

[Akceptuje](#)

W ramach naszej witryny stosujemy pliki cookies w celu świadczenia państwu usług na najwyższym poziomie, w tym w sposób dostosowany do indywidualnych potrzeb. Korzystanie z witryny bez zmiany ustawień dotyczących cookies oznacza, że będą one zamieszczone w Państwa urządzeniu końcowym. Możecie Państwo dokonać w każdym czasie zmiany ustawień dotyczących cookies. Więcej szczegółów w naszej [Polityce Prywatności](#)

[Portal](#) [Informacje](#) [Katalog firm](#) [Praca](#) [Szkolenia](#) [Wydarzenia](#) [Porównania międzylaboratoryjne](#)
[Kontakt](#)



[Laboratoria](#)
[.net](#)
[Innowacje](#)
[Nauka](#)
[Technologie](#)



[Logowanie](#) [Rejestracja](#) [pl](#)

Newsletter

zapisz się

Naukowy styl życia

Nauka i biznes

- [Nowe technologie](#)
- [Felieton](#)
- [Tygodnik "Nature"](#)
- [Edukacja](#)
- [Artykuły](#)
- [Przemysł](#)

[Strona główna](#) > [Informacje](#)

Program komputerowy planujący skomplikowane syntezy chemiczne

Naukowcy "nauczyli" komputer planowania wieloetapowych syntez skomplikowanych związków organicznych. Opisane w "Nature" dokonanie polsko-amerykańskiego zespołu

otwiera drogę m.in. do szybszego i tańszego pozyskiwania leków.

Prace nad automatycznym programem, planującym syntezy organiczne, prowadzone były już od lat 60-tych XX wieku. Systemy ten nie były jednak w stanie „myśleć” dalej, niż jeden krok do przodu - nie nadawały się więc do planowania złożonych syntez związków organicznych. Zmienia to program "Chematica", przedstawiony na łamach "Nature".

Autorami dokonania jest grupa trzynastu naukowców z Instytutu Chemii Organicznej PAN i trojga z Northwestern University w USA. Pracami nad "Chematica" kierował od prawie 20 lat prof. Bartosz Grzybowski. Prace prowadził najpierw w ramach start-upu założonego na tym amerykańskim uniwersytecie, a ostatnio w Instytucie Chemii Organicznej PAN i koreańskim Institute for Basic Science.

Na przestrzeni lat naukowcy ci opracowali program komputerowy, pozwalający na stworzenie w zasadzie każdego związku chemicznego, który może przyjść chemikowi do głowy - nawet, jeśli wykonanie zdawało się niewykonalne lub bardzo trudne - opisuje w rozmowie z PAP prof. Grzybowski.

"Chematica+ umożliwia syntezę znanych lub nieznaną do tej pory związków. Dzięki Chematice+, metody ich syntezy można tworzyć szybciej i wydajniej, bo algorytm może dobrać bardziej dostępne surowce niezbędne do syntezy" - dodaje naukowiec. Podaje przykład różnego rodzaju związków, które co prawda występują naturalnie w przyrodzie - ale w ograniczonej ilości.

Wcześniej programy komputerowe wykorzystywane były tylko do prostych syntez, które równie dobrze chemicy mogli zaprojektować w ciągu kilku minut, i to bez pomocy komputera. "Jest jednak wiele związków, których powstanie wymaga aż kilkudziesięciu kroków syntezy. Tak jest na przykład z taksolem - lekiem na raka. Żeby go wykonać, trzeba się naprawdę natrudzić, bo planowanie syntezy złożonych związków w chemii jest jej najtrudniejszym działaniem" - podkreślił prof. Grzybowski.

Wskazał, że tego typu skomplikowanych syntez może się podjąć najwyżej około tysiąca bardzo dobrze wykwalifikowanych osób na świecie. Taka praca wymaga jednak miesięcy, a nawet lat. "System Chematica robi to zaledwie w ciągu kilku godzin i to w sposób bezbłędny, co potwierdzają opublikowane w Nature eksperymenty przeprowadzone we współpracy z grupami prof. Jacka Młynarskiego z ICHO i Milana Mrksicha z Northwestern - mówi badacz. Wskazuje że pojawiły się już pierwsze prace czołowych amerykańskich uniwersytetów, których autorzy zweryfikowali poprawność działania programu we własnych syntezach, np. do produkcji potencjalnych leków na COVID.

Algorytm nauczony jest również tworzenia nowych związków w taki sposób, by ich syntezy były przyjazne dla środowiska. To oznacza, że niezbędne do ich stworzenia komponenty czy też metody reakcji nie mogą być toksyczne - wyjaśnia naukowiec z PAN. "Chematica" jest też "sprytna": może syntezować np. leki w taki sposób, by obejść znane patenty - potrzebne związki powstają w sposób inny, niż jest to ujęte w zastrzeżonej procedurze; z innych składników.

„Oprócz leków Chematica+ radzi sobie też oczywiście z planowaniem syntez związków wykorzystywanych w innych działach przemysłu - pigmentów, feromonów, czy też związków używanych w nowoczesnej optoelektronice” - dodaje naukowiec.

Prof. Grzybowski mówi, że naukowcy pracowali nad takim programem praktycznie od momentu powstania komputerów. Miał on umożliwić planowanie skomplikowanych syntez chemicznych z pominięciem udziału człowieka. Jeszcze na początku XXI w. koledzy po fachu, z którymi rozmawiał prof. Grzybowski - byli przekonani, że takiego systemu nie da się opracować. Dlaczego? Bo system

musiałyby umieć naśladować „natchnione” myślenie chemika i działać w oparciu o olbrzymią liczbę reguł chemicznych, których jest ok. 100 tys.

"Komputer trzeba nauczyć nie tylko +myślenia+ (metodami sztucznej inteligencji), ale też zakodować mu wszystkie podstawowe reguły chemii. To są czasami bardzo skomplikowane reguły +inżynieryjne+, działające na poziomie atomów" - opisuje naukowiec.

Przypomniał on podziwiany przez ludzi na świecie program, który pokonał mistrza gry w GO, co niedawno również opisano w "Nature". "W porównaniu do GO, chemia syntetyczna jest dużo bardziej skomplikowana" - skomentował. I przypomniał, że nad wykonaniem programu, planującego skomplikowane syntezy chemiczne w trójmiarze, skupiali się m.in. najwięksi chemicy XX w., tacy jak Elias James Corey - laureat nagrody Nobla, Ivar Karl Ugi czy Carl Djerassi.

"Jeszcze gdy byłem doktorantem na Harvardzie, prof. E. J. Corey doradzał mi po własnych nieudanych próbach, by się przygotowaniem takiego systemu nie zajmować, bo to był - w jego ocenie - problem nie do rozwiązania. To było ponad 20 lat temu" - wspomina prof. Grzybowski.

Polski badacz - wbrew opinii części środowiska - nie porzucił pracy nad systemem, który od jego amerykańskich "początków" został już skomercjalizowany w ramach korporacji Merck. Obecnie korzysta z niego kilkanaście głównych korporacji farmaceutycznych i chemicznych na świecie. Jest też dostępny dla niektórych naukowców.

Źródło: pap.pl

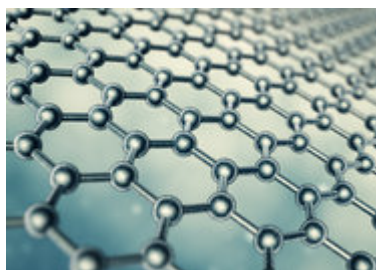
<http://laboratoria.net/aktualnosci/30077.html>



02-07-2024

[Ekran dotykowy bez problematycznego indu](#)

Tańsze i bardziej przyjazne środowisku.



02-07-2024

[Świat atomów i cząsteczek](#)

Jak dzięki różnym metodom obrazowania zobaczyć "całego słonia"



02-07-2024

[Żyjemy w czasach multitożsamości](#)

Ekspert o mediach społecznościowych.



02-07-2024

[Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy?](#)

Równość płci może mieć związek ze swobodą wyboru tego, co się je.



02-07-2024

[Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#)

Alarmuje Światowa Organizacja Zdrowia.



02-07-2024

[Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#)

Informuje "Nature".



02-07-2024

[Tancerze są mniej neurotyczni niż ogół populacji](#)

Jednocześnie są bardziej ugodowi i ekstrawertyczni.



02-07-2024

[Rząd planuje, aby minister mógł odwołać dyrektora NCBR](#)

Dyrektor Narodowego Centrum Badań i Rozwoju będzie mógł zostać odwołany.

Informacje dnia: [Ekrany dotykowe bez problematycznego indu](#) [Świat atomów i cząsteczek](#) [Żyjemy w czasach multitożsamości](#) [Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy?](#) [Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#) [Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#) [Ekrany dotykowe bez problematycznego indu](#) [Świat atomów i cząsteczek](#) [Żyjemy w czasach](#)

[multitożsamości](#) [Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy? Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#) [Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#) [Ekrany dotykowe bez problematycznego indu](#) [Świat atomów i cząsteczek](#) [Żyjemy w czasach multitożsamości](#) [Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy? Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#) [Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#)

Partnerzy