Od alchemii do autonomicznych laboratoriów: ewolucja sprawczości w chemii w kontekście książki The Age of Alchemy autorstwa Kit Chapman.



AUTOR

Fundacja Dobre Państwo

STRESZCZENIE / ABSTRACT

Artykuł analizuje fundamentalną zmianę paradygmatu w chemii – przejście od bezpośredniego projektowania konkretnych cząsteczek do tworzenia systemów i procedur ich poszukiwania. Autor wskazuje, że współczesna chemia obliczeniowa i autonomiczna zastępuje klasyczny projekt racjonalny iteracyjnymi pętlami poznawczymi. Kluczowym przykładem jest ewolucja kierowana enzymów Frances Arnold, która zamiast pełnej predykcji strukturalnej wykorzystuje mechanizm wariacji i selekcji do optymalizacji białek w ogromnych przestrzeniach konformacyjnych. Ta zmiana filozoficzna przesuwa rolę chemika z poziomu wykonawcy konkretnego projektu na poziom architekta reguł generowania i wyboru rozwiązań, gdzie materia sama staje się operatorem obliczeniowym w procesie dochodzenia do wiedzy.

The article analyzes a fundamental paradigm shift in chemistry—the transition from the direct design of specific molecules to the creation of systems and procedures for searching for them. The author indicates that modern computational and autonomous chemistry replaces classical rational design with iterative cognitive loops. A key example is Frances Arnold's directed evolution of enzymes, which utilizes a mechanism of variation and selection to optimize proteins in vast conformational spaces instead of full structural prediction. This philosophical shift moves the chemist's role from the level of an executor of a specific project to that of an architect of rules for generating and selecting solutions, where matter itself becomes a computational operator in the process of acquiring knowledge.

Artykuł analizuje fundamentalną zmianę paradygmatu w chemii: przejście od projektowania konkretnych struktur molekularnych ku tworzeniu autonomicznych systemów ich poszukiwania. Autor stawia tezę, że we współczesnej nauce kluczem do sukcesu nie jest już pełna predykcja właściwości materii, lecz budowa wydajnych pętli poznawczych (tzw. self-driving laboratories), które łączą sztuczną inteligencję z automatyczną weryfikacją eksperymentalną. Przegląd takich metod jak ewolucja kierowana, chemia „click" czy computational protein design pokazuje, że rola chemika przesuwa się z poziomu bezpośredniego konstruktora na poziom architekta procedur i kryteriów sukcesu. Tekst podkreśla, że choć algorytmy potrafią błyskawicznie przeszukiwać ogromne przestrzenie możliwości, to ostatecznym arbitrem pozostaje materialna konieczność – rzeczywistość fizyczna, która może odrzucić nawet najdoskonalszy model teoretyczny. Tym samym współczesna chemia staje się nauką hybrydową, w której największą wartością nie jest pojedyncza receptura, lecz rygorystyczne sprzężenie zwrotne między teorią a błędem.

SŁOWA KLUCZOWE

autonomiczne laboratoria | ewolucja kierowana enzymów | chemia click | projektowanie białek | bioortogonalna chemia | self-driving laboratories | aktywne uczenie | przestrzeń konformacyjna | computational protein design | AlphaFold | pętla poznawcza | provenance danych | funkcja celu | krajobraz dopasowania | epistemiczna sprawczość

Projektowanie procedury zamiast konkretnego rozwiązania

Gdy chemia uczy się szukać: ewolucja kierowana, chemia "click", projektowanie białek i autonomiczne laboratorium

Historia nauki prowadziła od człowieka, który potrafił zmieniać materię, nie wiedząc jeszcze dokładnie, czym ona jest, do badacza zdolnego zaprojektować strukturę cząsteczki przed jej otrzymaniem. Na tym jednak ewolucja chemicznej sprawczości się nie kończy. W ostatnich dekadach nastąpiło przesunięcie jeszcze subtelniejsze: chemik coraz rzadziej projektuje

bezpośrednio pojedyncze rozwiązanie, a częściej tworzy procedurę jego poszukiwania. Jest to zmiana epistemologicznie głęboka. Alchemik szukał właściwej receptury; chemik klasyczny ustalał mechanizm; chemik syntetyczny konstruował określoną cząsteczkę; współczesna chemia obliczeniowa, ewolucyjna i autonomiczna budują natomiast systemy, które generują warianty, selekcjonują je na podstawie wyników i wykorzystują te dane do podejmowania kolejnych decyzji. Przedmiotem projektowania staje się zatem nie tylko materia, lecz również proces dochodzenia do wiedzy o materii.

Autor książki buduje finał tej historii wokół paradoksu spełnionego marzenia o transmutacji: fizyka jądrowa dowiodła, że przemiana pierwiastków jest możliwa, choć odbywa się na poziomie zupełnie innym niż przypuszczali alchemicy i pozostaje ekonomicznie nieprzydatna w produkcji złota. Współczesny etap rozwoju chemii pozwala sformułować analogiczny paradoks epistemiczny.

Człowiek marzył przez tysiąclecia o poznaniu sekretnej receptury natury. Dziś okazuje się, że skuteczniejszą strategią nie jest posiadanie jednej idealnej formuły, lecz stworzenie systemu zdolnego przeszukiwać ogromną przestrzeń możliwych rozwiązań szybciej, dokładniej i bardziej selektywnie niż pojedynczy badacz. Jedną z najbardziej eleganckich realizacji tej zasady jest ewolucja kierowana enzymów. Klasyczny projekt racjonalny zakładałby, że chemik powinien znać strukturę enzymu, mechanizm katalizy oraz wpływ każdej mutacji, aby świadomie zaprojektować lepszy wariant. Problem polega na tym, że białko jest układem o tak dużej złożoności konformacyjnej i energetycznej, iż pełne przewidzenie skutków nawet pojedynczej zmiany aminokwasu pozostaje trudne, a interakcje między wieloma mutacjami bywają nieliniowe.

Frances Arnold wykorzystała strategię bliższą biologicznemu mechanizmowi ewolucji: generowanie zmienności, eksperymentalną selekcję najlepszych wariantów, ponowne mutowanie wybranych sekwencji i powtarzanie cyklu. Za rozwój kierowanej ewolucji enzymów otrzymała połowę Nagrody Nobla w dziedzinie chemii w 2018 roku. Komitet Noblowski podkreślał, że metoda ta umożliwia tworzenie biokatalizatorów służących m.in. produkcji leków i paliw, w tym katalizujących reakcje niewystępujące w naturalnym repertuarze enzymów. Znaczenie ewolucji kierowanej wykracza jednak poza konkretny zestaw otrzymanych białek.

Metoda ta zmienia relację pomiędzy teorią a eksperymentem. Nie wymaga od badacza znajomości kompletnej mapy zależności między sekwencją aminokwasów, strukturą białka a jego aktywnością przed rozpoczęciem pracy. Wystarczy, że potrafi on generować różnorodność i skonstruować test poprawnie rozpoznający pożądaną funkcję. Wiedza o mechanizmie pozostaje cenna – pomaga zawężać obszar mutacji i interpretować wyniki – lecz nie jest warunkiem pełnej predykcji każdego kroku. Badacz wykorzystuje selekcję jako operator obliczeniowy wykonywany przez rzeczywistą materię.

Można to ująć w języku teorii optymalizacji: sekwencja białka określa punkt w ogromnej przestrzeni możliwych kombinacji, a jej właściwości katalityczne tworzą rodzaj krajobrazu dopasowania. Chemik nie zna pełnej topografii tego terenu, lecz generuje sąsiednie warianty, mierzy ich własności i wybiera korzystniejsze. Nie potrzebuje mapy całego obszaru, aby wspinać się ku regionom lepszego działania. Problem pozostaje trudny – lokalne maksimum nie musi być globalnym, mutacje mogą wykazywać epistazę, a przejście do korzystnego regionu może wymagać zmian przejściowo neutralnych lub niekorzystnych. Mimo to strategia okazuje się niezwykle skuteczna, ponieważ zastępuje wymóg kompletnej predykcji iteracyjnym sprzężeniem wariacja-pomiar-selekcja. Chemia zaczęła wykorzystywać ewolucję nie tylko jako teorię wyjaśniającą historię życia, lecz jako metodę inżynieryjną.

Jest to fundamentalna zmiana filozoficzna. Klasyczna inżynieria tworzy projekt od góry: najpierw określa strukturę, następnie ją wykonuje. Ewolucja kierowana działa częściowo od dołu: badacz definiuje przestrzeń wariacji oraz kryterium sukcesu, natomiast konkretną strukturę znajduje iteracyjny proces selekcji. Kontrola człowieka przesuwa się zatem z poziomu projektowania każdego szczegółu na poziom projektowania reguł generowania i wyboru tych szczegółów.

Od selekcji darwinowskiej do niezawodności chemii click

Analogiczna logika przejawia się w metodzie fagowego prezentowania peptydów i przeciwciał, rozwijanej przez George'a Smitha i Gregory'ego Wintera, za którą w 2018 roku przyznano Nagrodę Nobla. Biblioteki zawierające ogromną liczbę wariantów białek lub peptydów wystawia się na kontakt z określonym celem molekularnym, a następnie wybiera i namnaża najlepiej wiążące egzemplarze. Ponieważ informacja genetyczna o strukturze białka pozostaje fizycznie powiązana z prezentującym ją fagiem, selekcja funkcji prowadzi jednocześnie do selekcji instrukcji produkcyjnej. System ten przypomina w miniaturze proces darwinowski, z tą różnicą, że to człowiek definiuje środowisko selekcyjne i pożądany cel. W tym miejscu historia chemii wykonuje interesujący zwrot.

O ile alchemik przechowywał recepturę produktu w tajnym tekście, o tyle w fagowym display „receptura” molekularna jest zakodowana w materiale genetycznym systemu, który sam uczestniczy w procedurze selekcji. Informacja o sposobie budowy cząsteczki zostaje fizycznie związana z jej funkcją, co pozwala przeszukiwać biblioteki o skali nieosiągalnej dla ręcznego badania pojedynczych struktur. Zamiast wybierać cząsteczkę po cząsteczce, konstruuje się konkurencję, z której pożądana własność wyłania zwycięzców. Ta sama filozofia upraszczania

przestrzeni chemicznej przyjęła inną postać w chemii „click". Synteza organiczna XX wieku osiągnęła zdolność budowania niezwykle złożonych struktur, lecz ceną były często wieloetapowe sekwencje reakcji, wrażliwość na warunki, konieczność stosowania grup ochronnych oraz trudne oczyszczanie, co skutkowało spadkiem wydajności z każdym kolejnym etapem. Barry Sharpless zaproponował zmianę myślenia: zamiast traktować maksymalną złożoność konstrukcyjną jako wartość samą w sobie, warto rozwijać zestaw reakcji niezawodnych, selektywnych, wydajnych i modułowych, generujących minimum produktów ubocznych. Morten Meldal i Sharpless opracowali na początku XXI wieku miedzią katalizowaną cykloaddycję azydek-alkin, która stała się modelowym przykładem tej strategii. Za rozwój chemii „click" oraz bioortogonalnej chemii Carolyn Bertozzi cała trójka otrzymała Nagrodę Nobla w 2022 roku.

Znaczenie tej idei wykracza daleko poza jedną reakcję. Chemia „click" jest protestem przeciwko romantycznej wizji syntezy jako spektakularnej demonstracji kunsztu. Jej ideałem jest reakcja niemal nudna w swojej niezawodności: ma działać w wielu środowiskach, tolerować różne grupy funkcyjne, prowadzić do jednoznacznego produktu i wymagać minimalnej komplikacji operacyjnej. Dojrzałość technologiczna przejawia się tu poprzez redukcję dramaturgii eksperymentu. Reakcja jest dobra właśnie dlatego, że chemik nie musi codziennie walczyć o jej powodzenie, co jest kluczowe dla budowania złożonych systemów molekularnych.

Od projektowania struktur do nawigacji w przestrzeni możliwości

Jeśli każdy etap syntezy ma wydajność 80 procent, to w procesie dziesięcioetapowym teoretycznie zachowujemy niewiele ponad jedną dziesiątą początkowej ilości materiału – a to pomijając kwestie oczyszczania. Gdy jednak procesy stają się wysoce wydajne i selektywne, modularne konstruowanie złożonych struktur zyskuje na praktyczności. W tym punkcie chemia zaczyna przypominać informatykę lub inżynierię modułową: potężny system buduje się znacznie łatwiej, gdy jego podstawowe operacje są przewidywalne i można je zestawiać bez konieczności każdorazowego rekonstruowania całego układu.

Chemia bioortogonalna Carolyn Bertozzi przesunęła tę logikę jeszcze dalej. Jej głównym wyzwaniem było przeprowadzenie reakcji w żywym systemie tak, by nie zakłócać naturalnej chemii komórki. Reagent musi być zatem na tyle selektywny, aby odnaleźć swojego partnera w środowisku pełnym białek, lipidów, kwasów nukleinowych, metabolitów i jonów. Komitet Noblowski opisuje reakcje bioortogonalne właśnie jako procesy możliwe do realizacji w organizmach żywych bez

ingerencji w zwykłą chemię komórkową; służą one między innymi do śledzenia procesów biologicznych oraz badań nad celowanym dostarczaniem leków.

Z perspektywy wielowiekowej historii alchemii trudno o bardziej wymowną zmianę. Dawny adept wprowadzał substancje do organizmu za pomocą eliksirów i minerałów, lecz nie potrafił obserwować reakcji na poziomie cząsteczkowym wewnątrz żywej komórki. Współczesny chemik projektuje natomiast reakcję tak subtelną, aby zachodziła wewnątrz żywego układu i jednocześnie pozostała niemal niewidoczna dla jego naturalnej sieci biochemicznej. Nie jest to już brutalne oddziaływanie substancji na organizm, lecz próba wejścia do jego chemii na prawach selektywnego gościa.

Bioortogonalność dowodzi również, że pojęcie reaktywności ma charakter relacyjny. Najbardziej użyteczny reagent nie musi być tym najbardziej reaktywnym – nadmierna reaktywność prowadzi bowiem do nieselektywnych interakcji z wieloma składnikami komórki. Kluczowa jest równowaga: reakcja powinna być wystarczająco szybka dla wybranej pary partnerów i wystarczająco powolna wobec wszystkiego innego. Chemiczna doskonałość ponownie okazuje się więc kompromisem zależnym od środowiska.

Jeszcze radykalniejsze przesunięcie nastąpiło w projektowaniu białek. Przez większość historii biologii molekularnej sekwencje białek traktowano jako produkty ewolucji, a zadaniem naukowca było ustalenie ich struktury i funkcji. Rozwój metod obliczeniowych odwrócił ten problem: skoro sekwencja determinuje strukturę poprzez złożony krajobraz energetyczny, można zapytać, czy z żądanej struktury i funkcji da się wyprowadzić sekwencję, której natura wcześniej nie stworzyła.

Właśnie taki program komputerowego projektowania nowych białek rozwijali David Baker i jego współpracownicy. W 2024 roku Baker otrzymał połowę Nagrody Nobla w dziedzinie chemii za computational protein design, natomiast Demis Hassabis i John Jumper drugą połowę za rozwój metod przewidywania struktur białkowych, w tym AlphaFold. Komitet Noblowski podkreślił, że współczesna chemia zyskała zarówno zdolność przewidywania skomplikowanych struktur na podstawie sekwencji, jak i umiejętność projektowania zupełnie nowych form białkowych.

Wydarzenie to ma wyjątkową doniosłość, ponieważ odwraca jedną z najstarszych relacji w naukach przyrodniczych. Tradycyjny kierunek poznania prowadził od istniejącego obiektu ku jego wyjaśnieniu: najpierw odnajdywaliśmy białko, potem ustalaliśmy jego sekwencję i funkcję. Projektowanie białka może zacząć się z przeciwnego końca: definiujemy potrzebną geometrię lub funkcję, a następnie poszukujemy sekwencji zdolnej w nią zwinąć.

Natura przestaje być wyłącznym autorem struktur, a staje się także zbiorem reguł konstrukcyjnych, z których człowiek próbuje korzystać. Nie należy jednak mylić predykcji struktury z pełnym

rozwiązaniem biologii białek. AlphaFold i pokrewne systemy radykalnie zwiększyły możliwości przewidywania struktur, ale rzeczywista funkcja białka zależy również od dynamiki konformacyjnej, oddziaływań z partnerami, modyfikacji potranslacyjnych czy warunków komórkowych. Predykcja najbardziej prawdopodobnej struktury statycznej nie zastępuje eksperymentalnej charakterystyki całego krajobrazu energetycznego ani kontekstu biologicznego. Także tutaj triumf modelu nie znosi wielopoziomowości rzeczywistości.

Projektowanie białek pokazuje, jak ogromnie wzrosła nasza zdolność poruszania się po przestrzeni molekularnych możliwości. Dwadzieścia standardowych aminokwasów tworzy liczbę sekwencji rosnącą wykładniczo wraz z długością łańcucha. Dla białka o długości dwustu pozycji liczba teoretycznych wariantów wynosi 20^{200} – wartość niemożliwa do wyczerpania metodą eksperymentalną. Problem ten nie może zostać rozwiązany przez brute-force; konieczne są modele, heurystyki i uczenie z danych. W tym miejscu matematyka, fizyka, informatyka i chemia przestają być odrębnymi narzędziami, a tworzą jeden system poznawczy. Mechanika kwantowa określa zasady oddziaływania elektronów, chemia fizyczna dostarcza modeli energetycznych, biologia strukturalna danych eksperymentalnych, informatyka metod optymalizacji, a uczenie maszynowe pozwala wydobywać regularności z ogromnych zbiorów. Współczesna chemia staje się więc nauką hybrydową, w której teoria pierwszych zasad i empiryczne uczenie się z danych wzajemnie się uzupełniają. Nie jest to koniec teorii chemicznej.

Autonomiczne laboratoria jako systemy aktywnego uczenia

Modele uczące się potrafią doskonale przewidywać zależności, nie dostarczając jednocześnie odpowiedzi na pytanie, dlaczego one w ogóle istnieją. Mechanistyczne wyjaśnienie i trafna predykcja to dwie różne rzeczy. Różnica ta jest kluczowa w nauce: aby wyjść poza obszar dobrze reprezentowany w danych, trzeba wiedzieć, czy model uchwycił strukturalną regularność, czy jedynie nauczył się korelacji charakterystycznej dla zbioru treningowego.

W tym miejscu powracamy do problemu obecnego już w epoce flogistonu. Teoria może sprawnie organizować część wyników, a mimo to mylić się co do mechanizmu. Współczesny algorytm wprowadza nową wersję tego zjawiska: potrafi przewidywać poprawnie, nie oferując łatwo dostępnego dla człowieka modelu przyczynowego. W chemii ma to wymiar praktyczny. Gdy model wskazuje wysoką aktywność nieznanej cząsteczki, chemik musi wiedzieć nie tylko, czy prognoza jest statystycznie prawdopodobna, ale również czy struktura jest stabilna, syntetyzowalna i bezpieczna oraz czy mechanizm działania zgadza się z aktualną wiedzą o układzie.

Dlatego autonomia obliczeniowa nie eliminuje eksperymentu. Przeciwnie – największy potencjał ujawnia się wtedy, gdy obliczenia i doświadczenie zostaną zamknięte w pętli. Model wybiera najbardziej informacyjny lub obiecujący eksperyment; robot go wykonuje; instrumenty analizują wynik; dane wracają do modelu, który aktualizuje przekonania o badanej przestrzeni i wyznacza kolejny krok. To właśnie logika współczesnych **self-driving laboratories** – autonomicznych laboratoriów integrujących robotykę, automatyczne reaktory, analizę instrumentalną oraz algorytmy optymalizacji i sztucznej inteligencji. Przegląd w **Nature Reviews Chemistry** z 2026 roku opisuje rozwój tych systemów jako przejście od wyspecjalizowanej automatyzacji pojedynczych operacji ku platformom, na których algorytmy mogą proponować, wykonywać i interpretować eksperymenty przy ograniczonym udziale człowieka. Autorzy publikacji wskazują jednocześnie na kwestie skalowalności, generalizowalności oraz pełnej rejestracji pochodzenia danych i przebiegu prac jako warunki dalszej dojrzałości tej technologii.

Nie jest zatem trafne wyobrażenie autonomicznego laboratorium jako robota, który po prostu „zastąpi chemika". To raczej próba budowy nowej infrastruktury eksperymentalnego wnioskowania, w której kluczową rolę odgrywa aktywne uczenie. Przy ogromnej liczbie kombinacji parametrów – takich jak temperatura, czas, stosunek reagentów, katalizator, rozpuszczalnik czy stężenie – tradycyjny plan badania obejmuje zbyt niewielki zestaw punktów.

Algorytm może natomiast analizować dotychczasowe wyniki i wybierać następny punkt tam, gdzie spodziewa się największej korzyści informacyjnej lub szansy na poprawę wyniku. Każdy eksperyment staje się więc jednocześnie próbą osiągnięcia celu i sposobem aktualizacji modelu. Jest to interesujące również z perspektywy teorii poznania. O ile klasyczny eksperyment odpowiada na pytanie postawione przez człowieka, o tyle laboratorium autonomiczne może częściowo decydować, które pytanie eksperymentalne warto zadać następnie, przyjmując od badacza cel i przestrzeń możliwości. Agent badawczy nie zyskuje pełnej autonomii epistemicznej w sensie filozoficznym – kryteria sukcesu, reprezentacja problemu, bezpieczeństwo oraz kontekst interpretacyjny pozostają domeną ludzi. Zmienia się jednak podział pracy między badaczem a narzędziem.

Alchemik wykonywał doświadczenie własnymi rękami i oceniał wynik zmysłami oraz intuicją. Chemik XIX wieku korzystał z instrumentów pomiarowych, a chemik XX wieku delegował urządzeniom coraz szerszy zakres zbierania danych. Chemik XXI wieku zaczyna powierzać systemowi również wybór kolejnego eksperymentu. Jest to kolejny krok w historii eksternalizacji procesu poznawczego: najpierw pamięć została przeniesiona do tekstu, pomiar do instrumentu, rachunek do komputera, a teraz część heurystyki badawczej przechodzi w obszar algorytmu.

Bezpieczeństwo i transparentność jako fundamenty autonomii

W 2025 roku **Nature Reviews Chemistry** poświęciło osobną analizę bezpieczeństwu autonomicznych laboratoriów, wskazując, że rozszerzanie zakresu operacji chemicznych wykonywanych przez roboty i algorytmy wymaga równoległego budowania zabezpieczeń przed błędami, niewłaściwą klasyfikacją ryzyka, awariami aparatury oraz niebezpiecznym doborem kolejnych eksperymentów. Jest to istotna korekta wobec narracji przedstawiającej automatyzację jako czysty wzrost wydajności; system, który eksperymentuje szybciej, może bowiem równie szybko reprodukować błąd. Problem bezpieczeństwa nie sprowadza się tu do prostego zakazu używania niebezpiecznych substancji, gdyż ryzyko chemiczne ma charakter kontekstowy i kombinatoryczny. Dwie względnie stabilne substancje mogą stworzyć reaktywną mieszaninę, zmiana temperatury może uruchomić rozkład egzotermiczny, a nieprzewidziane zatkanie linii – zwiększyć ciśnienie. Błędnie rozpoznana próbka może z kolei trafić do niekompatybilnego odpadu. Autonomiczny system musi zatem dysponować nie tylko modelem chemicznego celu, lecz również modelem "zakazanej przestrzeni stanów". W tym punkcie historia przemysłu chemicznego, omawiana w poprzedniej części, spotyka się z najnowszą sztuczną inteligencją.

Inżynieria procesowa przez ponad stulecie rozwijała zawory bezpieczeństwa, redundancję, interlocki, analizę zagrożeń i procedury awaryjne, rozumiejąc, że sama optymalizacja produkcji nie wystarcza. Autonomiczne laboratorium potrzebuje analogicznego dojrzewania instytucjonalnego: nie może maksymalizować wyłącznie wydajności reakcji, lecz musi działać wewnątrz rygorystycznej architektury bezpieczeństwa. Kluczowy jest przy tym problem reprodukowalności. Jeśli algorytm decyduje o kolejnych eksperymentach, cały łańcuch decyzyjny powinien pozostać możliwy do odtworzenia: skład reagentów, kalibracja instrumentów, wersja oprogramowania, parametry modelu, historia danych, stan aparatury i kryterium wyboru następnego doświadczenia. W przeciwnym razie automatyzacja może paradoksalnie doprowadzić do nowej wersji alchemicznego sekretu – system będzie generował skuteczne wyniki, lecz złożoność jego wewnętrznej procedury uczyni je trudnymi do niezależnej rekonstrukcji. Dlatego współczesne badania nad autonomicznymi laboratoriami kładą tak duży nacisk na pełną **provenance**, czyli udokumentowane pochodzenie danych i historię operacji.

Kryje się w tym głęboka historyczna ironia. Chemia wydostała się z alchemii między innymi dlatego, że procedura przestała być sekretem mistrza, a stała się publicznie reprodukowalnym protokołem. Automatyzacja cyfrowa może osiągnąć gigantyczną precyzję, ale jeśli człowiek nie potrafi odtworzyć konfiguracji urządzeń, wersji kodu i sekwencji decyzji modelu, problem

nieprzejrzystości powraca w nowej, technicznej postaci. Czarną księgę alchemika może zastąpić "czarna skrzynka" algorytmu. Nie oznacza to, że każdy model musi być intuicyjnie wyjaśnialny na poziomie pojedynczego parametru.

Wartość porażki w systemach autonomicznych

W złożonej nauce często korzystamy z narzędzi, których pełnego działania nie da się sprowadzić do prostego zdania. Wymóg powinien być jednak bardziej precyzyjny: twierdzenie naukowe musi posiadać kontrolowalny łańcuch dowodowy. Jeśli model zaproponuje syntezę, powinno być jasne, jakie warunki zostały spełnione, jaki produkt faktycznie powstał, w jaki sposób go zidentyfikowano, jaka była niepewność pomiaru i czy rezultat można niezależnie zweryfikować. Nauka nie wymaga, aby każdy instrument był prosty; wymaga jedynie, by złożoność narzędzia nie znosiła odpowiedzialności za dowód.

Rozwój autonomicznych laboratoriów zmienia także ekonomię eksperymentu. Człowiek, dysponując ograniczonym czasem, często wybiera doświadczenia intuicyjnie interesujące, opierając się na własnym doświadczeniu i literaturze. Robot może natomiast pracować całą dobę, wykonując serie prób o wysokiej powtarzalności. W pewnych obszarach pozwala to badać regiony przestrzeni parametrów, które człowiek pominąłby jako nieintuicyjne. Zaletą algorytmu jest zatem nie tylko szybkość, lecz ograniczenie wpływu ludzkich uprzedzeń heurystycznych. Nie należy jednak sądzić, że algorytm jest od nich całkowicie wolny – model otrzymuje dane ukształtowane przez konkretną historię nauki.

Literatura częściej publikuje wyniki pozytywne niż nieudane, przez co chemiczne bazy danych bywają ubogie w informacje o reakcjach, które nie zadziałały. Jeśli model uczy się głównie z sukcesów, otrzymuje zniekształcony obraz prawdopodobieństwa reakcji. Paradoksalnie negatywny wynik eksperymentu staje się zasobem informacyjnym, którego tradycyjna kultura publikacyjna często nie docenia. Prowadzi to do przewartościowania historii chemii.

W alchemii niepowodzenie można było ukryć, uznać za błąd adepta lub tłumaczyć niedostatecznym oczyszczeniem substancji. W dojrzałej nauce porażka powinna zawężać przestrzeń hipotez. W chemii opartej na uczeniu maszynowym jej wartość rośnie jeszcze bardziej, ponieważ model potrzebuje wyraźnej granicy między tym, co działa, a tym, co nie. Tysiąc udokumentowanych nieudanych reakcji może być epistemicznie cenniejsze niż setka efektownych sukcesów pozbawionych informacji o granicach stosowalności. Właśnie tutaj zarysowuje się jedna z najciekawszych różnic między alchemią a współczesną nauką danych: alchemiczny sekret maksymalizował wartość pojedynczej, pozytywnej receptury, podczas gdy system uczący się

maksymalizuje wartość rozległego krajobrazu wyników, obejmującego również porażki. Wiedza przestaje być wyłącznie odpowiedzią na pytanie „co działa?”, a staje się mapą prawdopodobieństw pokazującą również to, gdzie i dlaczego proces przestaje działać.

Podobna logika przejawia się w projektowaniu materiałów. Dawniej odkrycie nowego materiału mogło być rezultatem wieloletniego doświadczenia, przypadku lub ręcznego testowania ograniczonej liczby kompozycji. Współczesne programy badań wysokoprzepustowych generują i analizują tysiące kombinacji składu, warunków syntezy i obróbki, a modele obliczeniowe przewidują stabilność faz czy własności elektronowe, zanim materiał w ogóle powstanie. Autonomiczne laboratorium zamyka tę pętlę, pozwalając teorii i eksperymentowi korygować się iteracyjnie bez konieczności ręcznej obsługi każdego etapu. Najnowszy przegląd **Nature Reviews Chemistry** określa właśnie połączenie automatycznego eksperymentowania, inżynierii reaktorów, robotyki i sztucznej inteligencji jako rdzeń współczesnych self-driving laboratories.

Optymalizacja wielokryterialna i etyka definiowania celu

Rozwój ten nieprzypadkowo zbiega się z ogromnym wzrostem znaczenia problemów wielokryterialnych. W przypadku baterii nie wystarcza sama maksymalna gęstość energii; kluczowe są także stabilność cykliczna, bezpieczeństwo, dostępność surowców, przewodnictwo, zakres temperatur oraz koszt. W katalizatorze aktywność to za mało – liczą się selektywność, trwałość, regenerowalność i odporność na zanieczyszczenia. Z kolei w leku samo powinowactwo do białka nie wystarczy; niezbędna jest farmakokinetyka, selektywność, bezpieczeństwo i dostępność syntetyczna.

Człowiek coraz rzadziej poszukuje jednego maksimum. Szuka raczej frontu kompromisów pomiędzy wieloma częściowo sprzecznymi funkcjami. To właśnie tutaj sztuczna inteligencja i automatyzacja wykazują szczególną wartość. Ludzkie myślenie znakomicie radzi sobie z głębokim rozumieniem mechanizmów i tworzeniem nowych pojęć, lecz traci intuicyjność w przestrzeniach obejmujących dziesiątki parametrów. Algorytmy optymalizacyjne potrafią eksplorować takie obszary systematycznie, balansując wiele konkurencyjnych funkcji celu. Nie oznacza to jednak, że mogą one samodzielnie określić, które cele są istotne. To wybór normatywny i praktyczny należący do ludzi oraz instytucji.

Jeżeli system zaprojektuje materiał o najwyższej wydajności energetycznej, lecz oparty na skrajnie rzadkim pierwiastku – czy uznamy to za sukces? Jeśli lek okaże się skuteczniejszy, ale kilkukrotnie droższy w produkcji, jaki kompromis powinniśmy zaakceptować? A gdy katalizator zapewni najlepszą selektywność, lecz będzie wymagał toksycznego rozpuszczalnika, czy należy go wybrać?

Algorytm zoptymalizuje zadaną funkcję, ale nie istnieje czysto chemiczna odpowiedź na pytanie, jaką funkcję społeczeństwo powinno maksymalizować. W ten sposób chemia XXI wieku dociera do granicy, na której modelowanie molekularne spotyka się z ekonomią, etyką i polityką technologiczną. Problem ten nie jest nowy; alchemik również otrzymywał od swojego patrona funkcję celu: złoto, lekarstwo, broń lub prestiż. Różnica tkwi w skali i formalizacji.

Współczesny system potrafi optymalizować tysiące wariantów w krótkim czasie, przez co błędnie zdefiniowany cel może równie szybko generować technologicznie imponujące, lecz społecznie niepożądane rozwiązania. Im większa zdolność optymalizacji, tym ważniejsze staje się pytanie o poprawność celu. Jest to jedna z najważniejszych lekcji płynących z historii – od alchemii po sztuczną inteligencję. Przez tysiąclecia problemem człowieka był niedostatek sprawczości: nie wiedzieliśmy, jak uzyskać określony materiał, zmienić pierwiastek, wyleczyć chorobę czy skonstruować stabilną cząsteczkę. Dziś coraz częściej napotykamy problem odwrotny – zdolność generowania rozwiązań rośnie szybciej niż umiejętność pełnego przewidywania ich konsekwencji i ustalania hierarchii celów.

Nie należy jednak popadać w technopesymizm. Automatyczne laboratoria mogą zwiększać bezpieczeństwo, odsuwając ludzi od operacji toksycznych, wysokotemperaturowych lub wysokociśnieniowych. Modele AI potrafią ograniczyć liczbę zbędnych syntez, a projektowanie białek otwiera drogę do nowych katalizatorów i rozwiązań biomedycznych. Chemia „click” redukuje złożoność wielu procesów, natomiast ewolucja kierowana pozwala uzyskiwać enzymy działające w łagodniejszych warunkach niż tradycyjne katalizatory przemysłowe. Potencjał pozostaje ogromny.

Materia jako ostateczny arbiter autonomicznych systemów

Dojrzałość wymaga jednak zrozumienia, że bezpieczeństwo, reprodukowalność i funkcja społeczna nie są późniejszym dodatkiem do „właściwej nauki”, lecz integralną częścią jej projektu. W ten sposób współczesna chemia ponownie redefiniuje ideał wiedzy. W epoce Lavoisiera była nim dokładność pomiaru, w czasach Mendelejewa – porządek strukturalny, a w chemii XX wieku – wyjaśnienie wiązania i możliwość racjonalnej syntezy. W dobie automatyzacji kluczowa staje się zdolność budowania zamkniętej pętli poznawczej, w której hipoteza, eksperyment, analiza i kolejna hipoteza tworzą system ciągłego uczenia się. Można wręcz powiedzieć, że laboratorium zaczyna przejawiać coś przypominającego prymitywny metabolizm informacji: pobiera hipotezy, przekształca je w eksperymenty, pozyskuje dane, aktualizuje model i kieruje zasoby do kolejnej próby. Metafory tej nie należy brać dosłownie – laboratorium nie jest żywym organizmem – lecz

strukturalne podobieństwo pozostaje pouczające. Podobnie jak życie utrzymuje organizację dzięki sprzężeniom zwrotnym między materią, energią i informacją, tak współczesna infrastruktura naukowa coraz częściej organizuje poznanie poprzez sprzężenie teorii, robotyki, danych i decyzji.

Istnieje jednak zasadnicza różnica. Ewolucja biologiczna nie posiada nadrzędnego celu; selekcjonuje warianty na podstawie lokalnego sukcesu reprodukcyjnego. Laboratorium autonomiczne natomiast operuje w ramach funkcji celu zadaną przez człowieka. Tym samym ludzka odpowiedzialność nie znika wraz z przekazaniem procesu eksperymentowania maszynom, lecz przenosi się poziom wyżej: z wykonywania poszczególnych operacji na projektowanie przestrzeni dopuszczalnych działań, kryteriów sukcesu i barier bezpieczeństwa. Właśnie tutaj spełnia się ostatnie z alchemicznych marzeń o „automatycznym" działaniu materii. Dawni adepci wyobrażali sobie procesy dojrzewania, fermentacji i oczyszczania substancji jako dążące same ku doskonalszej formie. Współczesna nauka nie zakłada takiego teleologicznego dążenia natury, potrafi jednak zbudować system, który sam wybiera kolejne eksperymenty prowadzące do coraz lepiej zdefiniowanego rezultatu. Teleologia nie tkwi w materii, lecz w skonstruowanej funkcji celu.

Natura nie „chce" stworzyć lepszego katalizatora, podobnie jak algorytm niczego nie chce. Człowiek definiuje kryterium, system eksploruje przestrzeń, a prawa chemii decydują o tym, które propozycje są fizycznie realne. Współczesne laboratorium jest więc miejscem spotkania trzech porządków: ludzkiej intencji, algorytmicznego poszukiwania i materialnej konieczności. To właśnie materialna konieczność pozostaje ostatnim arbitrem. Model może zaprojektować idealną cząsteczkę, lecz jeśli nie istnieje realistyczna droga jej syntezy lub związek natychmiast się rozpada, projekt pozostaje jedynie informacją. Algorytm może przewidzieć wyjątkowy katalizator, ale musi on zostać otrzymany i zmierzony; sieć neuronowa może wskazać strukturę białka, lecz biologiczna funkcja wymaga weryfikacji. Automatyzacja nie usuwa ostatniej instancji chemii: materia musi odpowiedzieć. To być może najtrwalsza linia łącząca pierwsze ognisko ze współczesnym laboratorium autonomicznym. Człowiek może tworzyć metafory, modele, wzory i symulacje, lecz każda teoria o materii zostaje ostatecznie wystawiona na kontakt z nią samą. Ogień albo stopi rudę, albo nie. Metal będzie miał określoną gęstość. Reakcja wygeneruje produkt lub go nie wygeneruje. Enzym będzie katalizował proces z daną szybkością. Lek zwiąże receptor albo nie. Projektowane białko przyjmie stabilną strukturę lub jej nie przyjmie.

Sprzężenie zwrotne jako nowoczesny kamień filozoficzny

Możliwość eksperymentalnej odmowy to element, który przez stulecia coraz wyraźniej odróżniał wiedzę naukową od receptur chronionych wieloznaczną interpretacją. Dlatego rozwój sztucznej inteligencji w chemii nie jest odejściem od eksperymentalizmu; w swojej dojrzałej postaci może wręcz stanowić jego radykalizację. Hipotezy mogą być generowane szybciej, testowane systematyczniej, a wyniki rejestrowane dokładniej, co pozwala wybierać kolejne doświadczenia w oparciu o znacznie szerszy zakres informacji. Najnowsze opracowania dotyczące autonomicznych laboratoriów podkreślają zresztą potrzebę stworzenia infrastruktury skalowalnej i w pełni śledzalnej, zamiast ograniczania jej do efektownych pokazów automatyzacji.

Historia alchemii uczy jednak czegoś jeszcze: każda nowa forma potęgi poznawczej niesie ze sobą pokusę nadinterpretacji. Alchemik widział zmianę barwy i ogłaszał transmutację; chemik XIX wieku przeceniał uniwersalność nowej teorii. Współczesny badacz z kolei może przypisać modelowi o wysokiej wartości predykcyjnej rozumienie szersze, niż ten w rzeczywistości posiada. Narzędzia się zmieniają, lecz cnota epistemiczna pozostaje ta sama: polega ona na odróżnianiu demonstracji od dowodu, korelacji od mechanizmu, wyniku na zbiorze testowym od generalizacji oraz teoretycznej możliwości od realnej ścieżki technologicznej.

Najgłębsza przemiana współczesnej chemii dotyczy więc nie tylko jej mocy, ale przede wszystkim organizacji niewiedzy. Badacz coraz rzadziej stara się wiedzieć wszystko przed przystąpieniem do doświadczenia; zamiast tego dąży do sformułowania pytań tak, aby każdy eksperyment maksymalnie redukował istotną niepewność. To inny ideał racjonalności niż wszechwiedza. Chemik nie dysponuje mapą całej przestrzeni molekularnej, lecz posiada metodę wyboru kolejnego punktu, który warto zbadać.

W tym miejscu nauka staje się zaskakująco bliska własnej historii. Przez tysiąclecia postęp dokonywał się dzięki temu, że kolejne pokolenia wykonywały eksperyment, zapamiętywały wynik, poprawiały procedurę i zawężały przestrzeń możliwych wyjaśnień. Autonomiczne laboratorium formalizuje tę pradawną logikę w algorytmicznej pętli uczenia. Technologia jest nowa, ale głęboka struktura procesu pozostaje znajoma: próbować, obserwować, pamiętać, porównywać i poprawiać.

Alchemia zaczynała od nadziei na istnienie sekretnej drogi prowadzącej wprost do doskonałego rezultatu. Współczesna chemia dochodzi do niemal przeciwnego wniosku: najpotężniejszym narzędziem nie jest jedna ostateczna receptura, lecz system zdolny uczyć się na kolejnych przybliżeniach. Złoto nie znajduje się na końcu tajemnego przepisu; lepszy katalizator, lek czy

materiał kryją się w olbrzymiej przestrzeni możliwości, a zadaniem nauki jest tworzenie coraz skuteczniejszych metod jej eksploracji. Jeśli więc kamień filozoficzny był symbolem substancji dającej władzę nad materią, jego współczesnym odpowiednikiem nie jest już akcelerator ani komputer.

Jest nim sprzężenie zwrotne między teorią, eksperymentem i korektą błędu. To ono pozwoliło chemii przez stulecia porzucać błędne wyjaśnienia przy jednoczesnym zachowaniu trafnych wyników, zastępować stare modele lepszymi i przekształcać granice niewiedzy w problemy możliwe do zbadania. Końcowa lekcja dziejów alchemii nie brzmi więc, że człowiek najpierw błądził, a potem poznał prawdę. Jest znacznie bardziej wymagająca.

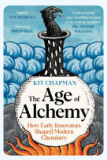
Człowiek nauczył się tworzyć instytucje i metody, dzięki którym błąd może być produktywny, pod warunkiem że zostanie wystawiony na możliwość wykrycia i korekty. Alchemiczny tygiel stał się laboratorium, laboratorium fabryką, a dziś część z nich staje się autonomiczną siecią decyzji i eksperymentów. Materia przez cały ten czas pozostała nieprzekupnym partnerem. Można nazwać mosiądz złotem, lecz nie zmieni to liczby protonów.

Można wierzyć w eliksir, ale organizm odpowie własną fizjologią. Można zbudować przekonujący model komputerowy, jednak cząsteczka w laboratorium zachowa się zgodnie z prawami przyrody, a nie oczekiwaniami programisty. Właśnie ta możliwość oporu rzeczywistości stanowi fundament naukowego poznania.

Najdojrzalszym dziedzictwem alchemicznego głodu wiedzy nie jest pewność, lecz coś trudniejszego: zdolność budowania coraz potężniejszych narzędzi przemiany materii przy równoczesnym tworzeniu rygorystycznych metod kwestionowania własnych przekonań o tej materii. To właśnie z tej podwójnej zdolności – tworzenia i podważania – wyrasta współczesna chemia.

> Ostatecznie to właśnie możliwość oporu rzeczywistości – fakt, że cząsteczka może zachować się wbrew oczekiwaniom programisty – stanowi jedyny prawdziwy fundament naukowego poznania. Prawdziwym dziedzictwem alchemicznego głodu wiedzy nie jest zatem pewność sukcesu, lecz umiejętność budowania potężnych narzędzi przemiany materii przy jednoczesnym tworzeniu rygorystycznych metod kwestionowania własnych przekonań. Czy w świecie zdominowanym przez algorytmiczne predykcje potrafimy jeszcze docenić wartość materialnej odmowy jako najwyższej formy dowodu?

Inspiracje

[1] 

"The Age of Alchemy" Kit Chapman

Profile Books(GB) | ISBN: 9781805221166

Kit Chapman jest brytyjskim dziennikarzem naukowym, autorem i historykiem nauki. Uzyskał tytuł magistra farmacji na Uniwersytecie w Bradford i obronił doktorat z historii i filozofii nauki na Uniwersytecie w Sunderland. Jako były redaktor „Chemistry World", Chapman publikował w takich prestiżowych publikacjach jak „Nature", „New Scientist", „The Daily Telegraph" i „BBC Science Focus". Wykłada na Uniwersytecie w Falmouth, koncentrując się na kreatywnym pisaniu i komunikacji naukowej. Badania i popularyzacja twórczości Chapmana zgłębiają historię chemii, kultury materialnej i innowacji technologicznych. Do jego książek należą „Superheavy", opisująca odkrycie pierwiastków syntetycznych, oraz „Racing Green", analizująca postępy w inżynierii motoryzacyjnej i sportów motorowych. W 2026 roku otrzymał nagrodę Royal Society Trivedi Science Book Prize za twórczość historyczno-naukową.

Kit Chapman *is a British science journalist, author, and historian of science. He earned a master's degree in pharmacy from the University of Bradford and completed a PhD in the history and philosophy of science at the University of Sunderland. A former editor for Chemistry World, Chapman has contributed to prominent publications including Nature, New Scientist, The Daily Telegraph, and BBC Science Focus. He serves as a lecturer at Falmouth University, focusing on creative writing and science communication. Chapman's research and popular writing explore the history of chemistry, material culture, and technological innovation. His books include Superheavy, an account of the discovery of synthetic elements, and Racing Green, which examines automotive and motorsport engineering advances. In 2026, he was awarded the Royal Society Trivedi Science Book Prize for his historical science writing.*

Falmouth University

Literatura uzupełniająca

Książki

Książki autora i dzieła przywołane w tekście:



[1] **"Superheavy"**

Kit Chapman

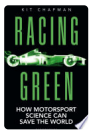
2019 | Bloomsbury Publishing | ISBN: 9781472953919



[2] **"Die Zeit der Alchemisten"**

Kit Chapman

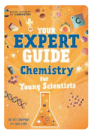
2026 | Aufbau Digital | ISBN: 9783841241504



[3] **"Racing Green"**

Kit Chapman

2022 | Bloomsbury Publishing | ISBN: 9781472982186



[4] **"Your Expert Guide: Chemistry for Young Scientists"**

Dr Chapman, Kit Chapman

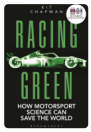
2026 | Wayland | ISBN: 9781526327383



[5] **"Chemistry for Young Scientists"**

Dr Kit Chapman

2025 | Hachette UK | ISBN: 9781526327376



[6] **"Racing Green: SHORTLISTED FOR THE 2022 RAC MOTORING BOOK OF THE YEAR PRIZE"**

Kit Chapman

2023 | Bloomsbury Sigma | ISBN: 9781472982193

Artykuły naukowe

Prace autorów przywoływanych w tekście:

[1] **"Recent Fascinating Aspects of the CuAAC Click Reaction"**

Morten Meldal, Frederik Diness

2020 | Trends in Chemistry | DOI: 10.1016/j.trechm.2020.03.007

Źródło

[2] **"A synthetic multicellular system for programmed pattern formation"**

Subhayu Basu, Yoram Gerchman, Cynthia H. Collins, Frances H. Arnold, Ron Weiss

2005 | Nature | DOI: 10.1038/nature03461

Źródło

[3] **"Directed Evolution: Bringing New Chemistry to Life"**

Frances H. Arnold

2017 | Angewandte Chemie International Edition | DOI: 10.1002/anie.201708408

Źródło

[4] **"Machine-learning-guided directed evolution for protein engineering"**

Kevin Yang, Zachary Wu, Frances H. Arnold

2019 | Nature Methods | DOI: 10.1038/s41592-019-0496-6

Źródło

[5] **"Evolution by Structure-Based Protein Recombination"**

Frances H Arnold

2003 | DOI: 10.21236/ada417404

Źródło

[6] **"EVIDENCE FOR PROTECTION BY BREAST-FEEDING AGAINST INFANT DEATHS FROM INFECTIOUS DISEASES IN BRAZIL"**

Cesar Gomes Victora, J. Patrick Vaughan, Cintia Lombardi, SandraM.C. Fuchs, Luciana Petrucci Gigante, Peter G. Smith

1987 | The Lancet | DOI: 10.1016/s0140-6736(87)90902-0

Źródło

[7] **"Epidemiological evidence for causal relationship between Epstein-Barr virus and Burkitt's lymphoma from Ugandan prospective study"**

Guy de Thé, A. Geser, Nicholas Day, P. M. Tukei, Edward H. Williams, Peter G. Smith

1978 | Nature | DOI: 10.1038/274756a0

Źródło

[8] **"Purification of anti-MUC1 antibodies by peptide mimotope affinity chromatography using peptides derived from a polyvalent phage display library"**

Richard G. Smith, Sotiris Missailidis, Michael R. Price

2002 | Journal of Chromatography B | DOI: 10.1016/s0378-4347(01)00422-4

Źródło

[9] **"Click Chemistry: Diverse Chemical Function from a Few Good Reactions"**

Hartmuth Christian Kolb, M. G. Finn, Karl Barry Sharpless

2001 | Angewandte Chemie International Edition | DOI: 10.1002/1521-3773(20010601)40:11<2004::aid-anie2004>3.0.co;2-5

Źródło

[10] "The growing impact of click chemistry on drug discovery"

Hartmuth Christian Kolb, Karl Barry Sharpless

2003 | Drug Discovery Today | DOI: 10.1016/s1359-6446(03)02933-7

Źródło

[11] "Catalytic asymmetric epoxidation and kinetic resolution: modified procedures including in situ derivatization"

Yun Liang Gao, Janice M. Klunder, Robert Mark Hanson, Hiroko Masamune, Soo Young Ko, Karl Barry Sharpless

1987 | Journal of the American Chemical Society | DOI: 10.1021/ja00253a032

Źródło

[12] "Click-Chemie: diverse chemische Funktionalität mit einer Handvoll guter Reaktionen"

Hartmuth Christian Kolb, M. G. Finn, Karl Barry Sharpless

2001 | Angewandte Chemie | DOI: 10.1002/1521-3757(20010601)113:11<2056::aid-ange2056>3.0.co;2-w

Źródło

[13] "SPOCC: A Resin for Solid-Phase Organic Chemistry and Enzymatic Reactions on Solid Phase"

Jörg Rademann, Morten Grøtli, Morten Meldal, Klaus Bock

1999 | Journal of the American Chemical Society | DOI: 10.1021/ja984355i

Źródło

[14] "Semisynthesis of an Active Enzyme by Quantitative Click Ligation."

Christian Kofoed, S. Riesenberg, J. Smolíková, M. Meldal, Sanne Schoffelen

2019 | Bioconjugate chemistry | DOI: 10.1021/acs.bioconjchem.9b00110

Źródło

[15] "Bioorthogonal Chemistry: Fishing for Selectivity in a Sea of Functionality"

Ellen M. Sletten, Carolyn Ruth Bertozzi

2009 | Angewandte Chemie International Edition | DOI: 10.1002/anie.200900942

Źródło

[16] "A Strain-Promoted [3 + 2] Azide–Alkyne Cycloaddition for Covalent Modification of Biomolecules in Living Systems"

Nicholas J. Agard, Jennifer A. Prescher, Carolyn Ruth Bertozzi

2004 | Journal of the American Chemical Society | DOI: 10.1021/ja044996f

Źródło

[17] "Copper-free click chemistry for dynamic in vivo imaging"

Jeremy M. Baskin, Jennifer A. Prescher, Scott T. Laughlin, Nicholas J. Agard, Pamela V. Chang, Carolyn Ruth Bertozzi

2007 | Proceedings of the National Academy of Sciences | DOI: 10.1073/pnas.0707090104

Źródło

[18] "Cu-free click cycloaddition reactions in chemical biology"

John C. Jewett, Carolyn Ruth Bertozzi

2010 | Chemical Society Reviews | DOI: 10.1039/b901970g

Źródło

[19] "De novo design of protein structure and function with RFdiffusion"

Joseph L. Watson, David Juergens, Nathaniel R. Bennett, Brian L. Trippe, Jason Yim, David A. Baker

2023 | Nature | DOI: 10.1038/s41586-023-06415-8

Źródło

[20] "Protein structure prediction and analysis using the Robetta server"

David E. Kim, Dylan C. Chivian, David A. Baker

2004 | Nucleic Acids Research | DOI: 10.1093/nar/gkh468

Źródło

[21] "Robust deep learning–based protein sequence design using ProteinMPNN"

Justas Dauparas, Ivan V. Anishchenko, Nathaniel R. Bennett, Hua Bai, Robert J. Ragotte, David A. Baker

2022 | Science | DOI: 10.1126/science.add2187

Źródło

[22] "Protein Structure Prediction Using Rosetta"

Carol A. Rohl, Charlie E. M. Strauss, Kira M. S. Misura, David A. Baker

2004 | Methods in enzymology on CD-ROM/Methods in enzymology | DOI: 10.1016/s0076-6879(04)83004-0

Źródło

[23] "Human-level control through deep reinforcement learning"

Volodymyr Mnih, Koray Kavukcuoglu, David Silver, Andrei A. Rusu, Joel Veness, Demis Hassabis

2015 | Nature | DOI: 10.1038/nature14236

Źródło

[24] "AlphaFold Protein Structure Database: massively expanding the structural coverage of protein-sequence space with high-accuracy models"

Mihály Váradi, Stephen Anyango, Mandar Deshpande, Sreenath Sasidharan Nair, Cindy Natassia, Demis Hassabis

2021 | Nucleic Acids Research | DOI: 10.1093/nar/gkab1061

Źródło

[25] "A general reinforcement learning algorithm that masters chess, shogi, and Go through self-play"

David Silver, Thomas Hubert, Julian Schrittwieser, Ioannis Antonoglou, Matthew Lai, Demis Hassabis

2018 | Science | DOI: 10.1126/science.aar6404

Źródło

[26] "Improved protein structure prediction using potentials from deep learning"

Andrew Senior, Richard Evans, John Jumper, James Kirkpatrick, Laurent Sifre, Demis Hassabis

2020 | Nature | DOI: 10.1038/s41586-019-1923-7

Źródło

[27] "AlphaFold Protein Structure Database in 2024: providing structure coverage for over 214 million protein sequences"

Mihály Váradi, Damian Bertoni, Paulyna Magaña, Urmila Paramval, Ivanna Pidruchna, John Jumper

2023 | Nucleic Acids Research | DOI: 10.1093/nar/gkad1011

Źródło

[28] "Effective gene expression prediction from sequence by integrating long-range interactions"

Žiga Avsec, Vikram Agarwal, Daniel Visentin, Joseph R. E. Ledsam, Agnieszka Grabska-Barwińska, John Jumper

2021 | Nature Methods | DOI: 10.1038/s41592-021-01252-x

Źródło

Artykuły naukowe autora:

[29] "SUPERHEAVY"

Kit Chapman

2019 | Bloomsbury Sigma eBooks | DOI: 10.5040/9781472974754

Źródło

[30] "The transuranic elements and the island of stability"

Kit Chapman

2020 | Philosophical Transactions of the Royal Society A Mathematical Physical and Engineering Sciences | DOI: 10.1098/rsta.2019.0535

Źródło

[31] "The oganesson odyssey"

Kit Chapman

2018 | Nature Chemistry | DOI: 10.1038/s41557-018-0098-4

Źródło

[32] "The first synthetic element"

Kit Chapman

2019 | Nature | DOI: 10.1038/d41586-019-00236-4

Źródło

[33] "Ei-ichi Negishi (1935–2021)"

Kit Chapman

2021 | Nature | DOI: 10.1038/d41586-021-01828-9

Źródło

[34] "Die Zeit der Alchemisten wie die moderne Chemie erfunden wurde"

Kit Chapman, Hans-Peter Remmler, Aufbau-Verlag

2026

Źródło

[35] "Alchemy: discredited pseudoscience or chemistry's worthy ancestor?"

Kit Chapman

2025 | Nature | DOI: 10.1038/d41586-025-03309-9

Źródło

[36] "The beams at the edge of physics"

Kit Chapman

2021 | Physics World | DOI: 10.1088/2058-7058/34/02/28

Źródło

[37] "Element Discovery and the Birth of the Atomic Age"

Kit Chapman

2021 | Perspectives on the history of chemistry | DOI: 10.1007/978-3-030-67910-1_13

Źródło

[38] "Elements of the Future"

Kit Chapman

2019 | Chemistry International | DOI: 10.1515/ci-2019-0406

Źródło

Treść tworzy Fundacja Dobre Państwo.
Redaguje i publikuje APA ONE, autorski system redakcyjny Fundacji oparty na AI.
APA ONE Publishing System
Fundacja Dobre Państwo © 2026
Article ID: 5c96826f-47a6-48bb-a347-3c961905bf98