

### [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](#)

## Sposób na recykling odpadów chemicznych?

Potężny algorytm komputerowy przeczesał miliardy możliwych reakcji chemicznych i pokazał, jak ze związków chemicznych traktowanych dotąd jako odpady przemysłowe produkować można ok. 300 leków - opisują w publikacji w "Nature" badacze z zespołu prof. Bartosza Grzybowski.

W przemyśle chemicznym, farmaceutycznym, fabrykach leków, biodiesla albo np. zakładach zajmujących się recyklingiem przeprowadza się na masową skalę reakcje chemiczne. Oprócz substancji pożądaných powstają tam też tony niepotrzebnych związków chemicznych, których nie ma potem jak utylizować.

Prof. Bartosz Grzybowski (z Allchemy Inc. ale i z Instytutu Chemii Organicznej PAN oraz Uniwersytetu UNIST w Korei Płd.) w rozmowie z PAP podaje przykład gliceryny, która powstaje przy produkcji biopaliw czy fenolu z kopalni węgla. "Dziesiątki tysięcy ton takich substancji nieraz zalegają całymi dekadami w cysternach i nie wiadomo, jak się ich pozbyć bez szkody dla środowiska" - opisuje.

Dotąd takie substancje traktowane były często jako odpady, ale w przyszłości wcale tak być nie musi. Mogą one służyć jako składniki w produkcji kolejnych cennych związków chemicznych.

Zespół prof. Grzybowskiego przejrzał katalogi firm z całego świata i wybrał ok. 200 typów związków chemicznych, które tam powstają, a są teraz traktowane jako odpady. A następnie wskazał te chemikalia zaprojektowanemu przez siebie programowi Allchemy. Allchemy - to własność amerykańskiej spółki założonej przez prof. Grzybowskiego i dr Sarę Szymkuć - gromadzi gigantyczną wiedzę o różnych typach reakcji chemicznych - z uwzględnieniem warunków, w jakich te przemiany zachodzą. Aby przygotować program Allchemy, trzeba było wykorzystać zaawansowaną wiedzę chemiczną i wykorzystać możliwości sztucznej inteligencji.

Maszyna wirtualnie przetestowała miliardy reakcji, jakie mogłyby zachodzić między substancjami "odpadowymi". Produkt jednej reakcji może następnie służyć jako składnik do kolejnej, stąd tak duża liczba kombinacji. Czasem wspomagać się można też było łatwo dostępnymi na rynku substratami. Okazało się, że z zadanych związków można przygotować - w nieskomplikowanych warunkach - mnóstwo pożądaných na rynku produktów: w tym 300 różnych leków czy związki przydatne w rolnictwie.

I tak w publikacji w "Nature" badacze podają, jak ze składników, które wydawały się dotąd odpadami, można wyprodukować m.in. ibuprofen (związek przeciwbólowy), carvedilol i valsartan (stosowany w leczeniu nadciśnienia i chorób serca), mirabegron (pomocny w leczeniu chorób pęcherza), czy dofetylid (przeciw arytmii).

Aby zademonstrować, że leki rzeczywiście da się produkować z odpadów, zespół rozpoczął współpracę z inną amerykańską firmą - produkującą niewielkie reaktory chemiczne. Firma przeprowadziła syntezę zgodnie z przepisem przygotowanym przez algorytm i wyprodukowała z odpadów kluczowe składniki leków przydatnych w ratowaniu pacjentów pod respiratorami - choćby w COVID-19 (cisatracurium, midazolam, propofol). "Jeden z leków przygotowanych w taki sposób przez tę firmę czeka teraz na zatwierdzenie ze strony amerykańskiej rządowej agencji Food and Drug Administration" - informuje prof. Grzybowski.

Naukowiec pytany, czy odpady nie zawierają zbyt wiele zanieczyszczeń czy substancji szkodliwych, aby produkować z nich leki, odpowiada, że nie. Tłumaczy, że firmy farmaceutyczne wiedzą, jak oczyszczać związki chemiczne do produkcji leków i proces oczyszczania jest zawsze uwzględniony w procesie produkcji leku, tak, by w produkcie końcowym nie znalazły się żadne substancje niepożądane.

Tzw. chemia cyrkularna - gdzie produkty jednych reakcji służą jako składniki do kolejnych reakcji - to podejście do utylizacji odpadów chemicznych zalecane w choćby w dokumentach Unii Europejskiej. Dotąd jednak trudno było wymyślić, jak z odpadów chemicznych zrobić użytek: reakcje trzeba było projektować ręcznie, "na kartce". Teraz zaś, dzięki ogromnej możliwości obliczeniowej dawanej

przez komputery, otwiera się nowy wszechświat możliwości. Można szybko przeczesać ogromne zasoby danych i znacznie szybciej znajdować pomysły na wykorzystanie kłopotliwych związków chemicznych.

Szukanie zastosowań dla substancji szkodliwych to tylko jedno z zastosowań programu Allchemy. Dwa lata temu zespół prof. Grzybowskiego na łamach "Science" dzięki Allchemy wskazał chemiczne drzewo początków życia - pokazał, jak z prostych związków chemicznych, które mogły być dostępne na Ziemi mogło powstać życie.

Prof. Grzybowski jest też autorem programu "Chematica", który podobnie jak Allchemy, korzystając z ogromnej bazy wiedzy o chemii organicznej, potrafi wskazać różne sposoby dojścia do zadanych z góry produktów. Program ten był bohaterem innej publikacji w "Nature".

Źródło: pap.pl

<http://laboratoria.net/aktualnosci/31278.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 zgagę



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**