

Podsumowanie Projektu NanoSens

Projekt NanoSens opracował innowacyjne narzędzia obliczeniowe, które wspomagają lepsze zrozumienie oraz przewidywanie wpływu związków chemicznych i nanomateriałów na środowisko, w szczególności na organizmy wodne, takie jak ryby, płazy, glony czy skorupiaki. Dzięki tym narzędziom naukowcy i organy regulacyjne mogą podejmować decyzje dotyczące bezpieczeństwa chemikaliów szybciej, precyzyjniej i w sposób bardziej etyczny podejmować decyzje dotyczące bezpieczeństwa chemikaliów – bez konieczności przeprowadzania testów na zwierzętach. Wykorzystanie nowoczesnych metod *in silico* umożliwiło przewidzieć toksyczność substancji, ich zdolność do bioakumulacji w organizmach oraz wrażliwość różnych gatunków na kontakt z związkami chemicznymi.

Jednym z kluczowych obszarów badawczych projektu było określenie toksyczności związków cyjanku dla różnych organizmów, w tym ludzi i gatunków wodnych. Zespół badawczy stworzył precyzyjne modele obliczeniowe, które na podstawie struktury chemicznej – potrafiły przewidzieć stopień toksyczności danego związku. Na przykład, znając właściwości cząsteczki, takie jak rozpuszczalność w wodzie czy zdolność do przenikania przez błony komórkowe, można było oszacować, czy dana substancja stanowi zagrożenie dla ryb lub płazów. Modele te zostały zweryfikowane i opublikowane w renomowanych czasopismach naukowych. Kolejnym osiągnięciem projektu było opracowanie modeli opisujących wpływ związków chemicznych na kijanki – młodociane formy płazów, które są szczególnie wrażliwe na zanieczyszczenia środowiska. Ze względu na ich amfibiotyczny charakter, reprezentują zarówno środowisko wodne, jak i lądowe. Dzięki zaawansowanym narzędziom *in silico* przeanalizowano tysiące związków organicznych i sklasyfikowano je według poziomu toksyczności dla kijanek. Uzyskane wyniki mają istotne znaczenie dla ochrony gatunków zagrożonych oraz dla projektowania bezpieczniejszych substancji i produktów chemicznych. Projekt zaadresował także problemem bioakumulacji, czyli zdolności substancji chemicznych do gromadzenia się w organizmach żywych. Opracowano modele predykcyjne modele dla metali, tlenków metali i halogenków metali, które pozwalają ocenić, w jakim stopniu różne organizmy – od ryb po rośliny –akumulują szkodliwe substancje. Takie narzędzia są szczególnie przydatne przy ocenie bezpieczeństwa nowych materiałów wykorzystywanych m.in. w przemyśle i elektronice, które w całym cyklu życia mogą trafiać do środowiska.

Zwieńczeniem projektu było stworzenie platformy internetowej NanoSens CalTox (<https://nanosens.onrender.com/>), która udostępnia wszystkie opracowane narzędzia *in silico* do bezpłatnego użytku publicznego – zarówno dla środowiska naukowego, przemysłu, jak i administracji. Każdy użytkownik może wprowadzić dane chemiczne i natychmiast uzyskać prognozy dotyczące ryzyka środowiskowego, potencjału bioakumulacyjnego oraz wrażliwości różnych gatunków – bez konieczności prowadzenia kosztownych badań laboratoryjnych. To istotny krok w kierunku bezpieczniejszego projektowania chemikaliów, zgodnego z założeniami Europejskiego Zielonego Ładu. Projekt NanoSens stanowi znaczący postęp w zakresie zastosowania nauk obliczeniowych w ochronie środowiska.