

[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 nieznanymi 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 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