

ΧΡΗΣΗ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΣΧΕΣΗΣ ΔΟΜΗΣ - ΔΡΑΣΤΙΚΟΤΗΤΑΣ (QSAR) ΚΑΙ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΑΝΘΡΑΚΑ (CARBON NANOTUBES)

Α. Κατσαβριάς¹, Γ. Ξιάρχος¹, Α. Μοροζίνης¹, Δ. Δραγατογιάννης¹, Κ. Χαριτίδης^{1,*}

¹ Ερευνητική Μονάδα Προηγμένων, Σύνθετων, Νάνο Υλικών και Νανοτεχνολογίας, Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ, Αθήνα, Ελλάδα

(*charitidis@chemeng.ntua.gr)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η νανοτεχνολογία θεωρείται ως μια από τις βασικές τεχνολογίες (Key – enabling technologies) από την Ευρωπαϊκή Ένωση, που παρέχουν τη βάση για καινοτομία σε ένα ευρύ φάσμα βιομηχανικών εφαρμογών και έχουν υψηλό δυναμικό τροφοδότησης της οικονομικής ανάπτυξης και δημιουργίας νέων θέσεων εργασίας [1]. Τα νανοϋλικά, που είναι ο φορέας των νανοτεχνολογικών εφαρμογών, έχουν ήδη διεισδύσει στη καθημερινή ζωή των ανθρώπων με μια πληθώρα προϊόντων όπως τα καλλυντικά, αντιδιαβρωτικά προϊόντα, τα ηλεκτρονικά και την ιατρική, ενώ νέες γενιές νανοϋλικών παράγονται συνεχώς. Οι νανοσωλήνες άνθρακα (carbon nanotubes) αποτελούν ένα από τα πιο υποσχόμενα νανοϋλικά λόγω του πλήθους των καινοτόμων τεχνολογικών εφαρμογών: στην ιατρική και φαρμακευτική, στην ενέργεια και τα σύνθετα υλικά [2]. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την αυξημένη ευαισθητοποίηση της κοινής γνώμης σε θέματα ασφάλειας και τοξικότητας για τον άνθρωπο και τα περιβαλλοντικά οικοσυστήματα [3]-[4]. Οι εργαστηριακές τοξικολογικές μελέτες αξιολόγησης των νανοϋλικών είναι χρονοβόρες και αρκετά δαπανηρές [5], για αυτό το λόγο η εφαρμογή υπολογιστικών μοντέλων πρόβλεψης με χρήση Ποσοτικών Σχέσεων Δομής – Δραστικότητας (QSAR) προκρίνεται ως μια αποτελεσματική εναλλακτική λύση, μοντέλα που βασίζονται στην γενική υπόθεση πως παρόμοιες χημικές δομές αναμένεται να εμφανίσουν παρόμοιες χημικές συμπεριφορές, άρα και δραστηριότητες [6]. Επιπρόσθετα, η χρήση τέτοιων μοντέλων μπορεί να συμβάλλει στην πρόβλεψη ιδιοτήτων (μηχανικών, φυσικοχημικών) ή στη δημιουργία νέων υλικών και εφαρμογών. Στην εργασία αυτή συνοψίζονται οι πρόσφατες μελέτες μοντέλων QSAR για τους νανοσωλήνες άνθρακα όσον αφορά την τοξικότητα και τις ιδιότητες αυτών.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Communication from the Commission to the European Parliament, the Council the European Economic and Social Committee and the Committee of the Regions – “Preparing for our future: Developing a common strategy for key enabling Technologies in the EU” (SEC(2009) 1257). Available at: <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX:52009DC0512>
- [2] Baughman RH., Zakhidov AA., de Heer WA. (2002). *Science*, 297(5582): 787 – 792
- [3] Stephan T. Stern, Scott E. McNeil. (2008). *Toxicol. Sci.*, 101(1): 4-21.
- [4] Harald F. Krug. (2014). *Angew. Chem. Int. Ed.*, 53: 12304- 12319
- [5] Dhawan A., Sharma V. (2010). *Anal. Bioanal. Chem.*, 398: 589 -605.
- [6] Guidance document on the validation of (Quantitative) Structure – Activity Relationship [(Q)SAR] Models, OECD Environment Health and Safety Publications Series on Testing and Assessment No. 69, Environment Directorate, Organisation for Economic Co – operation and Development, 2007, Paris