

Nanomateriały (ang. *engineered nanomaterials*, ENM) stanowią obecnie trzon wielu zaawansowanych technologii. Niemniej jednak, obok niepodważalnych zalet związanych z wyjątkowymi właściwościami ENM, należy rozważyć stale rosnące uwalnianie ENM do środowiska, a w konsekwencji wzrost potencjalnego narażenia zdrowia człowieka oraz środowiska na niekorzystne działanie nanomateriałów. Rzetelna ocena ryzyka ze strony ENM obejmuje, obok oceny zagrożenia tj. toksyczności, także ocenę narażenia. Jednakże, przeprowadzenie pełnych badań eksperymentalnych jest niemożliwe z uwagi na dużą liczbę nanopostaci stosowanych nanomateriałów zróżnicowanych pod kątem chemicznym i fizycznym. Niemniej jednak, zasadniczą kwestią jest poznanie mechanizmów transformacji, jakim ulegają nanomateriały w warunkach środowiskowych, ich transport oraz losy w środowisku. W tym momencie, pomocne mogą okazać się zaawansowane metody chemoinformatyczne pozwalające na zaobserwowanie istotnych zależności pomiędzy strukturą wyjściową ENM a właściwościami i losami ENM w środowisku, w oparciu o cząstkowe, dostępne dane eksperymentalne.

**Celem projektu FateNANO jest odpowiedź na pytanie: jakie cechy strukturalne nanopostaci ENM odpowiedzialne są za ich uwalnianie do środowiska transport i losy w środowisku, a tym samym za narażenie człowieka i środowiska?**

Kluczowe parametry determinujące transformacje ENM i ich los w środowisku, takie jak rozpuszczanie i aglomeracja, zostaną zidentyfikowane poprzez opracowanie ilościowych modeli zależności pomiędzy cechami strukturalnymi nanocząstek a ich właściwościami (ang. *quantitative nanostructure-property relationship*, nano-QSPR), które pozwolą powiązać cechy strukturalne pierwotnej ENM z ich właściwościami po przemianach środowiskowych. Aby zidentyfikować nanopostacie uwalniane do środowiska z nanoproductów, zostanie opracowany model uwalniania specyficzny dla formy, oparty na analizie przepływu materiałów (ang. *material flow analysis*, MFA). Ten nowy model będzie również uwzględniał rozkład wielkości cząstek uwalnianych ENM. Pełne informacje dostarczone przez nowy model uwalniania umożliwią pełne połączenie MFA i modelowania losu w środowisku (ang. *environmental fate modeling*, EFM), dla którego informacje o postaci cząstek i rozkładzie wielkości są kluczowym elementem prognozowania losów ENM w środowisku.

Pozyskana wiedza oraz opracowana hybrydowa metodyka modelowania nano-QSPR-MFA/EFM umożliwi przewidywanie narażenia środowiskowego nowych nanomateriałów w oparciu o ich wyjściowe parametry fizykochemiczne, jeszcze zanim zostaną one uwolnione do środowiska. Tym samym, stanowić będzie komplementarny do oceny zagrożenia, element całościowej oceny ryzyka ze strony nanomateriałów. Zaproponowane podejście szacowania potencjalnego narażenia ze strony nanomateriałów wpisuje się w strategię projektowania bezpiecznych materiałów (ang. *safe-by-design strategy*) poprzez przewidywanie niekorzystnych z punktu widzenia zdrowia człowieka i środowiska właściwości nowych materiałów jeszcze na etapie ich projektowania i bez konieczności wykonywania kosztownych i czasochłonnych badań eksperymentalnych.