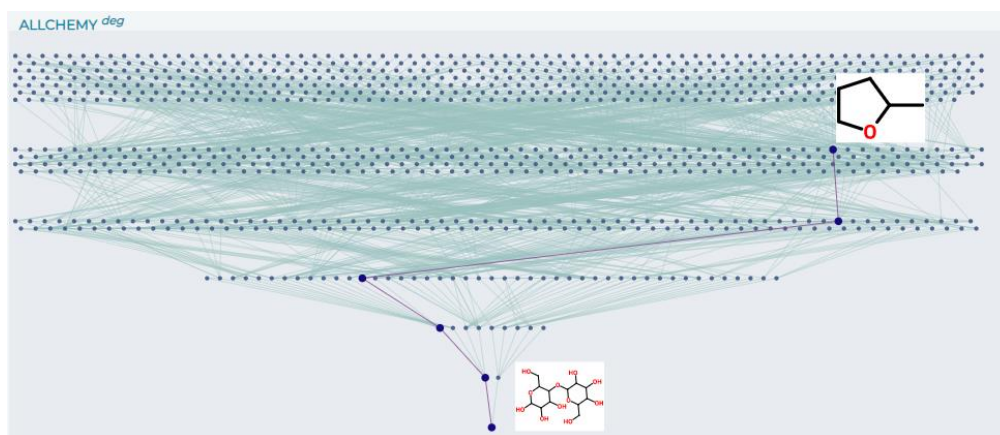


DEGRADACJA NIEBEZPIECZNYCH ZWIĄZKÓW CHEMICZNYCH DO CENNYCH BLOKÓW BUDULCOWYCH: OD PLANOWANYCH KOMPUTEROWO ŚCIEŻEK DO WALIDACJI EKSPERYMENTALNEJ

Pomimo niezliczonych korzyści dla społeczeństwa - w postaci leków ratujących życie, nawozów, użytecznych materiałów itp. - chemia jest często postrzegana jako globalny truciciel odpowiedzialny za gromadzenie się niebezpiecznych odpadów w glebie i oceanach. Chociaż to nie chemicy są bezpośrednio odpowiedzialni, chemia jako dyscyplina powinna być lepiej dostosowana do polityki ścisłej kontroli, recyklingu i ponownego wykorzystania przemysłowych odpadów chemicznych. Niniejszy projekt ma na celu wspieranie tego dostosowania poprzez wykorzystanie nowoczesnych obliczeń chemicznych do projektowania nowych dróg syntezy, za pomocą których odpady chemiczne są rozkładane na nietoksyczne i cenne bloki budulcowe. Proponowane badania mają na celu zautomatyzowanie i usprawnienie projektowania syntez dla tak zwanej chemii cyrkularnej.

Do niedawna stosowanie syntezy wspomaganą komputerowo było ograniczone do raczej prostych cząsteczek docelowych. To ograniczenie zostało przezwyciężone dopiero w tym roku wraz z publikacją naszych artykułów demonstrujących eksperymentalną walidację syntez zaprojektowanych komputerowo, prowadzących do różnych złożonych produktów naturalnych i kluczowych cząsteczek zaangażowanych w formowanie się życia na pierwotnej Ziemi.

W obecnym projekcie wykorzystam niektóre z tych przełomowych narzędzi teoretycznych, aby umożliwić odkrycie nowych ścieżek degradacji, w wyniku których szkodliwe substancje zostaną przekształcone w strukturalnie mniejsze, ale chemicznie przydatne produkty końcowe. W szczególności oprogramowanie, którego będę używała, szybko wygeneruje duże sieci możliwości syntetycznych obejmujących wszystkie możliwe plany degradacji interesującej nas substancji (rysunek 1). Reguły reakcji używane do generowania sieci będą obejmowały zarówno reakcje chemiczne, jak i biokatalityczne, umożliwiając tym samym komputerowi planowanie bardziej przyjaznych dla środowiska dróg degradacji. Odpowiednie funkcje oceniające i filtry oparte na sztucznej inteligencji pozwolą zidentyfikować najbardziej ekonomiczne ścieżki bez udziału toksycznych półproduktów. Te ścieżki zostaną następnie poddane walidacji eksperymentalnej. Podsumowując, mam zamiar zaprojektować komputerowo, a następnie realizować w laboratorium drogi degradacji rozpoczynające się od wielu barwników, toksyn, pestycydów lub związków pochodzących z biomasy. Walidacja i publiczne rozpowszechnienie tych planów zademonstruje użyteczność mojego podejścia i będzie cennym dodatkiem do obecnego repertuaru technologii degradacji odpadów.



Rysunek 1. Przykład „drzewa” degradacji ilustrującego mnogość możliwości.