di chiara fama.

Nell'editoriale firmato da **Ester Papa**, Alessandro Sangion e Nicola Chirico sono ricordate le più rilevanti pubblicazioni nel campo della modellistica di Chimica Computazionale QSAR, che hanno caratterizzato il lavoro della professoressa Gramatica, che è inserita nell'elenco dei «Top Italian Scientists» grazie alla sua produzione scientifica forte di 150 articoli su quotate riviste internazionali, con circa 10.000 citazioni (senza auto-citazioni), e oltre 300 presentazioni a congressi. In particolare le pubblicazioni di Gramatica sulla validazione dei modelli QSAR, che da sole contano migliaia di citazioni, sono un riconosciuto punto di riferimento per la modellistica QSAR.

Paola Gramatica ha fondato all'Insubria nel 1997 l'**Unità di ricerca QSAR** in Chimica Ambientale ed Ecotossicologia, attualmente diretta da Ester Papa. QSAR, acronimo inglese di «Relazioni Quantitative Struttura-Attività», è un sistema di modelli matematico-statistici con i quali si può prevedere l'eventuale pericolosità dei **composti chimici** già a partire dalla loro struttura molecolare, ancor prima di eseguire test sperimentali o addirittura di sintetizzarle, risparmiando così tempo e denaro e indirizzando la sintesi chimica verso nuovi composti sempre più sicuri. I **principi di buona pratica nello sviluppo e validazione dei modelli QSAR** sono stati sempre applicati dal team insubrico nelle numerose ricerche svolte su varie problematiche ambientali di inquinanti organici, come persistenza, bioaccumulo, tossicità, interferenza sul sistema endocrino, mutagenicità ed altri.

Per la sua riconosciuta rilevanza internazionale Gramatica è stata anche chiamata a far parte del **Gruppo di Esperti QSAR dell'OECD**, Organizzazione per la cooperazione





e lo sviluppo economico, per la definizione delle linee guida per una buona modellistica QSAR. Linee guida che sono state di recente anche implementate nel software **QSARINS (QSAR-INSubria)**, che conta già centinaia di utilizzatori nel mondo della ricerca ed è considerato il lascito della professoressa Gramatica.

Commenta **Paola Gramatica**: «Condivido con il mio team l'orgoglio e la soddisfazione per questo numero speciale dedicato alla mia carriera, in particolare perché motivato dalle mie ricerche svolte all'Università dell'Insubria, che grazie ad esse ha ora una apprezzata notorietà internazionale nel campo della modellistica QSAR. Sono certa che la professoressa Ester Papa, che tanto validamente ha collaborato con me in questi anni, saprà mantenere l'elevato livello di riconoscimento internazionale raggiunto dal nostro gruppo di ricerca».

Qui l'editoriale: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/minf.201980831>