

Komputerowa ocena potencjalnego ryzyka stwarzanego przez ciecze jonowe przed ich użyciem w nowych technologiach (CRAB)

Ciecze jonowe (ILs) to fascynująca grupa nowych substancji chemicznych, które wykazują ogromny potencjał dla poprawy rozwoju chemii organicznej i technologii chemicznej. Związki te mogą mieć zastosowanie w wielu dziedzinach badawczych, między innymi w syntezie i katalizie, w technologiach separacyjnych oraz technologiach chłodzenia, w analityce, czy też mogą być wykorzystywane jako elektrolity lub ciecze funkcjonalne. Jeszcze do niedawna ciecze jonowe były uznawane za tzn. "zielone rozpuszczalniki" - bezpieczne dla ludzi i przyjazne dla środowiska. Obecnie jednak wiele badań naukowych dowodzi, że mogą one być toksyczne, przez co mogą negatywnie wpływać na poszczególne organizmy zasiedlające nasze środowisko. Dlatego, mając na uwadze wzrost ich wykorzystania w przemyśle konieczne jest przeprowadzenie oceny potencjalnego wpływu ILs na organizmy żywe (w tym ludzi) jeszcze przed ich wprowadzeniem na dużą skalę do procesów przemysłowych.

Badania eksperymentalne związane z oceną ryzyka środowiskowego są często zbyt czasochłonne i kosztowne, nie jest więc możliwe przeprowadzenie kompleksowej oceny narażenia człowieka oraz innych organizmów tworzących naturalne ekosystemy na ich działanie. Alternatywą dla kosztownych eksperymentów mogą być metody komputerowe, w szczególności techniki ilościowego modelowania zależności pomiędzy strukturą chemiczną a aktywnością biologiczną/ właściwościami fizykochemicznymi (QSAR/QSPR). Metody te należą obecnie do "złotych standardów" w zakresie oceny ryzyka dla nowych grup substancji chemicznych i są rekomendowane przez wiele międzynarodowych regulacji, m.in. europejski system gospodarowania chemikaliami REACH. Ciecze jonowe wymagają jednak odrębnego potraktowania przy modelowaniu QSAR/QSPR (istniejąca metodologia wymaga opracowania specyficznych rozwiązań dla cieczy jonowych). Przedmiotem badań w projekcie było dostosowanie algorytmów komputerowych obecnie wykorzystywanych w ocenie ryzyka chemicznego, do specyfiki cieczy jonowych (metodologia CRAB - Computational Risk Assessment Before) oraz uzyskanie wiarygodnych informacji i prognoz dotyczących mechanizmów transportu i deponowania cieczy jonowych w środowisku, narażenia człowieka, a także toksyczności cieczy jonowych.

W wyniku realizacji projektu opracowana została metodologia obliczania deskryptorów struktury cieczy jonowych użytecznych do opracowania modeli QSAR/QSPR. Opracowany został również zestaw komputerowych algorytmów obliczeniowych służących do modelowania procesów transportu i trwałości cieczy jonowych w środowisku wodnym i glebie w oparciu o wielokomponentowe modele środowiska (MM) oraz do modelowania toksyczności ILs w oparciu o metodę QSAR.

W oparciu o opracowane algorytmy stworzono oprogramowanie **RExIL** (ang. Risk Explorer of Ionic Liquids) pozwalające na wstępną, szybką ocenę toksyczności oraz właściwości fizykochemicznych cieczy jonowych. Narzędzie to może być w powodzeniem **wykorzystywane w procesie projektowania nowych, bezpiecznych cieczy jonowych pozwalając tym samym ograniczyć czasochłonne badania eksperymentalne**. Potencjalnie toksyczne/niebezpieczne dla środowiska ciecze jonowe mogą zostać dzięki temu wyeliminowane już na etapie projektowania, jeszcze przed ich syntezą (w myśl idei **CRAB - Computational Risk Assessment Before**). Jest to bardzo istotne zagadnienie szczególnie z punktu widzenia rosnącego zastosowania ILs w nowych technologiach, np. zastosowanie ILs w bateriach słonecznych, które w założeniu mają chronić środowisko i człowieka (zmniejszenie zanieczyszczenia środowiska spowodowanego używaniem paliw kopalnych jako źródła energii), mogą również stać się źródłem narażenia człowieka na toksyczne ciecze jonowe.

Opracowane w trakcie trwania projektu modele QSAR/QSPR oraz wskazanie, które cechy strukturalne cieczy jonowych odpowiadają za toksyczność/parametry fizykochemiczne związków może mieć tym samym wpływ na rozwiązanie istotnych problemów przyszłych zagrożeń poszczególnych ekosystemów oraz zdrowia człowieka ze strony tych cieczy jonowych. Zaproponowane narzędzia obliczeniowe do kompleksowej oceny ryzyka cieczy jonowych mają bardzo praktyczny wymiar w świetle regulacji prawnych (np. Rozporządzenia REACH) oraz ustawy o ochronie zwierząt laboratoryjnych, gdzie szczególny nacisk kładzie się na bezpieczeństwo stosowania związków jak również na rozwój metod komputerowych jako alternatywa do czasochłonnych i kosztownych badań eksperymentalnych (niekiedy wątpliwych z etycznego punktu widzenia). Wyniki badań będą stanowić wartość dodaną procesowi kreowania innowacyjnego produktu, gwarantując wysoki poziom ochrony zdrowia konsumentów oraz ograniczając liczbę badań eksperymentalnych przeprowadzanych na zwierzętach.