

[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](#)

Sztuczna inteligencja zbada bezpieczeństwo nieznanych nanocząstek

Program, który wykorzystuje sztuczną inteligencję do przewidywania toksyczności i właściwości nanocząstek tlenków metali przygotowują naukowcy z Gdańska. Dzięki

aplikacji nanoQSAR Toolbox można będzie wirtualnie przeszukiwać miliony nieznanych jeszcze świata materiałów, by znaleźć te o najlepszych właściwościach, które jednocześnie są bezpieczne dla zdrowia człowieka i dla środowiska.

Nanocząstki - w uproszczeniu mówiąc - to struktury o średnicy 1-100 nm (takich rozmiarów nie widać jeszcze pod mikroskopem optycznym). To zwykle układy połączonych ze sobą różnych cząsteczek chemicznych. Mogą przybierać niezwykle kształty - np. piłek, rurek, włókien, sześciątów, klatek, igiełek...

Właściwości nanocząstek są często zupełnie inne niż właściwości związków chemicznych, z których się składają. Możliwości projektowania nanocząstek są praktycznie nieograniczone. Dlatego nanomateriały - a więc materiały zbudowane z nanocząstek - są tak atrakcyjnym tematem do badań.

Prof. Tomasz Puzyn z Uniwersytetu Gdańskiego i spółki QSARLab - spin-offu założonego przez pracowników Wydziału Chemii UG - tłumaczy w rozmowie z portalem Nauka w Polsce, że wśród nanocząstek cieszącą się największym zainteresowaniem naukowców i przemysłu były dotąd nanocząstki tlenków metali, zwłaszcza tlenku tytanu, cynku i krzemu.

I tak ditlenek tytanu jest nadzieją w produkcji farb, ogniw fotowoltaicznych, ma świetne możliwości katalityczne, a także potencjał w zastosowaniach medycznych i kosmetykach. Pytanie, w co ten związek "przystroić" w skali nano, żeby najlepiej wykorzystać jego potencjał.

Teraz firmy, które korzystają z tlenku tytanu i mają nadzieję, że stosowane przez nie nanocząstki da się jeszcze udoskonalić, zyskują nowe narzędzie do poszukiwania nanocząstek o wymarzonych właściwościach.

Wykorzystując dostępne zbiory danych o właściwościach nanocząstek, zespół ze spółki QSARLab przygotował program o nazwie nanoQSAR Toolbox (w skrócie: nQTb) bazujący na sztucznej inteligencji, który prognozuje, jakie będą właściwości innych nanocząstek, również takich, które nigdy jeszcze nie powstały w żadnym laboratorium świata.

Program jest w stanie przewidzieć właściwości danego nanomateriału oraz sprawdzić, czy będzie on toksyczny i szkodliwy dla środowiska. A informacje takie będzie można uzyskać zanim jeszcze zacznie się pracę nad syntezą takiego układu. „Pozwoli to uniknąć niepotrzebnych kosztów i oszczędzić czas, eliminując błędy jeszcze przed ich popełnieniem” - komentuje prof. Puzyn. Na razie program jest w stanie przewidzieć właściwości nanocząstek na bazie ditlenku tytanu, a z czasem - również tlenku cynku i krzemu.

Do tej pory nowe nanocząstki przygotowywane były "empirycznie". "W laboratoriach syntetyzowano np. 5 nowych nanocząstek z tlenkiem tytanu i testowano ich właściwości, co trwało miesiącami czy latami. A teraz - dzięki naszej aplikacji - można będzie szybko przetestować w komputerze właściwości i wstępnie sprawdzić toksyczność 5 mln różnych nanocząstek" - opisuje naukowiec.

Prof. Puzyn zdradza, że jedno z rozwiązań znalezione dzięki modelom matematycznym zaimplementowanym w programie już wkrótce trafi do produkcji. "W urządzeniach wentylacyjnych stosuje się katalizatory z nanocząstkami tlenku tytanu. Pomagają one m.in. skuteczniej wychwytywać i niszczyć wirusy z powietrza" - opisuje. Stosowane jednak dotąd nanocząstki, aby lepiej działały, należało naświetlać światłem UV, co nie było rozwiązaniem optymalnym. Poszukiwano więc nanocząstek, które działałyby równie skutecznie, ale oświetlone światłem widzialnym. Takie nanocząstki - dzięki programowi z Gdańska - już się udało znaleźć i wstępnie przetestować. Ich wdrożeniem do produkcji zajmuje się już jedna z polskich firm - uśmiecha się prof. Puzyn.

Badacze współpracują też z Chińską Akademią Nauk w poszukiwaniach nanocząstek, które wykorzystywane będą w transporcie leków do mózgu w terapii chorób neurodegeneracyjnych (np. choroba Alzheimera, Parkinsona).

Naukowiec zaznacza, że prognozowanie właściwości nanocząstek to o wiele trudniejsze zadanie niż prognozowanie właściwości „klasycznych” związków chemicznych. Nanocząstki bowiem mogą zmieniać swoją budowę i kształt w zależności od warunków, w jakich będą się znajdować. I tak np. w różnych warunkach nanocząstki mogą łączyć się w większe aglomeraty albo rozpadać na mniejsze części. A to prowadzi do zmian w ich właściwościach. Naukowiec podaje przykład, że w jamie ustnej, gdzie pH jest wyższe, ta sama nanocząstka może mieć zupełnie inne właściwości niż w żołądku, gdzie odczyn jest silnie kwaśny.

Takiego zaś rodzaju informacje trzeba uwzględnić, jeśli chce się prognozować toksyczność danej nanocząstki i możliwości jej użycia w konkretnych zastosowaniach. I nad tym właśnie pracują polscy naukowcy.

O wyzwaniach związanych z opisem struktury nanocząstek na potrzeby informatyki predyktywnej zespół z UG i QSAR Lab wspólnie z naukowcami z kilku ośrodków na świecie pisze w artykule opublikowanym właśnie w „Nature Nanotechnology” <https://www.nature.com/articles/s41565-022-01173-6>.

Na razie ludzka wyobraźnia ogranicza ludzi w projektowaniu nanocząstek o niezwykłych właściwościach. Programy wykorzystujące sztuczną inteligencję i uczenie maszynowe mają wspomóc ludzką wyobraźnię i umożliwić szybsze wymyślanie i testowanie nieznanymi nanocząstek o niewyobrażalnych właściwościach. Dzięki polskim naukowcom wspomaganie wyobraźni zyskują badacze projektujący nowe nanomateriały.

Prace nad aplikacją możliwe są dzięki dwóm grantom z Narodowego Centrum Badań i Rozwoju.

Źródło: pap.pl

<http://laboratoria.net/aktualnosci/31478.html>



23-12-2024

Zdrowych i Pogodnych Świąt Bożego Narodzenia

Najserdeczniejsze życzenia zdrowych, radosnych i pogodnych Świąt Bożego Narodzenia.



23-12-2024

Zapraszamy na wyjątkową edycję Targów PCI Days 2025!

Odbędą się one w dniach 11-13 czerwca w Expo XXI w Warszawie.



23-12-2024

Zawał już dawno przestał być chorobą mężczyzn

Kobiety często nie czują typowych bólów co skutkuje gorszymi wynikami.



23-12-2024

Świąteczna apteczka

Szczypta umiaru i coś na zgage



23-12-2024

[Radioaktywny pluton się nie ukryje](#)

Naukowcy znajdują go nawet na lodowcach



23-12-2024

[Złoty Medal Chemii przyznany po raz 14](#)

Wyłoniono autorów najlepszych prac licencjackich i inżynierskich.



23-12-2024

[Polacy są umiarkowanie prospołeczni](#)

Polacy chcą wspierać materialnie.



23-12-2024

Związek między traumą z dzieciństwa a zespołem jelita drażliwego

Pokazały badania polskich naukowców.

Informacje dnia: [Zdrowych i Pogodnych Świąt Bożego Narodzenia Zapraszamy na wyjątkową edycję Targów PCI Days 2025!](#) [Zawał już dawno przestał być chorobą mężczyzn](#) [Świąteczna apteczka](#) [Radioaktywny pluton się nie ukryje](#) [Złoty Medal Chemii przyznany po raz 14](#) [Zdrowych i Pogodnych Świąt Bożego Narodzenia Zapraszamy na wyjątkową edycję Targów PCI Days 2025!](#) [Zawał już dawno przestał być chorobą mężczyzn](#) [Świąteczna apteczka](#) [Radioaktywny pluton się nie ukryje](#) [Złoty Medal Chemii przyznany po raz 14](#) [Zdrowych i Pogodnych Świąt Bożego Narodzenia Zapraszamy na wyjątkową edycję Targów PCI Days 2025!](#) [Zawał już dawno przestał być chorobą mężczyzn](#) [Świąteczna apteczka](#) [Radioaktywny pluton się nie ukryje](#) [Złoty Medal Chemii przyznany po raz 14](#)

Partnerzy