

### [Akceptuję](#)

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](#)



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

[Strona główna](#) > [Nowe technologie](#)

## Systemy uczące się mogą ulepszyć projektowanie molekularne



Na różnych etapach badań nad tworzeniem efektywnych nanosystemów wykorzystywanych w produkcji molekularnej użyteczna byłaby możliwość oszacowania właściwości i reakcji układów atomów o różnej wielkości. W przypadku nierelatywistycznej mechaniki kwantowej, takich informacji dostarcza równanie Schrödingera, ale tylko w przypadku analitycznych obliczeń dla atomu wodoru oraz jonów z jednym elektronem. Dla większych atomów i cząsteczek, rozwiązania liczbowe wymagają pewnych kompromisów pomiędzy wykonalnością obliczeń a ich dokładnością.

Ostatnie prace naukowców z Argonne National Laboratory sugerują, że systemy uczące się mogą być efektywną alternatywą dla obliczeń liczbowych.

Pakiet algorytmów sztucznej inteligencji może stać się podstawowym zestawem wykorzystywanym w chemii. Dzięki oprogramowaniu komputerowemu można obecnie szybko przewidzieć właściwości cząsteczek na podstawie ich przypuszczalnej struktury. Tego typu postęp powinien umożliwić chemikom projektowanie nowych cząsteczek na komputerach zamiast przeprowadzania przeciągających się w nieskończoność badań na zasadzie prób i błędów.

Głównym przeciwnikiem komputerowego wspomaganie jest równanie Schrödingera. Teoretycznie, dzięki temu matematycznemu potworowi można obliczyć prawdopodobieństwo, że w danym atomie lub cząsteczce elektrony będą znajdować się w określonym położeniu, które determinuje właściwości chemiczne i fizyczne. Sytuacja komplikuje się jednak przy większej ilości elektronów i protonów, więc dokładne rozwiązania są możliwe jedynie dla najprostszych systemów atomów.

Naukowcy opracowali model komputerowego systemu uczącego się do obliczenia energii atomizacji (energia potrzebna do rozbicia izolowanej cząsteczki na swobodne atomy) i zastosowali ten model do bazy danych utworzonej z 7165 mikroskopijnych cząsteczek organicznych o znanej strukturze i energii wiązań, oraz zawierających do siedmiu atomów węgla, azotu, tlenu, lub siarki, a także odpowiednią ilość atomów wodoru niezbędnych do nasycenia wiązań. Wyniki badań wykazały, iż przeciętnie błąd obliczeń wynosi zaledwie 9,9 kcal/mol, porównywalnie do stopnia dokładności metod opartych na równaniu Schrödingera, z tą różnicą, że obliczenia te wykonano w ułamkach sekundy, a nie w ciągu godzin. Naukowcy sugerują, że ich metoda może pozwolić na racjonalne projektowanie cząsteczek lub obliczeń dynamiki molekularnej systemów atomów, które są poddawane reakcjom chemicznym.

Źródło: [www.nanonet.pl](http://www.nanonet.pl)

<https://laboratoria.net/technologie/13933.html>

**Informacje dnia:** [Stypendia ministra nauki za znaczące osiągnięcia Doktor z TikToka: fajnie by było, gdyby w sieci to jednak naukowcy mówili o nauce](#) [Kierownik wyprawy polarnej](#) [Mikrolasery mogą wykrywać pojedyncze cząsteczki](#) [Duże teleskopy sfotografowały dwie formujące się planety](#) [Bakteriofagi mogą chronić żywność przed salmonellą](#) [Stypendia ministra nauki za znaczące osiągnięcia Doktor z TikToka: fajnie by było, gdyby w sieci to jednak naukowcy mówili o nauce](#) [Kierownik wyprawy polarnej](#) [Mikrolasery mogą wykrywać pojedyncze cząsteczki](#) [Duże teleskopy sfotografowały dwie formujące się planety](#) [Bakteriofagi mogą chronić żywność przed salmonellą](#) [Stypendia ministra nauki za znaczące osiągnięcia Doktor z TikToka: fajnie by było, gdyby w sieci to jednak naukowcy mówili o nauce](#) [Kierownik wyprawy polarnej](#) [Mikrolasery mogą wykrywać pojedyncze cząsteczki](#) [Duże teleskopy sfotografowały dwie formujące się planety](#) [Bakteriofagi mogą chronić żywność przed salmonellą](#)

**Partnerzy**