

[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](#)

Polacy współautorami nowej metody badania reakcji chemicznych

Nową metodę badania reakcji chemicznych, która może odmienić sposób pracy w laboratoriach na całym świecie, opracował międzynarodowy zespół badaczy, w którym

znalazło się kilku Polaków. Wyniki swoich prac naukowcy opublikowali w czasopiśmie „Nature”.

Zespół działający w ramach Institute for Basic Science (IBS) w Ulsan (Korea Południowa) stworzył własną, niedrogą platformę robotyczną, która dzięki zastosowaniu algorytmów sztucznej inteligencji pozwala w rekordowym tempie przebadać tysiące reakcji chemicznych i generować szczegółowe mapy ich przebiegu.

- Reakcje chemiczne polegają na tym, że łączy się ze sobą pewne substraty i w efekcie otrzymuje się produkt - wyjaśnił w rozmowie z PAP jeden z autorów badania, Rafał Frydrych z Center for Algorithmic and Robotized Synthesis IBS. Jednak na to, co dokładnie powstanie, wpływają nie tylko same składniki, ale też dodatkowe czynniki, takie jak temperatura, ciśnienie czy obecność katalizatorów.

Normalnie sprawdzenie wszystkich możliwych kombinacji tych czynników, czyli przetestowanie różnych stężeń substratów, różnych temperatur i różnych katalizatorów, zajmowałoby całe lata. Nowe rozwiązanie pozwala przeprowadzić setki reakcji naraz w osobnych, małych próbkach. W efekcie cały proces trwa zaledwie kilka godzin. Każda próbka odpowiada innemu zestawowi warunków, a razem tworzą one pełną mapę reakcji, którą naukowcy nazwali hiperprzestrzenią.

- Pokazaliśmy, że reakcje nie przebiegają liniowo, jak w prostym równaniu $A + B = C$. W rzeczywistości tworzą całą sieć powiązań między poszczególnymi elementami, a dzięki naszej metodzie każdy chemik może przełączać się między nimi, zmieniając jedynie warunki początkowe - powiedział Frydrych.

Jak wytłumaczył, do tej pory naukowcy w laboratoriach mogli analizować tylko niewielką część możliwych warunków reakcji, ponieważ klasyczne techniki analityczne, takie jak spektroskopia rezonansu magnetycznego czy chromatografia cieczowa - choć bardzo dokładne - są jednocześnie czasochłonne i kosztowne.

Dlatego zespół kierowany przez kolejnego Polaka z IBS - prof. Bartosza Grzybowski - zbudował od podstaw urządzenie zdolne nie tylko do równoległego prowadzenia setek reakcji, ale także zmienił metodę ich testowania. Wykorzystał w tym celu szybkie pomiary optyczne.

- Każda próbka jest analizowana przy pomocy widma światła w zakresie UV-Vis, a algorytmy komputerowe określają, jakie produkty powstały w reakcji i w jakich ilościach. Takie metody optyczne są tanie i szybkie, a algorytm informuje nas, czy nasza wiedza o przestrzeni danej reakcji jest pełna - powiedział Rafał Frydrych.

W ciągu jednego roku twórcom urządzenia udało się przeanalizować dobrze znane reakcje w zupełnie nowy sposób, odkrywając dodatkowe produkty i powiązania, które wcześniej umykały chemikom. Np. w klasycznej reakcji Hantzsch, stosowanej od 150 lat metodzie syntezy związków pirydynowych, naukowcy odkryli dziewięć nowych związków i produktów pośrednich. Co więcej, wykazali, że prostą zmianą proporcji substratów można „przełączać” całą sieć reakcji tak, by głównym produktem była jedna z trzech różnych substancji. Każdą z nich udało się uzyskiwać z wysoką wydajnością, przekraczającą 60 proc., i to bez wprowadzania nowych odczynników - wystarczyło odpowiednio ustawić początkowe warunki reakcji.

Badacze zauważyli również, że w przypadku reakcji wieloskładnikowych przejścia między produktami są zazwyczaj stopniowe, a nie gwałtowne. To ważna wskazówka dla chemików, oznacza bowiem, że zamiast badać wszystkie możliwe punkty hiperprzestrzeni reakcji, czyli konkretne

zestawy warunków - wystarczy sprawdzać tylko co któryś z nich i uzupełniać mapę przy pomocy algorytmów. Dzięki temu można zaoszczędzić czas i zasoby.

W jeszcze innym eksperymencie zespół badał wpływ składu katalizatora na przebieg reakcji. Tu mapy okazały się znacznie bardziej skomplikowane: pojawiało się w nich wiele lokalnych maksimumów, czyli warunków, w których reakcja dawała najlepsze rezultaty. Co więcej, nawet drobne zmiany w składzie katalizatora potrafiły zupełnie zmienić kierunek reakcji.

- To pokazuje, że reakcje, w których zmieniamy kompozycje katalizatora, mają inny charakter, ponieważ wpływamy na bariery aktywacji. Dlatego mapa dystrybucji wydajności, którą tworzą, jest znacznie bardziej skomplikowana - wyjaśnił Rafał Frydrych.

Ideę działania swojego urządzenia autorzy porównali do elektroniki. Tak, jak można „podglądać” jakiś nieznaną układ scalony, badając sygnały na wejściu i wyjściu - tak oni odtworzyli połączenia w chemicznych sieciach reakcji na podstawie warunków początkowych i końcowych produktów. To zupełnie nowe spojrzenie na chemię - zamiast jednej strzałki prowadzącej od substratu do produktu - otrzymujemy całą sieć powiązań, którą można świadomie sterować.

Zdaniem Rafała Frydrycha badanie, którym uczestniczył, ma ważny wymiar praktyczny. Dzięki mapom reakcji można lepiej oszczędzać surowce i energię, a jednocześnie z tych samych zestawów substratów wytwarzać różne potrzebne związki: od leków, przez barwniki, po materiały elektroniczne. Takie podejście, znane dotąd z biologii, gdzie sieci metaboliczne potrafią przełączać się w zależności od warunków, po raz pierwszy udało się świadomie zastosować w chemii.

Plany konstrukcyjne swojej platformy oraz pełne oprogramowanie badacze udostępnili w otwartym dostępie, tak, aby każde laboratorium mogło skorzystać z ich technologii i zbudować urządzenie samodzielnie. - Opracowaliśmy je od podstaw z myślą o niskim koszcie. Dzięki temu może je odtworzyć każdy zespół badawczy na świecie i prowadzić nawet tysiąc reakcji dziennie - podkreślił współautor publikacji.

- To narzędzie ma ułatwiać pracę chemikom. Dostają mapy reakcji i mogą na nie spojrzeć w nowy sposób: gdzie są różne produkty, jak je osiągnąć, jak opisać przestrzeń matematycznie. Dane z urządzenia są spójne i powtarzalne, więc nadają się też do algorytmów uczenia maszynowego - dodał.

Publikacja, której współautorami są m.in. Bartosz A. Grzybowski, Rafał Frydrych i Daniel Matuszczyk, jest pierwszym tak kompleksowym podejściem do badania reakcji w tzw. hiperprzestrzeniach warunków. Naukowcy przekonują, że ich metoda pozwoli usystematyzować i przyspieszyć odkrywanie nowych reakcji oraz lepiej rozumieć te znane od dawna. To otwiera drogę do bardziej przewidywalnych badań, lepszego wykorzystania danych i zastosowania metod sztucznej inteligencji w planowaniu eksperymentów.

Źródło: pap.pl

<https://laboratoria.net/aktualnosc/32626.html>



21-05-2026

Nowy wzór elektronicznej legitymacji studenckiej

Resort nauki udostępnił go.



21-05-2026

Kleszcz to tylko pośrednik

Krętki Borrelia to częściowo „prezent” od gryzoni i ptaków.



21-05-2026

Pod względem leczenia czerniaka Polska w czołówce Europy

W ciągu 8 lat przeżywalność pacjentów z tym nowotworem wzrosła o 20 proc.



21-05-2026

Przyszłość pszczół zależy od ochrony ich

[naturalnych siedlisk](#)

Bez zapylaczy nie ma części produkcji żywności.



21-05-2026

[Powstała niewidzialna elektroda dla podczerwieni](#)

Elektrodę, która przepuszcza aż 94 proc. promieniowania podczerwonego.



21-05-2026

[Choroby serca mogą zaczynać się już w czasie życia płodowego](#)

To wynik badania, w którym brało ponad tysiąc par matka-dziecko.



21-05-2026

[Problemy ze snem związane z ryzykiem choroby Alzheimera u kobiet](#)

Informuje „Journal of Prevention of Alzheimer's Disease”.



21-05-2026

Zespół policystycznych jajników zmienił nazwę

Informuje "The Lancet".

Informacje dnia: [Nowy wzór elektronicznej legitymacji studenckiej](#) [Kleszcz to tylko pośrednik](#) [Pod względem leczenia czerniaka](#) [Polska w czołówce Europy](#) [Przyszłość pszczół zależy od ochrony ich naturalnych siedlisk](#) [Powstała niewidzialna elektroda dla podczerwieni](#) [Choroby serca mogą zaczynać się już w czasie życia płodowego](#) [Nowy wzór elektronicznej legitymacji studenckiej](#) [Kleszcz to tylko pośrednik](#) [Pod względem leczenia czerniaka](#) [Polska w czołówce Europy](#) [Przyszłość pszczół zależy od ochrony ich naturalnych siedlisk](#) [Powstała niewidzialna elektroda dla podczerwieni](#) [Choroby serca mogą zaczynać się już w czasie życia płodowego](#) [Nowy wzór elektronicznej legitymacji studenckiej](#) [Kleszcz to tylko pośrednik](#) [Pod względem leczenia czerniaka](#) [Polska w czołówce Europy](#) [Przyszłość pszczół zależy od ochrony ich naturalnych siedlisk](#) [Powstała niewidzialna elektroda dla podczerwieni](#) [Choroby serca mogą zaczynać się już w czasie życia płodowego](#)

Partnerzy