

Streszczenie rozprawy doktorskiej mgr. Piotra Urbaszka, tytuł: „**Przewidywanie sorpcji bromo- i chloropochodnych trwałych zanieczyszczeń organicznych (TZO) na powierzchni fulerenu C<sub>60</sub>”**

Nanotechnologia przez ostatnie dekady rozwija się niezwykle dynamicznie. Do nowych materiałów o potencjale wykorzystania w wielu gałęziach przemysłu należą nanocząstki węglowe – w tym fulereny. Część zastosowań tych struktur opiera się o wykorzystanie ich oddziaływań powierzchniowych. Należy jednak mieć na uwadze, że zwiększenie produkcji nanocząstek węglowych – w tym fulerenu C<sub>60</sub> zwiększy również szansę na jego niekontrolowaną emisję do środowiska, w którym obecne są substancje potencjalnie mogące ulegać adsorpcji na powierzchni tych nanocząstek, co może być przyczyną zwiększenia ryzyka toksykologicznego tak fulerenu, jak i tych substancji.

Trwałe Zanieczyszczenia Organiczne (TZO) to bardzo obszerna grupa związków organicznych, których wspólnymi cechami są trwałość w środowisku naturalnym, zdolność do pokonywania znacznych odległości w różnych jego komponentach, stwarzane przez nie zagrożenie toksykologiczne oraz fakt, że stanowią najczęściej produkt uboczny działalności antropogenicznej. Ta niezwykle liczna grupa obejmuje struktury o bardzo zróżnicowanej budowie struktury bazowej: od jednopierścieniowych pochodnych benzenu do wielopierścieniowych struktur. Cechą również charakterystyczną dla TZO jest częste występowanie halogenowanych pochodnych tych związków takich jak polichlorowane dibenzo-*p*-dioksyny, polibromowane difenyletery i wiele innych.

Z racji liczności struktur należących do TZO, niemożliwe jest zbadanie siły oddziaływań tych związków z powierzchnią fulerenu metodami eksperymentalnymi.

Poniższa praca przedstawia wyniki badań opartych o metody chemii teoretycznej oraz chemoinformatyki mających na celu zbadanie potencjału wystąpienia oddziaływań sorpcyjnych 23 rodzin kongenerów bromo- chloro- i chlorobromowanych TZO z powierzchnią fulerenu oraz określenie potencjału toksykologicznego takich oddziaływań.

Otrzymane wyniki dzielą się na następujące etapy: 1) analiza chemometryczna zbioru 1 840 951 halogenowanych TZO w przestrzeni dwudziestu sześciu deskryptorów strukturalnych wyznaczonych metodami chemii teoretycznej, 2) kalibracja i budowa modelu nano-QSPR przewidującego oddziaływanie sorpcyjne dla 1701 kongenerów polihalogenowanych dibenzo-*p*-dioksyn oraz oszacowanie wpływu typu i ilości podstawników halogenowych na wartości energii oddziaływań 3) kalibracja i budowa modelu nano-QSPR dla 20 rodzin kongenerów oraz oszacowanie wpływu wielkości szkieletu węglowego struktury podstawowej na potencjał sorpcyjny kongenerów TZO.