

Ostatnie dwudziestolecie to czas rosnącego zainteresowania nanomateriałami (ENMs), które zbudowane są z nanocząstek (NPs), czyli cząstek o wielkości w zakresie 1-100 nanometrów. Właściwości nanocząstek są zależne od ich struktury, a zatem łatwo jest je modyfikować, co czyni je bardzo interesującymi dla wielu zastosowań technicznych, chemicznych i medycznych. W rezultacie na rynku znajduje się obecnie wiele produktów wykorzystujących nanotechnologię. Szacuje się również, że liczba „nano-produktów” wzrosła z 800 do 10 000 w ciągu następnej dekady, a zatem narażenie ludzi na te materiały będzie stale rosło.

Jednocześnie, jak wyniki badań z wykorzystaniem zwierząt laboratoryjnych, niektóre klasy nanocząsteczek mogą być toksyczne. Wzbudza to obawy dotyczące zdrowia ludzi i bezpieczeństwa środowiskowego wynikające z obecności w nim ENMs. W efekcie niedawno ustanowiono kilka międzynarodowych inicjatyw (np. EU NanoSafety Cluster, program badawczy OECD WPMN, inicjatywa Malta), a także przeznaczono środki na finansowanie licznych projektów badawczych (np. MARINA, NANoREG, NanoReg2, caLIBRAte, NanoTest, RiskGONE), których celem jest zbadanie ryzyka związanego z narażeniem ludzi i środowiska na działanie nanocząstek. Dotychczasowe rozwiązania oparte są jednak na prostych adaptacjach klasycznych paradygmatów toksykologicznych i klasycznych metodach testowania toksyczności. W efekcie wciąż bardzo mało wiadomo na temat mechanizmów molekularnych indukowanych przez nanomateriały; obejmuje to również efekty obserwowane w dłuższej perspektywie czasowej. Szczególnie interesujące w tym kontekście jest pytanie: w jakim stopniu odpowiedź toksyczna indukowana przez nanomateriały na poziomie molekularnym zależy od ich cech strukturalnych?

Głównym celem projektu TransNANO jest **opracowanie komputerowej platformy obliczeniowej do badania roli właściwości strukturalnych ENMs w procesie inicjowanej przez nie odpowiedzi na poziomie transkryptomycznym. W ramach projektu zweryfikujemy hipotezę, że odpowiedź transkryptomiczna indukowana przez ENMs w płucach u myszy jest ilościowo związana z ich właściwościami strukturalnymi. Zatem, TransNANO ma na celu identyfikację i kwantyfikację cech strukturalnych ENMs, które można wykorzystać jako predyktory odpowiedzi molekularnej dla nowo zaprojektowanych materiałów, w celu zmniejszenia ich toksyczności w płucach.**

Odpowiednie zrozumienie roli, jaką odgrywają właściwości strukturalne ENMs w ich toksyczności (w tym skutki obserwowane w dłuższej perspektywie czasowej) jest ważne dla projektowania bezpieczniejszych nano-produktów. Rozwój platformy TransNANO, która umożliwi łączenie cech strukturalnych ENMs (w tym również warunków ich syntezy) z ich toksycznością pozwoliłby producentom wyeliminować najbardziej niebezpieczne warianty struktury na najwcześniejszym możliwym etapie projektowania. Zmniejszyłoby to czas, koszty i ilość testów koniecznych do wykonywania z wykorzystaniem zwierząt laboratoryjnych.

W ramach projektu opracujemy TransNANO platformę, która umożliwi łączenie różnych metod obliczeniowych, tj.: chemia teoretyczna, chemoinformatyka, bioinformatyka oraz metody analizy danych (uczenie maszynowe, ML i sztuczna inteligencja, AI). Zgodnie z naszą wiedzą taka platforma nie została jeszcze opracowana i przetestowana do badania odpowiedzi -omicznej w odniesieniu do struktury ENM.