ADVANCE

AI-driven catalyst discovery and product analysis for the circular economy

Programm / Ausschreibung	F&E Infrastruktur, F&E Infrastrukturförderung 4. Ausschreibung 2022/01	**Status**	laufend
Projektstart	01.11.2023	**Projektende**	31.10.2027
Zeitraum	2023 - 2027	**Projektlaufzeit**	48 Monate
Keywords	Green- and sustainable chemistry; Renewables; Plastic waste; Catalysis; Artificial intelligence		

Projektbeschreibung

Probleme und Herausforderungen

Die zeitlich begrenzte Verfügbarkeit fossiler Ressourcen sowie deren umweltschädliche Auswirkungen erfordern dringend einen Übergang zu einer saubereren und nachhaltigeren chemischen Industrie. Dies erfordert die Entwicklung grundlegend neuer katalytischer Ansätze zur effizienten Umwandlung erneuerbarer Ressourcen (z.B. aus Forstwirtschaft oder Landwirtschaft) in (neuartige) biobasierte Produkte, aber auch zur Verwertung von Kunststoffreichen Abfallströmen, die eine ständig wachsende Umweltbelastung darstellen. Da jedoch die inhärente Struktur und Zusammensetzung von erneuerbaren Ausgangsmaterialien und Abfallströmen und davon abgeleiteten Produktströmen oft sehr komplex sind, wird die Entwicklung effizienter katalytischer Umwandlungsverfahren drastisch behindert. Dies wird weiter durch die schwierige und langwierige Analyse von Produktströmen erschwert. Und tatsächlich bleibt die Identität vieler chemischer Komponenten etwa bei überlappenden GC-Peaks und begrenzten Datenbanken zur Verbindungszuordnung schwer fassbar. Als direktes Ergebnis ist die Entwicklung sinnvoller Zusammenhänge zwischen Struktur und katalytischer Aktivität sehr herausfordernd.

Ziele und Innovationsgehalt

Der ADVANCE-Antrag zielt darauf ab, ein automatisiertes Parallelreaktorsystem einzurichten, das in der Lage ist, eine Vielzahl von katalytischen Methoden durchzuführen. Die Analyse der Reaktionsmischungen erfolgt a) über einen klassischen GC-FID zur schnellen Erstbeurteilung der Reaktionsmischungen und b) über den Einsatz eines speziellen GC-Orbitrap-Systems, einer Technologie, die eine eindeutige Identifizierung chemischer Verbindungen ermöglicht und dies sogar bei überlappenden GC-Peaks. Bemerkenswert ist in diesem Zusammenhang, dass GC-Orbitrap-Systeme ein hohes Auflösungsvermögen (Massengenauigkeit unter 1 ppm) mit einer hohen Scanrate vereinen – entscheidend für die exakte Massenbestimmung und die korrekte Analyse sich überlappender Peaks. Außerdem können mit GC-Orbitrap präzise Isotopenverhältnismessungen durchgeführt werden, und zwar auch von einzelnen Spezies innerhalb von Gemischen. Schließlich werden die ermittelten Informationen (etwa Spitzenelutionszeiten und Strukturformeln) mithilfe von maschinellem Lernen und KI-gesteuerten Ansätzen analysiert, um so schrittweise die erforderlichen Struktur-Wirkungs-Beziehungen bestimmen zu können. Letztere Aufgabe wird in enger Zusammenarbeit mit dem Research Center Pharmaceutical Engineering (RCPE) (Prof. Khinast) durchgeführt werden.

Angestrebte Ergebnisse und Erkenntnisse

Durch die Abkehr von traditionellen Forschungskonzepten hin zu datengesteuerten Ansätzen wird ADVANCE einzigartige Erkenntnisse schaffen, die zweifellos zu einflussreichen und wegweisenden Veröffentlichungen führen werden. Die vorgeschlagene infrastrukturelle Einrichtung, die in der österreichischen akademischen Szene beispiellos ist, wird wesentlich zur Sichtbarkeit der Universität Graz und ihres Fachbereichs Chemie in der internationalen chemischen Forschungslandschaft beitragen. Darüber hinaus wird dies zweifellos auch zu zahlreichen (inter)nationalen Kooperationsmöglichkeiten führen. Aus pädagogischer Sicht wird ADVANCE Studierende mit aktuellen und aufkommenden Themen der Nachhaltigkeitsforschung und KI vertraut machen und eine neue Generation von „datengetriebenen“ Chemikern hervorbringen.

Abstract

Problems & challenges
The time-limited availability of fossil resources as well as its environmentally damaging effects urgently require a transition to a cleaner and more sustainable chemical industry. This necessitates the development of fundamentally new catalytic approaches to the efficient conversion of renewable resources (e.g., forestry, agricultural) into (novel) bio-based products but equally to the valorization of plastic waste-streams, which are an ever-growing environmental burden. However, with the inherent structure and composition of renewable starting materials and waste streams, and thereof-derived product streams, being often highly complex, the development of efficient catalytic conversion procedures is seriously hampered. This is further complicated by the difficult and tedious analysis of product streams. And indeed, with overlapping GC peaks and limited compound assignation libraries, the identity of many chemical components remains elusive. As a direct result the development of meaningful structure to catalytic activity relationships is very challenging.
Innovation & solutions
The ADVANCE proposal aims to set up an automated parallel reactor system capable of doing a multitude of catalytic methodologies. Analysis of the reaction mixtures will feature a) a classic GC-FID for rapid initial assessment of the reaction mixtures and b) the use of a specialist GC-Orbitrap system, a technology which allows for the unequivocal identification of chemical compounds and this even in the case of overlapping GC peaks. In this respect it is noteworthy that GC-Orbitrap systems combine a high resolving power with a high scan rate – these being crucial for exact mass determination (sub 1 ppm mass accuracy) and the correct analysis of overlapping peaks. Also, GC-Orbitrap enables precise isotope ratio measurements and this also of single species within mixtures. Finally, the established information (e.g., peak elution times, structural formulas) will be analyzed using machine learning and AI-driven approaches, that way gradually constructing the required structure-activity relationships. The latter task will be performed in close collaboration with the Research Center Pharmaceutical Engineering (RCPE) (Prof. Khinast).
Outcome & Impact
By moving away from traditional research concepts to data-driven approaches, ADVANCE will create unique insights that will undoubtedly lead to high-impact publications. The proposed setup, which is unprecedented in the Austrian academic scene, will significantly contribute to the visibility of University of Graz and its chemistry department on the international chemical research scene. Additionally, this will also undoubtedly lead to numerous (inter)national collaboration opportunities. From a pedagogical point of view, ADVANCE will expose students to current and emerging topics in sustainability research and AI and produce a new generation of data-driven chemists.

Projektkoordinator

- Universität Graz Institut für Chemie

Projektpartner

- Research Center Pharmaceutical Engineering GmbH