

ABSTRACT

Questo progetto di tesi si propone sia di ricercare tramite ricerca bibliografica e l'utilizzo di modelli QSAR i dati necessari (proprietà chimico-fisiche, dati tossicologici ed eco tossicologici) per il processo di registrazione per due molecole utilizzate nella sintesi di coloranti; sia di analizzare sempre ai fini REACH un colorante bruno metallo complesso sintetizzato in due formule isomeriche ('naftionato' e 'Laurent') tramite studi fatti precedentemente presso un istituto universitario quali HPLC, ^1H -NMR, ^{13}C -NMR e studi fatti in questo progetto di tesi quali UV/visibile, IR, determinazione di Sali inorganici, nonché analisi di qualità quali tintura su cuoio e test di solidità. L'utilizzo di modelli QSAR deve essere sempre affiancato dall'occhio critico di un operatore che controlla che le previsioni fatte dal modello siano credibili; in questo progetto di tesi non tutte le previsioni sono state giudicate credibili, alcune sono state confermate dall'analisi dei frammenti molecolari altre invece non possono essere utilizzate e successivamente saranno necessari ulteriori test che confermeranno o screditeranno le previsioni fatte dal modello QSAR. Nell'analisi del colorante bruno metallo complesso si è analizzata la composizione molecolare mediante HPLC-MS e l'identificazione strutturale tramite NMR, la resa spettrofotometrica mediante un'analisi allo spettrofotometro UV/visibile e la percentuale dei sali inorganici presenti, inoltre si è verificata la presenza di determinati gruppi funzionali mediante analisi IR. Infine un'analisi qualitativa mediante la tintura su cuoio e i test di solidità quali Tropical Test e Test al PVC hanno mostrato una buona qualità di entrambi i campioni rispetto allo standard. I dati raccolti saranno utilizzati nella preparazione dei dossier di registrazione per l'ECHA.

ABSTRACT

This thesis project aims at finding, through bibliographic research and QSAR models use, necessary data (chemical-physical properties, toxicological data and echo) for the registration process of two molecules used in dyes synthesis; and at analyzing on REACH basis a metal-complex brown dye, synthesized in two isomeric formulas ('naphionate' and 'Laurent') through studies previously made in an University Institute such as HPLC, H-NMR, C-NMR and studies made during this thesis project, such as visible/UV, IR, inorganic salt determination, and quality analysis such as leather dye and solidity test. QSAR models use has to be always deeply analyzed by an operator, who controls that model previsions are credible; in this thesis project not all the previsions have been reputed credible; some of them have been confirmed by molecular fragments analysis; some others can't be used and there will be other tests which could confirm or not QSAR model previsions. During metal-complex brown dye molecular composition has been analysed through HPLC-MS, structural identification through NMR and spectrophotometric strength through visible/UV analysis and the study of inorganic salt percentage. Moreover, through IR analysis a presence of some functional group has been determined. Lastly, qualitative analysis through leather dye and solidity tests, such as Tropical and PVC tests, have shown a good quality of both sample towards the standard. Collect data will be used in the preparation of ECHA registration dossiers.