

Nanohybrydowe struktury LDH/GCN z polimerami przewodzącymi: innowacyjne rozwiązanie dla fotokatalitycznego oczyszczania wody z estrogenów w reaktorze przepływowym

Zanieczyszczenie wód wynika z wielu źródeł i prowadzi do niekorzystnych zmian w fizycznych, chemicznych i biologicznych właściwościach wody. Często jest to efekt przedostawania się do niej nadmiernych ilości związków organicznych i nieorganicznych, substancji promieniotwórczych, a nawet ciepła. Największą rolę w tym procesie odgrywa działalność człowieka. Rozwój przemysłu, rolnictwa oraz wzrost liczby ludności na świecie wpływają na pogarszającą się jakość wód. Choć powstające ścieki poddawane są oczyszczaniu, stosowane obecnie technologie nie są w stanie usunąć wszystkich rodzajów zanieczyszczeń. Przykładem takich związków są **estrogeny**. Są to naturalne i syntetyczne hormony, które pełnią kluczową rolę w organizmie człowieka – jednak po przedostaniu się do środowiska stanowią poważne zagrożenie. Nawet w bardzo małych stężeniach (kilka ng/L) estrogeny mogą zakłócać gospodarkę hormonalną organizmów wodnych, powodując feminizację ryb i obniżoną liczbę plemników u samców. U ludzi długotrwała ekspozycja na estrogeny może przyczyniać się m.in. do rozwoju raka piersi, raka jajnika, endometriozy, otyłości, mięśniaków macicy oraz chorób układu krążenia. W projekcie skupiono się na dwóch estrogenach obecnych w wodzie: **estronie** (związek naturalny) oraz **etynyloestradiolu** (hormon syntetyczny, powszechnie stosowany w tabletkach antykoncepcyjnych). Substancje te cechuje wysoka aktywność biologiczna i trwałość, co utrudnia ich usunięcie ze ścieków.

W celu rozwiązania tego problemu, w projekcie zostanie zastosowana **fotokataliza** – metoda, w której materiały pochłaniają światło i wykorzystują tę energię do rozkładu zanieczyszczeń. Jest to technologia uznawana za przyjazną dla środowiska, ponieważ zanieczyszczenia ulegają rozkładowi w trakcie reakcji. Proces ten może być zasilany różnymi źródłami światła – w tym światłem słonecznym, lampami UV lub lampami emitującymi światło widzialne, jak popularne żarówki LED, które zostały zaproponowane w tym projekcie. Fotokataliza jest szczególnie obiecującą metodą usuwania estrogenów, ponieważ nie polega jedynie na ich filtracji, lecz umożliwia ich zniszczenie na poziomie cząsteczkowym. Aby proces fotokatalizy był skuteczny, stosowane materiały muszą efektywnie pochłaniać światło i rozdzielać ładunki elektryczne (elektrony i dziury), które inicjują reakcje chemiczne. W ramach tego projektu wykorzystane zostaną warstwowe materiały krystaliczne, takie jak **podwójne warstwowe wodorotlenki (LDH)** oraz **grafitowy azotek węgla (GCN)**. Obie fazy znane są z dobrego przewodnictwa ładunków oraz dużej powierzchni właściwej, co czyni je odpowiednimi do wychwytywania i rozkładu trudnych do usunięcia związków, takich jak estrogeny. Materiały te zostaną połączone ze sobą oraz z **nanocząstkami srebra**, tworząc kompozyt, który pozwoli na szybki przebieg reakcji fotokatalitycznej.

Ponieważ w rzeczywistych warunkach oczyszczania ścieków mamy do czynienia z **ciągłym przepływem wody**, testy fotokatalityczne zostaną przeprowadzone w **reaktorze dynamicznym**. Materiały fotokatalityczne zostaną zamknięte w **polimerowych kulkach** wykonanych z **alginianu sodu**, co pozwoli na swobodny przepływ wody wokół materiału, przy jednoczesnym utrzymaniu go w reaktorze, zwiększając tym samym możliwość jego ponownego wykorzystania. Aby dodatkowo zwiększyć efektywność fotokatalizy, do kulek zostaną wprowadzone **przewodzące polimery**, takie jak **polipirol** i **polisulfon**. Związki te wspomagają transport ładunków podczas reakcji, co intensyfikuje rozkład estrogenów pod wpływem światła. Warto jednak zaznaczyć, że rozkład estrogenów nie zawsze prowadzi bezpośrednio do **nieszkodliwych produktów**, takich jak dwutlenek węgla i woda. Czasem mogą powstawać toksyczne związki pośrednie. Aby lepiej zrozumieć te przemiany, w projekcie zostaną zastosowane **obliczenia DFT (teorii funkcjonalu gęstości)**. Jest to **metoda obliczeniowa** pozwalająca modelować reakcje chemiczne na poziomie molekularnym w warunkach fotokatalitycznych. Następnie produkty pośrednie zostaną zidentyfikowane **eksperymentalnie** i porównane z wynikami obliczeń. Pozwoli to wyznaczyć szlaki degradacji i ocenić, na ile bezpieczne są końcowe produkty reakcji.

Podsumowując, celem projektu jest **opracowanie zaawansowanych materiałów aktywowanych światłem, zamkniętych w kulkach polimerowych, które umożliwią usuwanie szkodliwych estrogenów z wód w warunkach przepływowych**. Połączenie eksperymentów z modelowaniem komputerowym pozwoli nie tylko sprawdzić skuteczność tych materiałów, ale także **zrozumieć mechanizmy rozkładu estrogenów**, zapewniając, że proces ten będzie zarówno efektywny, jak i bezpieczny dla środowiska.