

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

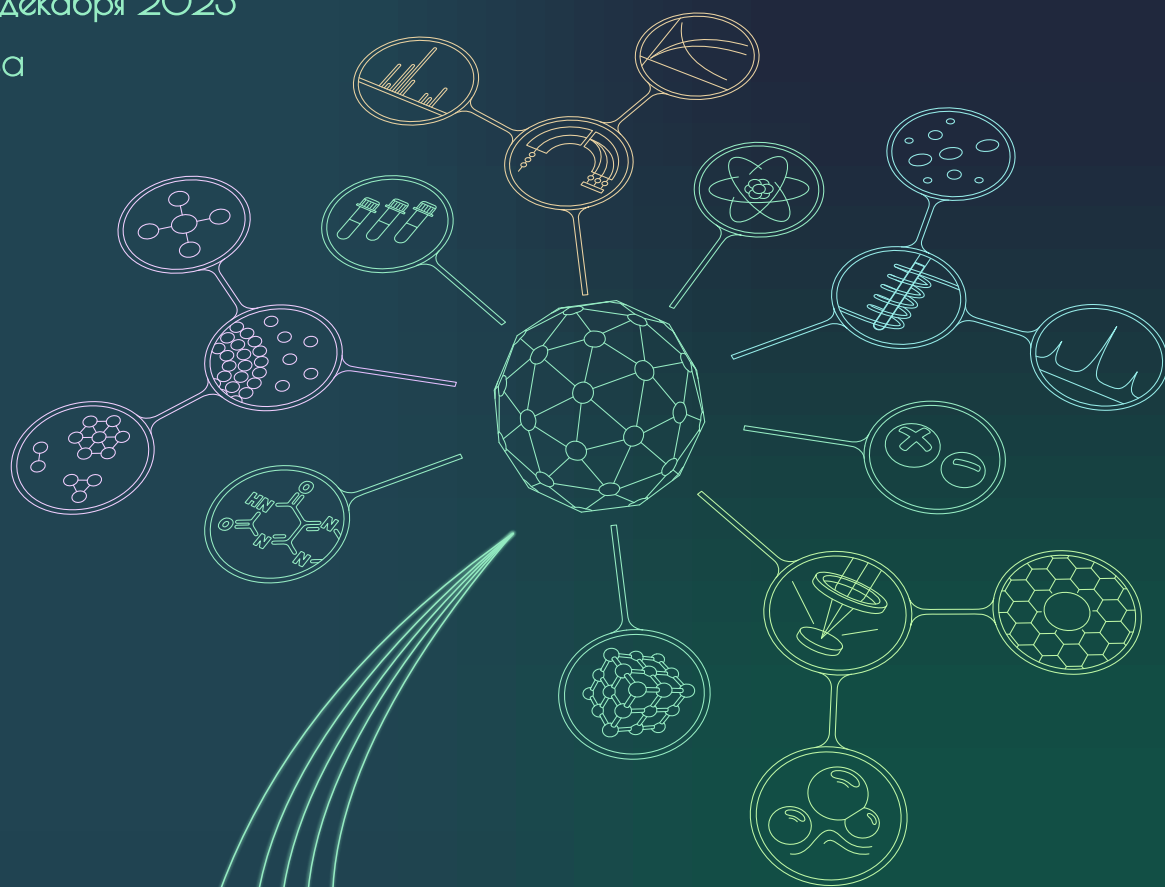
Artificial Intelligence in Chemistry and Materials Science

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского
Российской академии наук

Научная конференция-школа

18-20 декабря 2023

Москва



СБОРНИК ТЕЗИСОВ
ДОКЛАДОВ

[Zioc.ru/AIChem2023](https://zioc.ru/AIChem2023)



Оглавление

Научный комитет	2
Организационный комитет	2
Приветствие академика-секретаря ОХНМ РАН академика М. П. Егорова	3
Направления работы конференции-школы	4
О конференции	4
Программа конференции	5
Устные доклады	6
Стендовые доклады	13
Сборник тезисов конференции-школы	18
ПЛЕНАРНЫЕ ЛЕКЦИИ	19
УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ	27
СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ	70
Список докладчиков	139

Научный комитет

- академик Бухтияров В.И. (Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, г. Новосибирск)
- академик Егоров М.П. (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, г. Москва)
- академик Калмыков С.Н. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва)
- академик Кукушкин В.Ю. (Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург)
- чл.-корр. РАН Антипин И.С. (Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань)
- чл.-корр. РАН Максимов А.Л. (Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, г. Москва)
- чл.-корр. РАН Трифонов А.А. (Институт элементоорганических соединений им. А.Е. Несмеянова РАН, г. Москва)
- д.х.н. Третьяков Е.В. (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, г. Москва)

Организационный комитет

академик Анаников В. П.
с.н.с., к.х.н. Гордеев Е. Г.
асп. Корабельникова В. А.
асп. Провоторова Д. В.

Секретарь оргкомитета

н.с., к.х.н. Архипова Д. М. <conf-alab@ioc.ac.ru>

Приветствие академика-секретаря ОХНМ РАН академика М. П. Егорова

Дорогие коллеги!

Предстоящая конференция посвящена одному из самых захватывающих и быстро развивающихся направлений современной науки — применению искусственного интеллекта в химии и материаловедении. Это направление открывает перед нами новые горизонты возможностей, объединяя глубокие знания в области химии с передовыми технологиями обработки данных и машинного обучения.



Искусственный интеллект уже доказал свою способность кардинально изменять традиционные подходы в научных исследованиях. Он помогает ускорять процесс открытия новых материалов, оптимизируя синтез и анализ химических соединений, и предоставляет уникальные инструменты для моделирования сложных химических реакций и процессов. Важность этих достижений трудно переоценить, поскольку они открывают путь к созданию новых лекарств, эффективных материалов для энергетики, экологии и многих других сфер жизни.

На этой конференции, организованной научной школой академика В.П. Ананикова, у вас будет возможность обсудить эти новшества, обменяться опытом и определить направления будущих исследований. Вы сможете не только проанализировать последние достижения в этой области, но и определить ключевые направления для будущих исследований, которые будут способствовать интеграции алгоритмов искусственного интеллекта в фундаментальные и прикладные исследования в химии и материаловедении.

Желаю всем участникам конференции вдохновения, продуктивности и новых открытий. Пусть эта встреча станет площадкой для обмена знаниями и идеями, которые будут способствовать дальнейшему прогрессу в наших областях. Удачи вам, дорогие коллеги, и плодотворной работы на конференции!

Академик-секретарь ОХНМ РАН,
Академик М. П. Егоров

Направления работы конференции-школы

- Прогнозирование свойств молекул: используя AI, можно предсказать физические, химические и биологические свойства молекул без необходимости проведения реальных экспериментов.
- Оптимизация свойств: модели машинного обучения могут помочь в создании новых соединений с желаемыми свойствами, минимизируя количество необходимых экспериментальных тестов.
- Автоматизированный поиск реагентов: AI может анализировать большие наборы данных для выявления оптимальных реагентов для химических реакций.
- Дизайн материалов: с помощью AI можно разрабатывать новые материалы с желаемыми свойствами.
- Распознавание и анализ спектров: модели машинного обучения могут анализировать сложные спектры, для быстрого определения состава образца.
- Оптимизация процессов: AI может помогать в управлении и оптимизации производственных процессов, уменьшая отходы и повышая эффективность.
- Прогнозирование стабильности соединений: оценка термодинамической стабильности и реакционной способности различных химических соединений.
- Молекулярное моделирование: использование AI для интерпретации и оптимизации квантово-химических вычислений, что делает их быстрее и точнее.
- Создание биоактивных молекул: применение AI для дизайна молекул с определенной биологической активностью, например, для разработки новых лекарственных средств.
- Устойчивость и экологичность: использование AI для разработки более экологичных методов производства и создания материалов, которые меньше воздействуют на окружающую среду.

О конференции

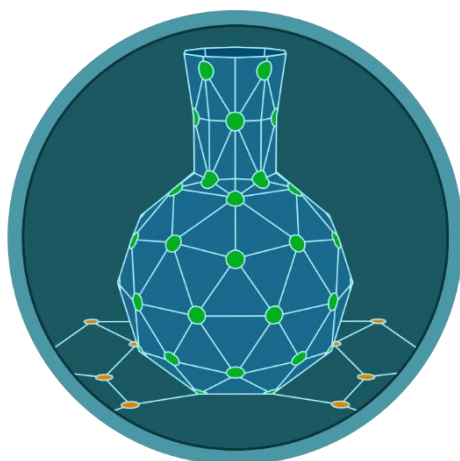
Конференция-школа «Искусственный интеллект в химии и материаловедении» организуется и проводится Научной школой академика В.П. Ананикова. В программе конференции запланированы пленарные лекции, устные и стендовые доклады. Особенностью конференции является междисциплинарная направленность и поиск новых направлений исследований для будущих открытий в фундаментальной науке. К участию в работе конференции приглашаются все желающие!

Программа конференции
**«ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ
В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ»**

Artificial Intelligence in Chemistry and Materials Science

18-20 декабря 2023 г., ИОХ им. Н. Д. Зелинского РАН, г. Москва

[Zioc.ru/AIChem2023](https://zioc.ru/AIChem2023)



Устные доклады

18 декабря, понедельник



9.00-10.00 регистрация участников

10.00-10.10 вступительное слово

Сессия 1.

Председатель: академик Егоров Михаил Петрович

10.10-10.40 PL-01 академик Хохлов Алексей Ремович «Инструменты искусственного интеллекта для обработки научной информации»

10.40-11.10 PL-02 академик Анаников Валентин Павлович «Искусственный интеллект в химических исследованиях»

11.10-11.40 PL-03 д.ф.-м.н. Бурнаев Евгений Владимирович «Физически-информированное машинное обучение для решения задач химии и материаловедения»

11.40-12.00 **кофе-брейк**

Сессия 2.

Председатель: академик Анаников Валентин Павлович

12.00-12.15 ОР-01 д.ф.-м.н. Комаров Павел Вячеславович «Применение подхода *in silico* для поиска новых полимерных материалов»

12.15-12.30 ОР-02 д.х.н. Толбин Александр Юрьевич «Новый способ прогнозирования эффективности оптических лимитеров без проведения эксперимента»

12.30-12.45 ОР-03 д.х.н. Александров Евгений Викторович «Топологические методы анализа и дизайна полимерных сеток»

12.45-13.00 ОР-04 к.х.н. Смирнова Анастасия Андреевна «Использование сверточных нейронных сетей и трансферного глубокого обучения для обработки XAS-спектров»

13.00-13.15 ОР-05 к.т.н. Кудияров Виктор Николаевич «Разработка композитов на основе гидрида магния и наноразмерных добавок для высокоэффективного хранения водорода»

13.15-13.30 ОР-06 к.ф.-м.н. Панкин Илья Андреевич «Интерпретация спектров рентгеновского поглощения для single-site катализаторов на основе цеолитов с помощью молекулярной динамики и машинного обучения»

13.30-13.45	ОР-07 к.х.н. Королев Вадим Викторович «Нейронные сети на огрубленном кристаллическом графе как инструмент для дизайна нанопористых материалов»
13.45	Коллективное фото
13.45-15.00	обед
Сессия 3.	
Председатель: <i>д.ф.-м.н. Бурнаев Евгений Владимирович</i>	
15.00-15.30	PL-04 к.ф.-м.н. Еремин Роман Александрович «Графовые нейронные сети: от прогнозирования свойств кристаллических структур к поиску новых материалов»
15.30-16.00	PL-05 к.х.н. Потапенко Олег Валерьевич «Оптимизация состава катализатора крекинга с использованием математической модели на базе искусственных нейронных сетей»
16.00-16.20	кофе-брейк
Сессия 4.	
Председатель: <i>к.ф.-м.н. Еремин Роман Александрович</i>	
16.20-16.35	ОР-08 Мулашкина Татьяна Игоревна «Определение активации субстрата в активном центре фермента с использованием нейронной сети»
16.35-16.50	ОР-09 Рылов Александр Валерьевич «Предсказание параметров межзвёздной пыли по данным ИК-фотометрии с помощью нейросетей»
16.50-17.05	ОР-10 Серов Никита Сергеевич «Дизайн бионаноматериалов с заданными свойствами и активностями методами искусственного интеллекта»
17.05-17.20	ОР-11 Проценко Богдан Олегович «PyFitIt: Интерпретируемое машинное обучение для спектроскопии на пути к простоте и удобству»
17.30-19.30	стендовая сессия

19 декабря, вторник

Сессия 5.	
Председатель: <i>академик Хохлов Алексей Ремович</i>	
10.00-10.30	PL-06 чл.-корр. РАН Люлин Сергей Владимирович «Использование нейронных сетей для предсказания свойств полимеров»
10.30-11.00	PL-07 к.ф.-м.н. Шапеев Александр Васильевич «Машинно-обучаемые силовые поля»
11.00-11.20	кофе-брейк
Сессия 6.	
Председатель: <i>чл.-корр. РАН Люлин Сергей Владимирович</i>	
11.20-11.35	ОР-12 д.ф.-м.н. Рыльцев Роман Евгеньевич «Межатомные потенциалы на основе нейронных сетей для атомистического моделирования металлургических расплавов»
11.35-11.50	ОР-13 д.ф.-м.н. Щелкачев Николай Михайлович «Глубокое машинное обучение, структурная наследственность и дизайн функциональных материалов на основе металлических сплавов»
11.50-12.05	ОР-14 Зайцев Роман Геннадиевич «Модели машинного обучения в задачах анализа упорядоченности размещения частиц на многослойной поверхности»
12.05-12.20	ОР-15 к.х.н. Усачёв Максим Николаевич «Применение автоматизированного алгоритма <i>de novo</i> идентификации продуктов химического синтеза методом жидкостной хромато-масс-спектрометрии высокого разрешения»
12.20-12.35	ОР-16 к.х.н. Никитина Анна Анатольевна «Роботизация процесса синтеза мембраны на основе оксида графена»
12.35-12.50	ОР-17 к.ф.-м.н. Романчук Сергей Петрович «Применение вычислительного интеллекта и теории эффективной среды для моделирования структуры нанокomпозиционного материала»
12.50-13.05	ОР-18 Злобин Иван Сергеевич «Предсказание теплофизических свойств полимеров при помощи искусственного интеллекта»
13.05-14.20	обед

Сессия 7.

Председатель: *к.ф.-м.н. Шапеев Александр Васильевич*

- 14.20-14.50 PL-08 к.х.н. Нартова Анна Владимировна «Глубокое машинное обучение для анализа изображений, полученных различными методами микроскопии»
- 14.50-15.20 PL-09 к.ф.-м.н. Яньшолле Вадим Владимирович «reactonly: высокоточный алгоритм обнаружения пиков в ВЭЖХ-МС данных с использованием нейросетей глубокого обучения»
- 15.20-15.35 OP-19 Бородина Ольга Сергеевна «Автоматизация направленного поиска предреакционных комплексов в реакции хиральных индукторов с бензальдегидом»
- 15.35-15.50 OP-20 Карпов Кирилл Викторович «Дизайн комплексообразователей для переработки отработанного ядерного топлива с использованием глубокого машинного обучения»
- 15.50-16.10 *кофе-брейк*

Сессия 8.

Председатель: *к.х.н. Нартова Анна Владимировна*

- 16.10-16.25 OP-21 Бухтеева Екатерина Олеговна «Топологический подход к реконструктивным твердофазным переходам и его применение для моделирования новых материалов»
- 16.25-16.40 OP-22 Агликов Александр Сергеевич «Топологический анализ данных наноразмерной шероховатости полиионных сборок с использованием методов машинного обучения»
- 16.40-16.55 OP-23 Ишмухаметов Ильнур Ринатович «Диагностика нанокерамики в клетках млекопитающих с использованием корреляционной микроскопии и машинного обучения»
- 16.55-17.05 ST-01 Синельников Артем Николаевич «Сенсоры «электронный язык» для анализа биологических смесей методами машинного обучения»
- 17.05-17.15 ST-02 Осипов Владислав Тимофеевич «Машинное обучение для высоковоспроизводительного поиска новых материалов для металл-ионных аккумуляторов»
- 17.15-17.25 ST-03 Яблонский Максим Денисович «Конформационный поиск для малых органических молекул в газовой и твердой фазе с помощью алгоритма пчелиной колонии»

17.25-17.35	ST-04 Лифарь Михаил Сергеевич «Применение машинного обучения с подкреплением к задаче оптимального управления реакцией окисления CO на Pd»
17.35-17.45	ST-05 Поташников Александр Александрович «Досинтетическая оценка термодинамической стабильности кристаллических соединений методами машинного обучения»
17.45-17.55	ST-06 Бегларян Бабкен Гагикович «Оценка качества предсказания ИК-спектров полициклических ароматических углеводородов с использованием нейронных сетей»

20 декабря, среда

Сессия 9.

Председатель: к.ф.-м.н. Яньшолё Вадим Владимирович

10.00-10.30 PL-10 д.х.н. Скорб Екатерина Владимировна «Интеллектуальные технологии в инфохимии»

10.30-11.00 PL-11 к.х.н. Коровин Алексей Николаевич «Применение ИИ для повышения энергоэффективности в фотовольтаике»

11.00-11.20 **кофе-брейк**

Сессия 10.

Председатель: д.х.н. Скорб Екатерина Владимировна

11.20-11.35 ОР-24 к.х.н. Попов Илья Сергеевич «Разработка машиннообучаемых потенциалов межатомного взаимодействия в системе Nb-O»

11.35-11.50 ОР-25 к.ф.-м.н. Мареев Евгений Игоревич «Самоочищающиеся оптические системы на основе машинного обучения с подкреплением»

11.50-12.05 ОР-26 Козлов Константин Сергеевич «Автоматический масс-спектрометрический поиск помогает открывать новые реакции»

12.05-12.20 ОР-27 к.х.н. Митрофанов Артем Александрович «О применении метода байесовской оптимизации в химии»

12.20-12.35 ОР-28 к.т.н. Муравьев Никита Вадимович «Машинное обучение в термическом анализе: Первые опыты»

12.35-12.50 ОР-29 Русалев Юрий Владимирович «Тренировка потенциала ReaxFF для AuPd»

12.50-13.05 ОР-30 Ларионов Кирилл Павлович «Предсказание свойств металл-органического каркаса UiO-66 методами машинного обучения»

13.05-14.20 **обед**

Сессия 11.

Председатель: к.х.н. Коровин Алексей Николаевич

14.20-14.50 PL-12 д.ф.-м.н. Гуда Александр Александрович «Микрофлюидные системы для *in situ* спектральной диагностики и скрининга параметров синтеза»

14.50-15.20 PL-13 к.ф.-м.н. Медведев Михаил Геннадьевич «Приложения искусственного интеллекта в химических исследованиях»

15.20-15.35	ОР-31 Степанюк Роман Алексеевич «Применение методов машинного обучения для предсказания значений изменения дипольного момента при электронном возбуждении в флуоресцентных белках на основе данных из молекулярно-динамических расчетов»
15.35-15.50	ОР-32 Мануковская Диана Владимировна «Автоматизация получения фрактальной размерности уровней освещенности фотоиндуцированного рассеяния света в фоторефрактивных монокристаллах ниобата лития с помощью программы в языковой среде Python для распознавания оптических свойств монокристаллов»
15.50-16.10	кофе-брейк
Сессия 12.	
Председатель: <i>д.ф.-м.н. Гуда Александр Александрович</i>	
16.10-16.25	ОР-33 Левченко Ирина Николаевна «Моделирование микровязкости мембраны в окружении зонда активированной кумаринами C_{525} , C_{314} хемилюминесценции под действием природного апоптогена $CytC - CL$, как гетерогенного катализатора»
16.25-16.40	ОР-34 Иваненко Тимур Юрьевич «Применение элементов глубокого машинного обучения для прогнозирования фотолюминесцентных свойств комплексных соединений структуры типа перовскитов»
16.40-16.50	ST-07 Мирзаева Сабина Элмаг-кызы «Использование языковых моделей и методов обработки данных для оптимизации научных исследований»
16.50-17.00	ST-08 Рубцов Иван Дмитриевич «Применение методов машинного обучения при поиске перспективных матриц для иммобилизации циркония»
17.00-17.10	ST-09 Пикулин Иван Сергеевич «Предсказание константы устойчивости комплексов металлов с помощью графовой нейронной сети»
17.10-17.20	ST-10 Щетинкина Мария Александровна «Автоматизация расчетов метадинамики при изучении ацилирования энантиомеров 2-метилпиперидина»
17.20-18.00	<i>заключительное слово, награждение победителей</i>

Стендовые доклады

18 декабря, понедельник

PP-01 Абдильмянов Алексей Рафикович «Характеристики полиэдров Вороного-Дирихле как дескрипторы для прогнозирования поляризуемости молекул»

PP-02 Абрамкина Марина Алексеевна «Перспективы применения биогибридных катализаторов на основе наночастиц меди и никеля в органическом синтезе»

PP-03 Андреев Дмитрий Иванович «Программная платформа для моделирования осаждения палладия на поверхности углерода методом Монте-Карло»

PP-04 Аракелян Лиана Ашотовна «Создание базы данных цитотоксичности ионных жидкостей»

PP-05 Архипов Данил Алексеевич «Применение алгоритмов машинного обучения для оптимизации удаления тартразина из воды металл-органическими материалами (NH₂)-UiO-66»

PP-06 Ахметзянов Ильдан Ильдусович «Использование AI для решения прямых и обратных задач химической гидромеханики»

PP-07 Банников Максим Игоревич «Компонентный анализ газовых смесей по данным субтерагерцовой спектроскопии»

PP-08 Белоусова Татьяна Сергеевна «2,5-диформилфуран – основа редокс-активного полимера биосенсора»

PP-09 Бойченко Дмитрий Сергеевич «Build-a-bio-Strip: специальный онлайн-сервис для быстрой оценки экологической опасности химических реакций»

PP-10 Бондаренко Любовь Сергеевна «Особенности сорбции левофлоксацина в присутствии металл-органического координационного полимера MIL 88b»

PP-11 Борзова Дарья Владимировна «Оптимизация условий формирования наночастиц палладия на бактериальной подложке»

PP-12 Буглаков Александр Игоревич «Особенности самоорганизации в растворах амфифильных диблок-сополимеров с гребнеобразным и линейным блоками: компьютерное моделирование, подкрепленное методом активного обучения»

PP-13 Буров Арсений Сергеевич «Моделирование переноса заряда Li⁺ через интерфейсы Li/Li₇La₃Zr₂O₁₂ с помощью молекулярной динамики и машинно-обучаемых потенциалов»

PP-14 Быков Андрей Викторович «Предсказание ширины запрещенной зоны гибридных 1D галогенометаллатов(III) методами ML»

- PP-15 Ванчугов Рустам Расимович «Концепция экспериментальной программы нейросетевого моделирования показателей качества резинотехнических изделий»
-
- PP-16 Вепрева Анастасия Сергеевна «Предсказание свойств офтальмологических препаратов с помощью машинного обучения»
-
- PP-17 Волгин Игорь Вадимович «Применение моделей машинного обучения для предсказания газотранспортных свойств полиимидов и полиамидов»
-
- PP-18 Ворожцов Артем Павлович «Метрическое обучение для определения состава смесей по спектральным данным»
-
- PP-19 Гасанов Михаил Эльдарович «Применение QSAR для прогнозирования биоактивности модифицированных наночастиц магнетита в условиях малой выборки»
-
- PP-20 Гашимова Элина Мансуровна «Диагностика рака легких по отношению к раку других локализаций по выдыхаемому воздуху с применением различных алгоритмов оптимизации нейронных сетей»
-
- PP-21 Гнатюк Ирина Геннадьевна «Селективное (С-3)-Н арилирование гетероциклопентадиенов в условиях рутениевого катализа»
-
- PP-22 Голышева Анастасия Николаевна «Эффективный и доступный метод синтеза HMF и DFF»
-
- PP-23 Гребенкина Анастасия Алексеевна «Разработка алгоритма автоматического поиска равновесного состояния металлоорганических комплексов»
-
- PP-24 Губина Нина Вячеславовна «Генеративный искусственный интеллект для получения сокристаллов с заранее заданными свойствами»
-
- PP-25 Гуревич Павел Евгеньевич «Детектирование ионов переходных металлов в масс-спектрах с использованием свёрточных нейронных сетей»
-
- PP-26 Гуркин Георгий Константинович «Биоплёнка на нановолокнах полианилина – новый подход для проводящего полимера в биоэлектрохимических устройствах»
-
- PP-27 Гурьев Валентин Васильевич «Оптимизация архитектуры ВТСП проводов II-го поколения»
-
- PP-28 Дубровский Иван Сергеевич «Генеративная система по предсказанию морфологии наноматериалов»
-
- PP-29 Ерохин Кирилл Сергеевич «Применение аддитивных технологий для повышения эффективности и безопасности органического синтеза»
-
- PP-30 Захаров Никита Сергеевич «Применение алгоритмов молекулярного моделирования для изучения свойств конъюгатов мезо-арипорфиринов с нацеливающим лигандом как потенциальных противоопухолевых фотодинамических агентов»

PP-31 Ильющенко Матвей Кириллович «Органокаталитическая нуклеофильная активация винилирующих агентов – DFT-исследование»

PP-32 Квашнин Александр Геннадьевич «Первопринципное исследование адсорбционных свойств поверхности WB_{5-x} »

PP-33 Кечин Арсений Алексеевич «Классификация синих шариковых ручек для определения возможного факта фальсификации документа»

PP-34 Ковеза Владислав Анатольевич «Исследование особенностей модифицирования цеолита ZSM-5 соединениями фосфора с использованием методов математического моделирования»

PP-35 Коломоец Никита Иванович «Автоматизированное исследование пространства реакций циклоприсоединения ацетилена»

PP-36 Колыхалов Денис Алексеевич «Новые подходы к синтезу полимеров на основе фуранов»

PP-37 Кошелев Даниил Сергеевич «Экспертная система для интерпретации ИК спектров на основе свёрточной нейронной сети с мультиклассовой классификацией»

PP-38 Красовская Зинаида «Генеративный дизайн аптамерных последовательностей с заранее заданной аффинностью и селективностью к малым молекулам»

PP-39 Кузнецова Любовь Сергеевна «Гибридный нанокompозитный материал для создания универсального глюкозного датчика, применяемого в химической промышленности, биотехнологии и медицине»

PP-40 Кузьмина Юлиа Олеговна «Выбор параметров печати для нержавеющей стали марки 316l используя MBOO алгоритм»

PP-41 Кулаев Кирилл Дмитриевич «Графовые нейронные сети и XANES спектроскопия для исследования структуры центров меди в Cu-MOR»

PP-42 Лаврентьев Игорь Вячеславович «Автокаталитическая внутримолекулярная C-X (X = Cl, Br, I)/C-H активация и циклизация 5,6-диарил-1H-пирроло[3,4-d]пиримидин-2,4-дионов при облучении видимым светом»

PP-43 Ланцова Елизавета Александровна «Синтез гибридного антисептического биокомпозита с использованием кремнийорганической матрицы и октенидина дигидрохлорида»

PP-44 Мануковская Диана Владимировна «Новые материалы для использования в нейроморфных системах»

PP-45 Набиев Тимур Теймурович «Использование полимерных гидрогелей в медицине»

PP-46 Назарычев Виктор Михайлович «Атомистическое компьютерное моделирование диэлектрических свойств термопластичных полиимидов, ориентированных приложением одноосного растяжения»

PP-47 Нам Евгений Владиславович «Новые белковые дескрипторы»

PP-48 Нерсесян Лев Эрикович «Использование нейросетей для анализа динамики роста биопленок на различных материалах: графы взаимодействий»

PP-49 Никитенко Денис Валерьевич «Квантово-химическое моделирование последовательного алкилирования простых иодидных комплексов Pt^{II} иодалкильными производными»

PP-50 Обухова Елена Викторовна «Устойчивые PEPPSI-комплексы на основе продуктов конверсии возобновляемой растительной биомассы»

PP-51 Одегова Валерия Сергеевна «Дизайн глубоких эвтектических растворителей с помощью алгоритмов искусственного интеллекта»

PP-52 Орлова Анастасия Андреевна «Применение улучшенных представлений химических реакций для предсказания выходов»

PP-53 Островский Сергей Дмитриевич «Использование генеративного дизайна при создании биокерамического имплантата для краниопластики»

PP-54 Перчиков Роман Николаевич «Исследование формирования биоплёнок на углеродных нанотрубках»

PP-55 Попов Захар Иванович «Низкоразмерные наноматериалы для сенсорики и катализа»

PP-56 Прима Дарья Олеговна «Исследование *in situ* и доказательство связывания N-гетероциклических карбенов с поверхностью наночастиц Pd в катализе Pd/NHC»

PP-57 Пятаченко Анастасия Сергеевна «Комплексы Ni(II) с основно-ионизирующимися NHC-лигандами: синтез и каталитическая активность в реакции Сузуки-Мияура с участием арилхлоридов»

PP-58 Рябов Виталий Олегович «Моделирование методом молекулярной динамики CVD синтеза графена на никелевой подложке»

PP-59 Савельев Сергей Алексеевич «Моделирование протонной проводимости металлоорганических каркасных структур с применением метода трансферного машинного обучения»

PP-60 Сенин Алексей Александрович «Каталитические свойства комплексов хрома на основе 1,2-бис(дифенилфосфино)бензола в процессе тримеризации этилена»

PP-61 Сильверстов Артём Сергеевич «Совместное использование градиентного бустинга и алгоритмов на графах в задаче многозарядного деизотопирования масс-спектров высокого разрешения»

PP-62 Скуратович Владимир Андреевич «Новый тип медь-катализируемых NHC-R и NHC=O сочетаний в условиях реакции Чана-Эванса-Лама»

PP-63 Смирнова Анастасия Андреевна «Поиск уязвимостей графовых сверточных нейронных сетей при работе с лекарственно подобными молекулами»

PP-64 Султанова Римма Марсельевна «Разработка цифровой технологии подбора нефтепромысловых химических реагентов»

PP-65 Суржикова Яна Игоревна «Разработка нового катализатора для окислительного амидирования альдегидов в фотокаталитических условиях»

PP-66 Суханова Екатерина Владимировна «Программа *Heterotool*: построение геометрий вертикальных и латеральных гетероструктур»

PP-67 Уразманова Карина Руслановна «Молекулярный дизайн новых антибиотиков на основе бензимидазола»

PP-68 Фомкина Анна Сергеевна «Использование искусственного интеллекта для высокоэффективного скрининга оптимальных гетерогенных катализаторов в реакции электроокисления мочевины»

PP-69 Хайбрахманов Артур Ильнурович «Использование свёрточных нейронных сетей для решения практических задач порошковой рентгеновской дифракции»

PP-70 Холичева Ангелина Алексеевна, Каманин Максим Сергеевич «Генерация размеченных изображений биопленок методами глубокого обучения для автоматического количественного анализа»

PP-71 Чернов Даниил Димович «Анализ связи остаточных ошибок оценочных функций со структурными и физико-химическими особенностями лигандов»

PP-72 Чернышев Виктор Михайлович «Основно-ионизирующиеся NHC-лиганды в Pd-катализируемых реакциях арилхлоридов»

PP-73 Чернявский Михаил Валерьевич «Методы интегральной геометрии и алгебраической топологии в анализе сложных структур»

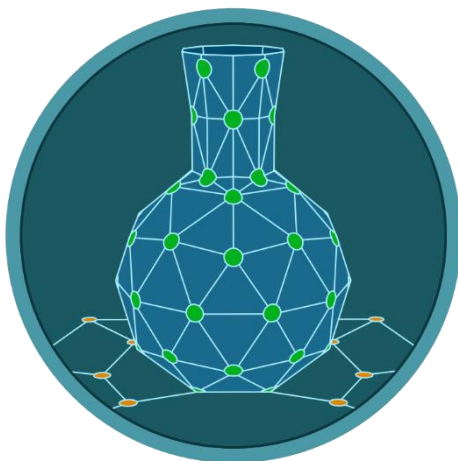
PP-74 Чугреева Галина Николаевна «Применение нейронных сетей для разработки мультимодального углеродного наносенсора ионов в воде»

**Сборник тезисов конференции-школы
«ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ
В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ»**

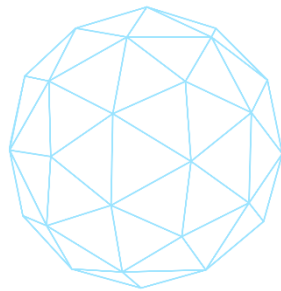
Artificial Intelligence in Chemistry and Materials Science

18-20 декабря 2023 г., ИОХ им. Н. Д. Зелинского РАН, г. Москва

[Zioc.ru/AIChem2023](https://zioc.ru/AIChem2023)



ПЛЕНАРНЫЕ ЛЕКЦИИ



Микрофлюидные системы для *in situ* спектральной диагностики и скрининга параметров синтеза

А.А. Гуда, В.В. Шаповалов, С.В. Чапек, А. Булгаков, А.В. Солдатов

Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов Южного федерального университета, 344090 Ростов-на-Дону, Сладкова, 178/24

E-mail: guda@sfedu.ru

Эффективная оптимизация условий реакции в микрофлюидном режиме требует проведения *in situ* диагностики и онлайн-обработки данных [1]. В нашей работе мы демонстрируем простую и универсальную систему, основанную на микрофлюидных компонентах, напечатанных на 3D-принтере. Технология DLP-SLA — это удобный инструмент для производства микрофлюидных устройств, адаптированных к смешиванию, генерации капель, измерения оптической плотности, XAS и SAXS. Пропитка маслом 3D-напечатанных чипов улучшает гидрофобность поверхности канала, а использование переменных потоков вода-масло дополнительно предотвращает рост наночастиц на стенках каналов и кювете [2]. Использование капельного режима дает возможность тестировать десятки и сотни комбинаций параметров в час. Для синхротронных исследований генерация длинных капель позволяет получать данные непосредственно через капилляр в квазистационарном режиме, без необходимости использования микрофокусного луча и синхронизации. Предлагаемая система в сочетании с программным обеспечением для автоматического управления экспериментом и алгоритмом выбора точек проб на основе IHS позволяет быстро и эффективно проводить скрининг параметров реакции.

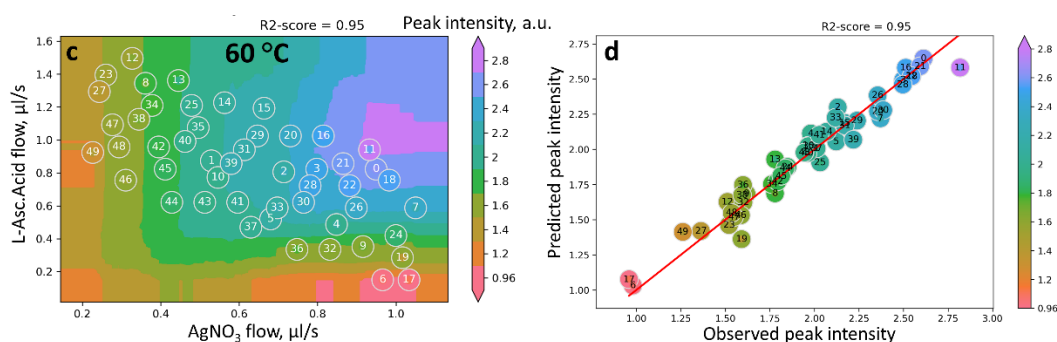


Рисунок 1. Модель, прогнозирующая интенсивность пика поверхностного плазмонного резонанса в UV-vis спектрах наночастиц серебра в зависимости от скорости потоков реагентов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (Соглашение 075-15-2021-1363).

Список литературы

- [1] A. Guda et al., J. Phys. Chem. C 2023, 127, 2, 1097–1108.
- [2] V.V. Shapovalov, et al., Micro and Nano Engineering, 2023, 20, 100224.

Использование нейронных сетей для предсказания свойств полимеров

С.В. Люлин¹, И.В. Волгин¹, П.А. Батырь², А.В. Мацевич³, А.Ю. Добровский¹, В.М. Назарычев¹, С.В. Ларин¹, М.Я. Гойхман¹, Ю.В. Визильтер², А.А. Аскадский³

¹*Институт высокомолекулярных соединений РАН, 199004 Санкт-Петербург,
Большой пр. В.О., 31*

²*Государственный научно-исследовательский институт авиационных систем, 125319
Москва, ул. Викторенко, 7*

³*Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии
наук, 119334 Москва, ул. Вавилова, 28с1*

E-mail: sergey.v.lyulin@gmail.com

Использование методов глубокого машинного обучения становится необходимым инструментом современного виртуального дизайна новых полимеров, обобщающим имеющийся опыт экспериментальных исследований. В отличие от методов молекулярного моделирования, разработка моделей нейронных сетей позволяет как предсказывать свойства новых полимерных молекул, так и предлагать химические структуры, удовлетворяющие желаемым физическим свойствам. Однако при разработке таких моделей основные сложности связаны с отсутствием достаточного количества единообразно полученных экспериментальных данных для разных полимеров. Это существенно ограничивает применение моделей глубокого машинного обучения.

В настоящей работе указанная проблема решается с помощью создания больших синтетических (расчетных) баз данных, характеристики полимеров в которых могут быть получены с помощью метода атомных констант А.А. Аскадского. В этом методе помимо атомных констант содержится ряд компонентов, учитывающих вклад полярных групп в энергию диполь-дипольных взаимодействий и водородных связей в температуру стеклования. Поскольку в уравнение входит ван-дер-ваальсов объем, этот вклад является различным для полярных групп разной химической природы.

Для разработки моделей графовых сверточных нейронных сетей используется метод переноса обучения, в котором собранные и проверенные экспериментальные данные необходимы для окончательной настройки разработанных моделей [1].

Предложенная методология является универсальной и может быть обобщена для прогнозирования различных свойств полимеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (соглашение № 22-13-00066).

Список литературы

[1]. I. V. Volgin, P. A. Batyr, A. V. Matseevich, A. Yu. Dobrovskiy, M. V. Andreeva, V. M. Nazarychev, S. V. Larin, M. Ya. Goikhman, Yu. V. Vizilter, A. A. Askadskii, S. V. Lyulin, *ACS Omega*, **2022**, 7, 48, 43678–43691.

Глубокое машинное обучение для анализа изображений, полученных различными методами микроскопии

А.В. Нартова^{1,2}, А.В. Матвеев¹, А.Г. Окунев¹

¹Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 1

²Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, 630090 Новосибирск, пр. Лаврентьева, 5

E-mail: nartova@catalysis.ru

Анализ изображений, полученных различными микроскопическими методами, с целью поиска и определения параметров различных объектов, является рутинной задачей в самых разных областях науки и технологии. Иногда для получения релевантной статистики необходимо измерить сотни объектов вручную, что трудоемко и времязатратно. Автоматизация данного анализа является весьма актуальной проблемой, в решении которой перспективным является использование методов глубокого машинного обучения (компьютерного зрения) [1]. Указанный подход был реализован при создании платформы iOk (iok.nsu.ru), объединяющей веб-сервис **ParticlesNN** и Telegram-боты **DLgram** и **No Code ML** [2, 3] (Рис. 1). Платформа работает с любыми видами изображений любого качества (электронная, зондовая, оптическая микроскопии, фотографии). Результат распознавания: объекты, их площадь и размеры, а также положение на изображении. Пользователи могут самостоятельно обучать нейронную сеть на своих изображениях. Сервисы находятся в свободном доступе, для их использования навыки программирования не требуются.

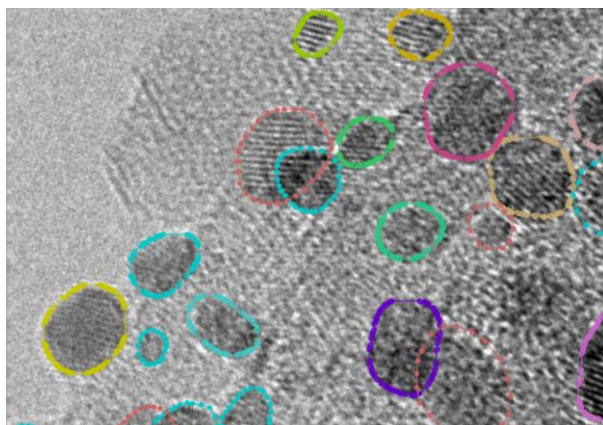


Рис. 1. Результат распознавания ПЭМ - изображения катализатора Pt/Al₂O₃ нейронной сетью.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках программы Приоритет-2030, а также государственного задания ИК СО РАН.

Список литературы

[1] A.G. Okunev, A.V. Nartova, A.V. Matveev. *IEEE*. **2019**, 0940-0943.

[2] A.V. Nartova, M.Y. Mashukov, R.R. Astakhov, V.Y. Kudinov, A.V. Matveev, A.G. Okunev, *Catalysts*. **2022**, 12(2) 135:1-13.

[3] A.V. Nartova, A.V. Matveev, M.Y. Mashukov, V.A. Belotserkovskii, N.N. Sankova, V.Y. Kudinov, A.G. Okunev, *Kinetics and Catalysis*. **2023**, 64 (4), 458–465.

Оптимизация состава катализатора крекинга с использованием математической модели на базе искусственных нейронных сетей

О.В. Потапенко, Т.В. Бобкова, А.С. Юртаева, В.А. Ковеза

*Центр новых химических технологий ИК СО РАН, Институт катализа СО РАН, 644040
Омск, ул. Нефтезаводская, 54*

E-mail: almazra@mail.ru

Современный катализатор крекинга представляет собой композицию, состоящую из активного компонента (цеолитов Y и ZSM-5) и компонентов матрицы (аморфного алюмосиликата, оксида алюминия и глины). Каждый из компонентов оказывает влияние на физико-химические и каталитические свойства готового катализатора. При этом свойства каталитической системы в целом не являются аддитивными относительно свойств отдельных компонентов. Основной причиной нелинейности зависимости свойств катализатора от его состава является наличие ряда взаимодействий между компонентами, происходящими в процессе приготовления (составление суспензии, сушка, прокалка) и эксплуатации катализатора. Применение регрессионных моделей для описания и оптимизации свойств готового катализатора крекинга часто недостаточно.

В работе описан подход для оптимизации состава катализатора крекинга с целью получения высокого выхода бензина и легких олефинов (этилена, пропилена и бутиленов) для системы на основе цеолита Y в НРЗЭ-форме, аморфного алюмосиликата, оксида алюминия и каолиновой глины. Оптимизация выполнена на основе математической модели зависимости свойств катализатора от его состава. Математическая модель построена на основе искусственной нейронной сети – многослойном перцептроне. Обучение сети выполнено на основании данных лабораторных экспериментов катализаторов крекинга (испытания согласно ASTM D 3907, D 5154) методом обратного распространения ошибки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект АААА-А21-121011890074-4).

Интеллектуальные технологии в инфохимии

Е.В. Скорб

Университет ИТМО, 196002 Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, д.9

E-mail: skorb@itmo.ru

Целью исследования является создание платформ сбора, агрегации, интеллектуального анализа и предсказательного моделирования поведения сложных химических систем. Применение машинного обучения позволяет найти альтернативу классическим подходам в химии [1]. Инфохимия сегодня собирает “под своим зонтиком” области на стыки химии и информационных технологий: хемоинфоматики, хемотроники, хеометрики, использования искусственного интеллекта (ИИ) в химии и др. Можно отметить и ряд работ по использованию гидрогелевых структур на основе полиэлектролитов для сбора баз данных вольт-амперных характеристик для тренировок нейросетей [2-4]. Перспективным является и передача информации от протекания химической реакции для создания механоактивируемых устройств [5], предсказание реакций в полиэлектролитном окружении [6, 7]. Еще один из примеров недавних работ показывает как используя методы с обучением на собранных при помощи высокоскоростной камеры данных сонохимической платформы [8, 9] возможен анализ состава жидкостей, в том числе и в потоке. Интересным являются и подходы по применению топологического анализа сонохимически наноструктурированных поверхностей [10, 11] и функциональных микрочастиц [12, 13], и создания баз данных по скринингу молекул и веществ для биомедицинских применений [14, 15]. В развитии темы подходы и методы инфохимии будут расширены далее с фокусом на проекты сбора данных в роботизированных лабораториях и используя гражданскую науку.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта FSER-2021-0013.

Список литературы

- [1] Orlova, T. et al. *Digital Discovery* **2023**, 2, 298-315.
- [2] Ivanov, A. S. et al. *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, 12, 2017-2022.
- [3] Ivanov, A. S. et al. *ACS Appl. Bio Mater.* **2020**, 3, 7352-7356.
- [4] Lavrentev, F. V. et al. *ACS Appl. Mater. Interf.* **2022**, 14, 7321-7328.
- [5] Paikar, A. et al. *Adv. Mater.* **2022**, 34, 2106816.
- [6] Honopolskyi, A. I. et al. *Chem* **2023**, DOI: 10.1016/j.chempr.2023.08.029.
- [7] Kukhtenko, E. V. et al. *Polymers* **2023**, 15, 45.
- [8] Korolev, I. et al. *J. Phys. Chem. B.* **2022**, 126, 3161-3169.
- [9] Aliev, T. A. et al. *ACS Appl. Mater. Interf.* **2023**, 15, 52010–52020.
- [10] Zhukov, et. al. *ACS Appl. Mater. Interf.* **2022**, 14, 2351-2359.
- [11] Zhukov, et. al. *ACS Appl. Eng. Mater.* **2023**, DOI: 10.1021/acsaem.3c01358.
- [12] Sabbaukh, M. et al. *Ultrasonics Sonochem.* **2023**, 92, 106247.
- [13] Aliev, T. A. et al. *Nano Select* **2022**, 3, 1526-156.
- [14] Shityakov, S. et al. *R. Soc. Open Sci.* **2022**, 9, 220160.
- [15] Shityakov, S. et al. *R. Soc. Open Sci.* **2023**, 10, 221594.

Машинно-обучаемые силовые поля

А.В. Шапеев¹, И.С. Новиков^{1,2}, Т.С. Костюченко^{1,2}, Е.В. Подрябинкин¹, Т.Н. Миряшкин¹

¹Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Территория Инновационного Центра «Сколково», Большой бульвар, 30с1

²Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, 119334 Москва, ул. Косыгина, 4

E-mail: alexander@shapeev.com

Машинно-обучаемые потенциалы (МОП), или машинно-обучаемые силовые поля, представляют собой модели межатомного взаимодействия по быстрдействию схожие с реактивными силовыми полями (такими как ReaxFF [1]), но по точности сравнимые с квантово-химическими моделями [2, 3]. Благодаря тому, что в функциональной форме МОПов явно не учитываются электронные степени свободы, данные модели по быстрдействию близки к силовым полям, но за счет того, что данные модели обучаются на большом числе квантово-химических данных, их точность оказывается существенно выше, чем классических (то есть не основанных на большом числе данных) силовых полей. Более того, зачастую точность воспроизведения выбранной квантово-химической модели таким силовым полем оказывается выше, чем точность самой квантово-химической модели.

Появление МОПов привело к тому, что “узким местом” в построении таких силовых полей стало то, что обучающая выборка набиралась вручную методом проб и ошибок. Методы искусственного интеллекта и в этом вопросе пришли на помощь: с помощью алгоритмов активного обучения представляется возможным автоматический набор обучающей выборки в ходе моделирования. Это позволяет в автоматическом режиме решать целый ряд задач, включая определение устойчивых кристаллических фаз материалов, расчет упругих свойств, диффузии дефектов, теплопроводности, различных свойств двумерных материалов, а расширение функциональной формы МОПов магнитными степенями свободы позволяет предсказывать свойства магнитных материалов [4].

В своем докладе я проиллюстрирую то, как МОПы позволяют решать описанные выше задачи и как применение методов искусственного интеллекта на более высоком уровне, а именно для обработки данных и планирования большого числа молекулярно-динамических расчетов, позволяют в автоматическом режиме получать такие сложные свойства материалов, как фазовые диаграммы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 23-13-00332, <https://rscf.ru/project/23-13-00332/>).

Список литературы

- [1] T. Senftle, S. Hong, M. Islam, M. S. Klyasa, Y. Zheng, Y. Shin, C. Junkermeier, R. Engel-Herbert, M. Janik, H. Aktulga, T. Verstraelen, A. Van Duin, *npj Computational Materials*. **2016**, 2(1), 1-14.
- [2] A. Shapeev, *Multiscale Modeling & Simulation*. **2016**, 14(3), 1153-1173.
- [3] I. Novikov, K. Gubaev, E. Podryabinkin, A. Shapeev, *Machine Learning: Science and Technology*. **2020**, 2(2), 025002.
- [4] I. Novikov, F. Kormann, B. Grabowski, A. Shapeev, *npj Computational Materials*. **2022**, 8(1), 13.

Peakonly: высокоточный алгоритм обнаружения пиков в ВЭЖХ-МС данных с использованием нейросетей глубокого обучения

В.В. Яньшолё, А.Д. Мельников

МТЦ СО РАН, 630090 Новосибирск, ул. Институтская, 3а

E-mail: vadim.yanshole@tomo.nsc.ru

Одним из наиболее узких мест при анализе данных, полученных на приборах с жидкостной хроматографией и масс-спектрометрическим детектированием (ВЭЖХ-МС) является автоматический поиск пиков (или признаков, features) в исходных «сырых» данных. Существующие популярные приложения для поиска пиков и автоматического анализа ВЭЖХ-МС данных, такие как XCMS или MZmine2, часто генерируют множество ложноположительных пиков, доля которых может достигать 20-50%.

Проблема поиска пиков может быть решена с помощью применения технологий глубокого обучения, в частности, свёрточных нейронных сетей (convolutional neural networks, CNN), которые на сегодняшний день широко используются в задачах компьютерного зрения, таких как классификация или распознавание объектов на изображениях. Мы разработали алгоритм peakonly [1] с открытым исходным кодом на Python, который с помощью двух CNN находит пики в ВЭЖХ-МС данных (рис. 1): первая CNN фильтрует шум, вторая CNN находит границы пиков. CNN были обучены на аннотированном вручную наборе данных, состоящем из более чем 6000 ROI из реальных ВЭЖХ-МС и ГХ-МС данных с примесью синтетических данных. Разработанный подход показал надежную и эффективную обработку данных, достигая почти предельной точности обнаружения пиков в 97%.

Peakonly работает с данными от различных ВЭЖХ-МС и ГХ-МС приборов, доступен с графическим пользовательским интерфейсом и может пакетно обрабатывать несколько файлов, включая сопоставление пиков между различными файлами и автоматическое заполнение нулями. Исходный код доступен на GitHub (<https://github.com/arseha/peakonly>).

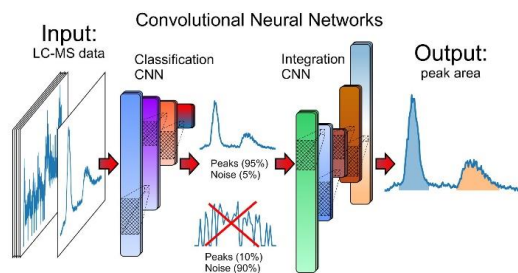
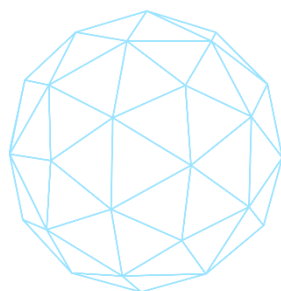


Рис. 1. Схема поиска пиков в ВЭЖХ-МС данных с помощью алгоритма peakonly.

Список литературы

[1] A.D. Melnikov, Y.P. Tsentalovich, V.V. Yanshole, *Analytical Chemistry*. 2020, 92, 1, 588-592.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ



Топологический анализ данных наноразмерной шероховатости полиионных сборок с использованием методов машинного обучения

А.С. Агликов, Т.А. Алиев, Е.В. Скорб

Университет ИТМО, 197101 Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49, лит. А

E-mail: aglikov.aleksandr@gmail.com

Послойное осаждение полиэлектролитов – широко распространённый метод модификации и функционализации поверхности [1]. Слоистые структуры MXene состава $Ti_3C_2T_x$, где Т – различные группы (Т), например, оксо- (=O) или гидроксо- (-OH), имеют перспективное применение в электронике, сенсорных системах, и др [2]. В работе проведён анализ наноразмерной шероховатости полиионных сборок, и структур с включениями твёрдых частиц MXene методом атомно-силовой микроскопии при использовании топологического анализа данных (ТАД) [3, 4]. Предложен алгоритм распознавания количества слоёв методами машинного обучения. Логика описываемого эксперимента приведена на Рис.1.

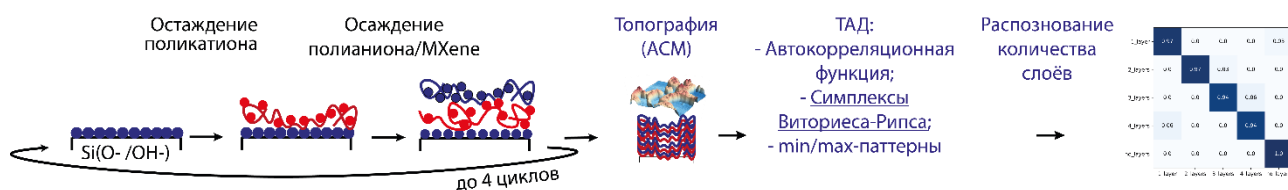


Рис. 1. Схема экспериментального подхода

Применение ТАД позволило уменьшить количество экспериментальных данных для использования их в задачах распознавания. Данные, использованные в работе, и программное обеспечение доступны по ссылке: https://github.com/ShockOfWave/polyelectrolytes_recognition/.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 21-73-10185).

Список литературы

- [1] Ivanov, A. S.; Pershina, L. V.; Nikolaev, K. G.; Skorb, E. V. *Macromol. Biosci.* **2021**, 21(10), 1–16.
- [2] Aglikov, A.; Volkova, O.; Bondar, A.; Moskalenko, I.; Novikov, A.; Skorb, E. V.; Smirnov, E. *ChemPhysChem.* **2023**, e202300187.
- [3] Sychov, M.; Eruzin, A.; Semenova, A.; Katashev, P.; Mjakin, S.; Zhukov, M. V.; Aglikov, A.; Nosonovsky, M.; Skorb, E. V. *Langmuir.* **2023**, 39(35), 12336–12345.
- [4] Zhukov, M. V.; Aglikov, A. S.; Sabboukh, M.; Kozodaev, D. A.; Aliiev, T. A.; Ulasevich, S. A.; Nosonovsky, M.; Skorb, E. V. *ACS Appl. Eng. Mater.* **2023**, 1(8), 2084–2091.

Топологические методы анализа и дизайна полимерных сеток

Е.В. Александров^{1,2,3}

¹ФГБОУ ВО СамГМУ Минздрава России, 443079 Самара, ул. Чапаевская, 89

²ФГБОУ ВО СамГТУ, 443100 Самара, ул. Молодогвардейская, 244

³Центр НТИ «Цифровое материаловедение:

новые материалы и вещества» МГТУ им. Н.Э. Баумана, 105005 Москва, 2-я Бауманская, 5

E-mail: aleksandrov_ev1@mail.ru

Топологический анализ получил большую популярность в связи с его широкими возможностями для оцифровывания структур материалов и разработки дескрипторов, коррелирующих с сорбционными, электрическими, механическими, каталитическими и многими другими свойствами. Разработаны топологические подходы к дизайну одно-, двух- и трехпериодических сеток полимерных материалов и пористых органических кристаллов [1-9]. Проанализированы структуры более 90000 доступных в кристаллографических базах данных металл-органических координационных полимеров (МОКП) и водородносвязанных органических каркасов (ВОК). Исследованы более 100 новых материалов с практически значимыми свойствами. Создана наиболее полная периодически обновляемая систематика топологических мотивов полимерных сеток и их переплетений. Разработана и введена в общемировую практику система принципов дизайна новых периодических структур, использующая выявленные структурно-топологические корреляции. С использованием топологических корреляций созданы гибридные катализаторы МОКП/полимер/Pd для конверсии биомассы и ВОК для фотокатализируемого восстановления CO₂ до CO при комнатной температуре [7,9]. Предлагается использовать топологические методы для прогнозирования температуры стеклования и модуля Юнга органических полимерных материалов.

Список литературы

- [1] Е.В. Александров, А.П. Шевченко, Н.А. Некрасова, В.А. Блатов, *Успехи химии*. **2022**, 91, RCR5032.
- [2] М.А. Агафонов, Е.В. Александров, Н.А. Артюхова, et al., *Журнал структурной химии*. **2022**, 63(5), 535-718.
- [3] E. V. Alexandrov, Y. Yang, L. Liang, J. Wang, V. A. Blatov, *CrystEngComm*. **2022**, 24, 2914-2924.
- [4] A. V. Sokolov, A. V. Vologzhanina, T. V. Sudakova, Y. V. Popova, E. V. Alexandrov, *CrystEngComm*. **2022**, 24, 2505-2515.
- [5] Q. Wen, M. C. Gregorio, L. Shimon, I. Pinkas, N. Malik, A. Kossoy, E. Alexandrov, D. M. Proserpio, M. Lahav, M. E. Boom, *Chemistry – A European Journal*. **2022**, 28(54), e202201108.
- [6] D. Blasi, S. Quici, S. Orlandi, P. Mercandelli, A. V. Sokolov, E. V. Alexandrov, L. Carlucci, *CrystEngComm*. **2022**, 24(30), 5474–5486.
- [7] V.V. Karve, N.A. Nekrasova, M.Asgari, O.Trukhina, I. Kochetygov, H. A. S. Yang, E. V. Alexandrov, J. Luterbacher, W. L. Queen, *Chemistry of Materials*. **2022**, 34(22), 9854–9864.
- [8] V. Anipa, A. Tarzia, K. E. Jelfs, E. V. Alexandrov, M. A. Addicoat Pore topology analysis in porous molecular systems. *Royal Society Open Science*. **2023**, 10(2), 220813.
- [9] Q. Yin, E. V. Alexandrov, D.-H. Si, Q.-Q. Huang, Z.-B. Fang, Y. Zhang, A.-A. Zhang, W.-K. Qin, Y.-L. Li, T.-F. Liu, D. M. Proserpio, *Angewandte Chemie International Edition*. **2022**, 61(6), e202115854.

Оценка качества предсказания ИК-спектров полициклических ароматических углеводородов с использованием нейронных сетей

Б.Г. Бегларян, А.С. Закускин, Т.А. Лабутин

Химический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

E-mail: babken_beglaryan@laser.chem.msu.ru

Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) играют ключевую роль в эволюции межзвездной среды. Поэтому для астрохимических исследований, основанных на наблюдательных данных, особый интерес представляет моделирование ИК-спектров этих молекул, при этом необходимо получение спектров для очень большого числа соединений. Традиционно используемая для таких задач теория функционала плотности (DFT) исключительно ресурсоемка, особенно для ПАУ большого размера. Это послужило основанием для применения нейронных сетей для ускорения предсказания ИК-спектров ПАУ. Целью данной работы являлась оценка погрешности предсказания ИК-спектров астрохимически значимых молекул ПАУ нейронными сетями. Оценка была произведена для данных из работы [1]. Также была осуществлена попытка повышения качества предсказания спектров ПАУ за счет рассмотрения улучшения структуры обучающего набора, а также оптимизации функции потерь и способов представления молекул.

Построение и обучение нейронной сети для предсказания ИК-спектров ПАУ проводилось в среде Python. Кодировка молекул была воспроизведена с помощью встроенной функции библиотеки RDKit, разбивающей молекулы на фрагменты согласно алгоритму Моргана. Нами была выполнена оценка качества предсказания ИК-спектров с применением различных способов кодировки. Среди рассмотренных функций потерь были как стандартные (RMSE), так и более специфичные для спектральных данных, например, EMD (Earth Movers's Distance). Исходный обучающий набор был дополнен молекулами из баз данных, представленных в работе [2]. При этом большее число этих молекул не относится к классу ПАУ. Значительного улучшения качества предсказания можно добиться путем селекции ароматических молекул с функциональными группами. Оценка погрешности качества предсказания показала, что нейронные сети успешно применимы для решения задачи моделирования ИК-спектров ПАУ. В качестве потенциального способа улучшения предсказания спектров стоит также рассмотреть возможность применения графовых нейронных сетей на стадии кодирования молекул.

Список литературы

[1] P. Kovács et al., *The Astrophysical Journal*, **2020**, 902(2).

[2] C. McGill et al., *Journal of Chemical Information and Modeling*, **2021**, 61(6), 2594-2609.

Автоматизация направленного поиска предреакционных комплексов в реакции хиральных индукторов с бензальдегидом

О.С. Бородина, Е.В. Барташевич

Южно-Уральский государственный университет (НИУ), 454080 Челябинск, пр. Ленина, 76

E-mail: borodinaos@susu.ru

Возможное предреакционное состояние между гидроксипролиниевыми группами хиральных индукторов и бензальдегидом в реакции Биджинелли [1, 2] характеризуется наличием множественных Н-связей (рис. 1а). Поиск наиболее вероятных предреакционных комплексов, полученных методом метадинамического моделирования, осуществлялся автоматизированно по условию одновременного наличия Н-связей 1-го и 2-го типов (рис. 1г) с учетом положения остатка трифторуксусной кислоты с Н-связью 3.

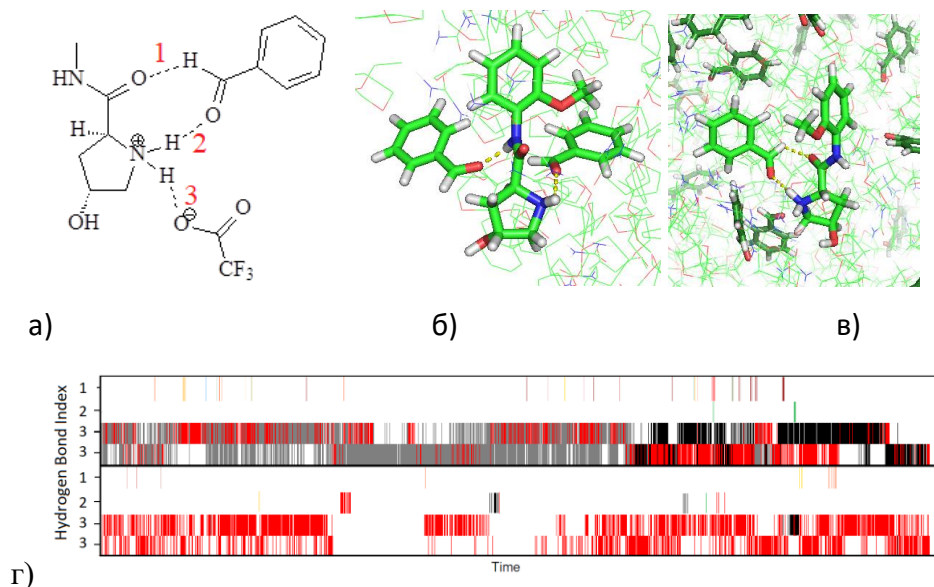


Рис. 1. а) Типы Н-связей; Н-связи с двумя (б) и одной (в) молекулой бензальдегида; г) карта встречаемости Н-связей в траекториях метадинамики

Установлено, что преобладают состояния, где гидроксипролиниевый фрагмент связывается с двумя молекулами бензальдегида (рис. 1б). Найденные при задании дополнительного критерия комплексы, в которых Н-связи типа 1 и 2 формируются одной молекулой бензальдегида (рис. 1в), были использованы в дальнейших расчетах (B3LYP/6-311G**) барьеров реакции присоединения бензальдегида с образованием хирального центра. Найдено, что разница в барьерах реакции при подходе с *Re* и *Si* сторон в большой степени обусловлена разницей в энергиях предреакционных комплексов.

Список литературы

- [1] O. Fedorova, Y. Titova, I. Ovchinnikova, *Mendeleev Commun.* **2018**, 28, 357.
[2] O. Borodina, I. Ovchinnikova, O. Fedorova, *Comput. Theor. Chem.* **2022**, 1217, 113885.

Топологический подход к реконструктивным твердофазным переходам и его применение для моделирования новых материалов

Е.О. Бухтеева, А.А. Кабанов, В.А. Блатов

*Самарский государственный технологический университет, 443100 Самара, ул.
Молодогвардейская, 244*

E-mail: bukhteevaeo@mail.ru

В работе предложен новый подход к описанию реконструктивных твердофазных переходов, который основан на анализе топологических свойств периодических атомных сеток, которые определяют связность кристаллического пространства с точки зрения межатомных контактов, и отношений «подсетка-надсетка», характеризующих соответственно разрыв или образование таких контактов. [1]

В ходе исследования введено понятие «область твердофазной реакции», которая представляет собой свободное пространство, ограниченное тайлами - областями свободного пространства, не содержащими ни атомов, ни связей.] Тайлы образуют зону реакции вокруг данного атома А, таким образом, однозначно определяя соседние атомы, которые могут взаимодействовать с атомом А. Зона реакции не зависит от геометрии кристаллической структуры и определяется только топологическими свойствами тайлов.

Предлагаемый подход позволяет резко сократить количество пробных структур при моделировании твердофазных переходов или создании новых кристаллических веществ. Все кристаллические структуры, топологически подобные данной, могут быть найдены путем анализа ее топологической окрестности в конфигурационном пространстве, в результате чего резко сокращается число вероятных геометрических конфигураций для анализа. Данный подход предсказывает возможную аморфизацию фазы после перехода, а также возможные превращения "монокристалл-монокристалл".

Этот подход был применен нами для прогнозирования 72 новых аллотропов углерода из исходных экспериментально доказанных кристаллических углеродных структур. В результате были получены модели четырех аллотропов с твердостью по Виккерсу выше 90 ГПа. С использованием топологического подхода показано, что три из них структурно похожи на известные сверхтвердые углеродные аллотропы, М-углерод и W-углерод.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-13-00062).

Список литературы

- [1] V.A. Blatov, A.A. Golov, C. Yang et al. *Scientific Reports*. **2019**, 9, 6007
- [2] V.A. Blatov, O. Delgado-Friedrichs, M. O'Keeffe and D.M. Proserpio, *Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography*. **2007**, 63(5), 418-425.

Модели машинного обучения в задачах анализа упорядоченности размещения частиц на многослойной поверхности

Р.Г. Зайцев, В.Р. Сорокин, В.В. Ершов

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, 346428 г. Новочеркасск, ул. Просвещения, 132

E-mail: rzajtsev@mail.ru

Использование методов машинного обучения является значимым фактором повышения эффективности научных исследований практически во всех областях современной науки [1]. Одним из перспективных направлений внедрения передовых методов машинного обучения, в том числе искусственных нейронных сетей, является анализ фотоизображений, полученных с помощью электронной микроскопии, в том числе исследование характеристик расположения наномасштабных частиц на многослойных поверхностях [2].

Для разработки системы анализа упорядоченности расположения наномасштабных частиц использованы обучающие наборы данных – датасеты, сгруппированные экспертным методом по признаку упорядоченности [2,3].

Для программной реализации использовалась нейросетевая сверточная модель Xception[5], реализующая архитектуру конкатенации результатов свертки слоев переменной размерности. В модели использованы нелинейная функция активации ReLU и регуляризация L2-нормой. Полученная нейронная сеть реализована в виде приложения – блокнота Google Colab и предназначена для тестирования методологии. В рамках развития работы предполагается дифференциация артефактов и структур на обучающем датасете и реализация алгоритма классификации на основе генеративно-состязательных сетей.

Работа выполнена в рамках реализации Программы развития ЮРГПУ (НПИ) «Приоритет-2030» (соглашение 075-15-2023-285/3).

Список литературы

- [1] AI will transform science — now researchers must tame it. Editorial Board, *Nature* 621, 658 (2023), doi: <https://doi.org/10.1038/d41586-023-02988-6>.
- [2] Boiko, D. A., Pentsak, E. O., Cherepanova, V. A., Gordeev, E. G. & Ananikov, V. P. Deep neural network analysis of nanoparticle ordering to identify defects in layered carbon materials. *Chem. Sci.* 12, 7428–7441 (2021)
- [3] Boiko, Daniil; Pentsak, Evgeniy; Cherepanova, Vera; Ananikov, Valentine (2020). Electron microscopy dataset for the recognition of nanoscale ordering effects and location of nanoparticles — Dataset 1 (ordered). figshare. Dataset. <https://doi.org/10.6084/m9.figshare.11783661.v1>
- [4] Boiko, Daniil; Pentsak, Evgeniy; Cherepanova, Vera; Ananikov, Valentine (2020). Electron microscopy dataset for the recognition of nanoscale ordering effects and location of nanoparticles — Dataset 2 (disordered). figshare. Dataset. <https://doi.org/10.6084/m9.figshare.11783667.v1>
- [5] Chollet F. Xception: Deep learning with depthwise separable convolutions //Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. – 2017. – С. 1251-1258.
- [6] Направления развития и эволюционные характеристики генеративно-состязательных сетей / Р. Г. Зайцев, А. Р. Зайцева // Друкеровский вестник. – 2023. – № 1(51). – С. 227-232. – DOI 10.17213/2312-6469-2023-1-227-232.

Предсказание теплофизических свойств полимеров при помощи искусственного интеллекта

И.С. Злобин^{1,2}, Н.С. Торопцев², А.А. Павлов^{1,2}

¹Московский Государственный Технический Университет им. Н.Э.Баумана, 105005 Москва, 2-я Бауманская ул., 5/1

²Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова РАН, 119334, Москва, ул. Вавилова, 28с1

E-mail: zlobin.is@phystech.edu

Разработка и внедрение новых полимерных материалов зачастую предусматривает огромное количество экспериментальной работы по получению и измерению свойств таких материалов или привлечению больших вычислительных мощностей для расчета искомых свойств методами молекулярного моделирования. Поиск корреляций «структура – свойство» при помощи искусственного интеллекта может существенно ускорить отбор наиболее перспективных полимеров, что является важным условием успешного дизайна новых полимерных материалов. Нами предложена предикативная модель предсказания теплофизических свойств полимеров по их SMILES-кодировке, векторизуемой при помощи Mol2Vec [1]. Рассмотрена возможность уточнения предсказаний модели для уже синтезированных полимеров с частично известными свойствами (рис. 1) и исследована зависимость метрик модели от полноты базы данных и используемых алгоритмов регрессии.

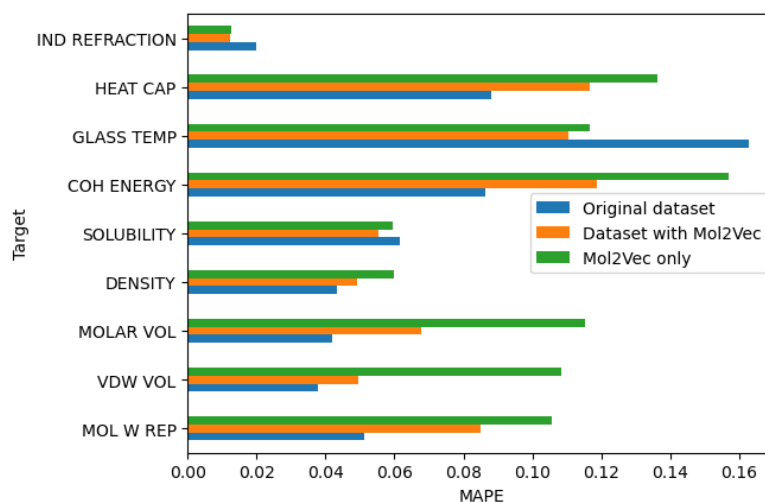


Рис. 1. Сравнение метрик MAPE для разных входных данных модели: исходных физических данных (синий), данных с добавлением векторных представлений полимеров (желтый) и только векторных представлений (зеленый).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №22-73-00148) и проекта Bauman Deep Tech программы «Приоритет 2030».

Список литературы

[1] S. Jaeger, S. Fulle, S. Turk, *J. Chem. Inf. Model.*, **2018**, 58, 27-35.

Применение элементов глубокого машинного обучения для прогнозирования фотолюминесцентных свойств комплексных соединений структуры типа перовскитов

Т.Ю. Иваненко^{1,2}, М.С. Молокеев²

¹*Институт химии и химической технологии СО РАН, 660036 Красноярск,
ул. Академгородок, 50/24*

²*Институт физики имени Л.В. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, ул. Академгородок,
50/38*

E-mail: timivonk@gmail.com

Одним из приоритетных направлений использования искусственного интеллекта в научных исследованиях является предсказание функциональных свойств соединений и материалов. Прогресс в прогнозировании фотолюминесцентных (ФЛ) свойств новых материалов гораздо скромнее, чем в случаях магнитных и электропроводящих свойств, поскольку набор факторов, влияющих на ФЛ, очень разнообразен.

Среди классов соединений, проявляющих ФЛ свойства в кристаллическом состоянии, особый интерес представляют 0D перовскиты ns^2 -ионов металлов (Pb^{2+} , Sb^{3+} , Bi^{3+} , Sn^{2+}) ввиду высокой стабильности и эффективности ФЛ их органических комплексов.

Нами была предложена модель на основе машинного обучения, способная предсказывать квантовый выход и длину волны ФЛ исходя из структурных данных комплексных соединений (рис. 1).



Рисунок 1 – Общая схема работы алгоритма

В качестве ключевых факторов, влияющих на ФЛ, были выбраны кратчайшее расстояние металл-металл в структуре и прочность внутримолекулярных водородных связей. Анализ методом главных компонент показал, что наибольшее влияние на ФЛ оказывает расстояние между металлическими центрами и геометрия водородных связей в структуре.

Данные рентгено-структурного анализа получены на монокристалльном дифрактометре «Bruker SMART APEX II» Красноярского регионального центра коллективного пользования СО РАН.

Диагностика нанокерамики в клетках млекопитающих с использованием корреляционной микроскопии и машинного обучения

И.Р. Ишмухаметов, Р.Ф. Фахруллин

Институт фундаментальной медицины и биологии, Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008 Казань, ул. Кремлевская, 18

E-mail: irishmukhametov@gmail.com

Использование нанокерамики в биомедицине стало предметом интенсивных исследований благодаря их уникальным свойствам и высокому потенциалу применения [1]. Однако спектральная идентификация и характеристика керамических наночастиц в образцах остается сложной задачей ввиду неоднородности природных материалов [2]. В рамках данной работы предложена система анализа гиперспектральных изображений на основе алгоритмов машинного обучения для идентификации нанокерамических частиц, а также показано ее применение в образцах клеток аденокарциномы легких человека A549. В качестве объектов исследования были выбраны три типа наночастиц: галлуазит, каолинит и сепиолит.

Предварительно с целью выявления уровня токсичности материалов по отношению к клеткам A549 был проведен колориметрический МТТ-тест образцов нанокерамики в диапазоне концентраций 1-100 мкг/мл. Те же концентрации были использованы для визуализации частиц в клетках с использованием техники усиленной темнопольной микроскопии, дополненной гиперспектральной съемкой (УТМ-ГС). В ходе микроскопии были собраны массивы данных, содержащие спектральную информацию частиц как в растворе, так и в клетках человека, которые затем использовались для обучения и тестирования нейронной сети.

Результаты показали, что частицы галлуазита и каолинита не проявляли цитотоксичности, в то время как частицы сепиолита значительно подавляли жизнеспособность клеток начиная с концентрации в 10 мкг/мл. Микроскопический анализ не выявил явных морфологических изменений клеток, а визуально различимые частицы присутствовали во всех экспериментальных образцах. Архитектура одномерной остаточной нейронной сети была выбрана как оптимальная для идентификации спектров частиц. Тестирование полученной нейронной сети выявило, что она превосходит по точности традиционный метод спектрального углового отображения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 20-13-00247).

Список литературы

- [1] K. S. Katti, H. Jasuja, S. V. Jaswandkar, S. Mohanty, D. R. Katti, *Mater. Adv.*, **2022**, 3, 7484–7500.
- [2] S. Tanaka, H. Tsuru, K. Someno, Y. Yamaguchi, *Geosciences*, **2019**, 9, 195.

Дизайн комплексообразователей для переработки отработанного ядерного топлива с использованием глубокого машинного обучения

К.В. Карпов, И.С. Пикулин, А.А. Митрофанов

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва,
Ленинские горы, 1*

e-mail: karpov@radio.chem.msu.ru

Экстракционное разделение – один из основных методов работы с отработавшим ядерным топливом (ОЯТ). Значительное внимание уделяется поиску новых перспективных лигандов – малых органических молекул, с помощью которых из высокоактивных отходов выделяются элементы, пригодные для вторичного использования. При дизайне нового лиганда, необходимо учитывать сразу множество параметров, определяющих возможность его использования.

Перспективным направлением в области дизайна новых соединений является *de novo* дизайн – применение методов искусственного интеллекта для автоматической генерации химических объектов с заданными свойствами. Для применения таких методов необходим способ быстрой оценки целевого свойства создаваемых соединений. Подходящим методом являются предсказательные модели “структура-свойство”, позволяющие определять свойство химического соединения, основываясь на его структуре [1].

В рамках данной работы была разработана система по получению структур перспективных комплексообразователей f-элементов, состоящую из графовой модели машинного обучения [2] для предсказания константы устойчивости комплекса, генеративной модели для получения структур перспективных экстрагентов и алгоритма поиска равновесной трехмерной геометрии лиганда для дальнейшего анализа предложенных структур.

Список литературы

- [1] Mitrofanov, A. A., Matveev, P. I., Yakubova, K. v., Korotcov, A., Sattarov, B., Tkachenko, V., & Kalmykov, S. N. *Molecules*. **2021**, 26, 3237.
[2] Karpov, K., Mitrofanov, A., Korolev, V., & Tkachenko, V. *Journal of Physical Chemistry Letters* **2021**, 12(38), 9213–9219.

Автоматический масс-спектрометрический поиск помогает открывать новые реакции

**К.С. Козлов^{1,2}, Д.А. Бойко^{1,2}, Ю.В. Бурыкина¹, В.В. Ильюшенкова¹, А.Ю. Костюкович¹,
Е.Д. Патиль¹, В.П. Анаников¹**

¹*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47*

²*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3*

E-mail: Konstantin.kozlov@ioc.ac.ru

Масс-спектрометрия высокого разрешения (МСВР) дает возможность проводить идентификационный анализ большого разнообразия сложных объектов, в том числе реакционных смесей. С течением времени в лабораториях и институтах аккумулируются терабайты научных данных, полноценная интерпретация которых затруднена отсутствием доступных инструментов и ресурсов для их обработки. Данная проблема создает потребность в создании поисковых алгоритмов, которые позволили бы по вводимой пользователем молекулярной формуле находить все спектры, в которых заданный ион может быть обнаружен. В основе программной платформы лежит обратный индекс. При создании поисковой системы использовались алгоритмы искусственного интеллекта, которые смогли повысить точность поиска и уменьшить число ложноположительных ответов. С использованием разработанной системы поиска было проведено исследование наличия 520 комбинаторно сгенерированных потенциальных побочных продуктов в более чем 20000 масс-спектрах. В результате обнаружены новые побочные продукты в масс-спектрах, зарегистрированных несколько лет назад. Дополнительно была проведена тщательная экспериментальная валидация образования найденных побочных продуктов в реакции Мизороки-Хека, катализируемых Pd/ННС-комплексами, в том числе с использованием тандемной масс-спектрометрии. Широкая применимость поисковой системы дает возможность в будущем ускорить процесс химических открытий и повысить эффективность масс-спектрометрического метода.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 21-13-00193).

Применение подхода *in silico* для поиска новых полимерных материалов

А.А. Книжник^{1,2}, П.В. Комаров^{3,4}, Д.Б. Ширабайкин², А.С. Сеница^{1,2}, С.В. Трепалин^{2,5},
Б.В. Потапкин^{1,2}

¹НИЦ «Курчатовский институт», 123182 Москва, пл. Академика Курчатова, 1

²ООО «Кинтех Лаб», 123298 Москва, ул. 3-я Хорошевская, 12

³ИНЭОС РАН, 119991 Москва, ул. Вавилова, 28

⁴Тверской государственный университет, 170002 Тверь, Садовый ул. 35

⁵ВИНИТИ РАН, 125215 Москва, ул. Усиевича, 20

E-mail: pv_komarov@mail.ru

В докладе представлен машинно-ориентированный подход для систематического поиска новых полимерных материалов с улучшенными свойствами. Разработанные программы GenStruc и PolyPred выполняют scaffold-based построение структуры наименьших повторяющихся звеньев (НПЗ) линейных полимерных цепей и характеризацию физико-химических свойств для дальнейшего отбора по заданному критерию. В GenStruc НПЗ генерируются с помощью алгоритмов перебора и Монте-Карло с использованием предварительно созданной базы данных (БД) структурных элементов основных цепей и боковых заместителей посредством декомпозиции полимеров из БД [1]. Отдельное внимание уделялось созданию фильтров на основе InChIKey для удаления дубликатов, что оптимизирует создание баз данных химических структур и их свойств. С помощью GenStruc создана БД из 5 142 153 НПЗ, из которой выделено 787 740 уникальных структур, доступных по ссылке [2]. Регрессионная модель Бицерано [1], реализованная в PolyPred, позволила произвести быструю обработку большого массива данных. В качестве примера отбора НПЗ рассматривается поиск структур с максимальным значением диэлектрической проницаемости и показателем преломления. В полученном перечне идентифицированы известные полимеры, свойства которых, полученные по предсказанию PolyPred, согласуются с экспериментом, что делает возможным рассматривать построенный подход как адекватный. Показано, что количество найденных полимеров с экстремальными значениями свойств сопоставимо с результатами обработки PolyPred открытой БД РИМ [3]. Дальнейшее развитие обсуждаемого подхода требует разработки метода прогнозирования возможности синтеза виртуально сконструированных полимеров. В настоящее время эти функции выполняют фильтры анализа химических связей.

Список литературы

[1] J.Bicerano, *Prediction of polymer properties*, Marcel Dekker Inc., NY-Basel, **2002**, 1-746.

[2] GitHub: Available online: <https://github.com/trepalin/KintechLab> (accessed on 24 June **2023**).

[3] M.Ruimin, L.Tengfei, *J. Chem. Inf. Model.* **2020**, *60*, 4684–4690.

Нейронные сети на огрубленном кристаллическом графе как инструмент для дизайна нанопористых материалов

В.В. Королев^{1,2}, А.А. Митрофанов²

¹*Институт перспективных исследований проблем искусственного интеллекта и интеллектуальных систем МГУ имени М.В. Ломоносова, 119234 Москва, Ломоносовский просп., 27, к. 1*

²*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3*

E-mail: korolewadim@gmail.com

Нанопористые материалы, включая металлоорганические и органические ковалентные каркасы, представляют интерес благодаря широкому спектру потенциальных приложений в “зеленой” энергетике. Разнообразие их свойств обусловлено возможностью варьировать структурные компоненты (органические линкеры и металлсодержащие координационные центры), однако обширность соответствующего химического пространства делает несостоятельным классический метод проб и ошибок (экспериментальный перебор) и способствует развитию методов, основанных на искусственном интеллекте.

Наиболее успешные алгоритмы для предсказания свойств, нейронные сети на кристаллическом графе [1], имеют весьма ограниченное применение в направленном дизайне из-за сложности генерации полного кристаллического графа и использования признаков, не известных априори для заданного набора структурных блоков (топология связности). Данная работа посвящено разработке нового метода представления, лишённого вышеуказанных недостатков. Нейронные сети на огрубленном кристаллическом графе, содержащем в качестве вершин естественные компоненты нанопористых материалов, демонстрируют высокую предсказательную способность и энергетическую эффективность (низкий углеродный след от обучения моделей) на фоне существующих решений, моделей на химическом составе и полном кристаллическом графе. Состоятельность предложенной архитектуры доказана посредством бенчмаркинга на обширной выборке свойств, включающей ширину запрещенной зоны, температуру термического разложения, теплоемкость и константы Генри. Более того, продемонстрирована возможность внедрения представленной архитектуры в вычислительный фреймворк, предназначенный для направленного дизайна металлоорганических каркасов с высокой адсорбционной емкостью по водороду.

Работа выполнена при финансовой поддержке Некоммерческого Фонда развития науки и образования «Интеллект».

Список литературы

[1] P. Reiser, M. Neubert, A. Eberhard, L. Torresi, C. Zhou, C. Shao, H. Metni, C. van Hoesel, H. Schopmans, T. Sommer, P. Friederich, *Communications Materials*. **2022**, 3, 93.

Разработка композитов на основе гидрида магния и наноразмерных добавок для высокоэффективного хранения водорода

В.Н. Кудияров, Е.Б. Кашкаров, Р.Р. Эльман, Н.Е. Курдюмов, А. Кенжиев

Томский политехнический университет, 634050 Томск, пр. Ленина, 30

E-mail: kudiyarov@tpu.ru

Разработка методов хранения и компримирования водорода является одним из наиболее важных направлений в области водородной энергетики. Гидриды металлов и композиты на их основе являются наиболее предпочтительными кандидатами для выполнения данной роли. Однако, к таким материалам предъявляются серьезные требования по емкости, циклической стабильности, рабочей температуре и давлению, а также скорости сорбции и десорбции водорода. В этом случае использование магния/гидрида магния оправдано, так как магний является доступным и дешевым элементом. В то же время использование чистого гидрида магния ограничено из-за высоких значений энтальпии процессов сорбции и десорбции водорода. Эффективной стратегией улучшения свойств гидридов металлов, в том числе гидрида магния, является создание на их основе композитов с наноматериалами.

Углеродные наноматериалы, в частности углеродные нанотрубки, металлоорганические каркасные структуры, наноразмерные оксиды металлов являются одними из известных и эффективных каталитических добавок. Они недороги, обладают высокой теплопроводностью и действуют как катализаторы реакции сорбции и десорбции водорода. Для выбора наиболее оптимального состава композитов могут применяться методы первопринципных расчетов, молекулярной динамики и искусственного интеллекта.

В данной работе рассмотрены композитные материалы-накопители водорода на основе гидрида магния и однослойных углеродных нанотрубок, гидрида магния и металлоорганических каркасных структур MIL-101 (Cr), гидрида магния и наноразмерных оксидов никеля, алюминия, никель-хрома. Современными методами выполнена аттестация структуры, фазового состояния, элементного состава и свойств синтезированных композитов. Поведение сорбции и десорбции водорода в композите исследовано в диапазонах температур и давлений (593–653) К и (0–3) МПа соответственно. Исследованы основные закономерности фазовых переходов в системе магний-водород для композитов при дегидрировании. На основе полученных результатов предположены механизмы сорбции и десорбции водорода композитами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания «Наука» в рамках научного проекта № FSWW-2021-0017.

Моделирование микровязкости мембраны в окружении зонда активированной кумаринами C_{525} , C_{314} хемилюминесценции под действием природного апоптогена $CytC - CL$, как гетерогенного катализатора

И.Н. Левченко^{1,3}, Г.К. Владимиров², И.В. Володяев³

¹*Российский Национальный Исследовательский Медицинский Университет
им. Н.И. Пирогова, 117997 Москва, ул. Островитянова, 1*

²*Первый МГМУ им. И.М. Сеченова, Институт регенеративной медицины, 119435 Москва,
ул. Большая Пироговская, 2с4*

³*Московский Государственный Университет, 119991 Москва, Ленинские Горы, 1*

E-mail: irnlevchenko@yandex.ru

Применение физических активаторов способствует усилению интенсивности свечения на 2–3 порядка, не влияя на химические процессы. В нашей работе проанализированы системы липопероксидазной и квазилипоксигеназной реакций. Природный инициатор апоптоза $CytC - CL$ отличается от нативного $CytC$ по следующим свойствами: Обладает флуоресценцией тирозиновых и триптофановых остатков; Теряет поглощение в полосе $Core(405 - 410 \text{ нм})$ в результате разрыва координационной связи железа гема с серой $Met80$ в $CytC$; Катализирует образование липидных радикалов в мембране в окружении флуоресцентных зондов кумаринов C_{314} , C_{525} ; Ферментативная активность зависит не только от концентрации $CytC - CL$, но и от соотношения, определяющего процент абсолютного количества денатурированной формы; Содержит микрокристаллическую структуру с межплоскостными расстояниями 8,0 и 11,1 нм; Микровязкость мембраны в окружении физических активаторов кумаринов C_{525} , C_{314} обладает разным коэффициентом поляризации; Природный краситель C_{525} «классический» физический активатор хемилюминесценции окисляется природным апоптогеном $CytC - CL$, так же как природный краситель C_{314} , при этом скорость этого окисления ограничивается лишь концентрацией самого $CytC$, который тоже разрушается в составе $CytC - CL$ под действием пероксида водорода; Моделирование кинетических кривых хемилюминесценции подтвердило, что происходит разрушение не более 48% кумарина C_{525} и 39% кумарина C_{314} .

Полученные нами результаты могут стать основой для создания лекарственных препаратов нового образца, которые, являясь элементами клетки, соответственно, влияют на раковые клетки и нечувствительны к синтетическим препаратам.

Применение машинного обучения с подкреплением к задаче оптимального управления реакцией окисления CO на Pd

М.С. Лифарь, А.А. Гуда, С. А. Гуда, А.А. Терещенко, А. В. Солдатов

Международный Исследовательский Институт Интеллектуальных Материалов,
Южный Федеральный Университет, 344090 Ростов-на-Дону ул. Сладкова, 178/24

E-mai: lifar@sfedu.ru

Выход продуктов гетерогенной реакции зависит от взаимодействия между элементарными процессами - адсорбцией, активацией, реакцией, десорбцией. В стационарных условиях активные участки поверхности могут подвергнуться отравлению побочными продуктами реакции или быть заблокированы термодинамически адсорбированными реагентами. Контролируя динамически подаваемые на вход концентрации реагентов, температуру и давление, можно учесть изменения свойств поверхности и достигнуть большей эффективности в сравнении со стационарным режимом.

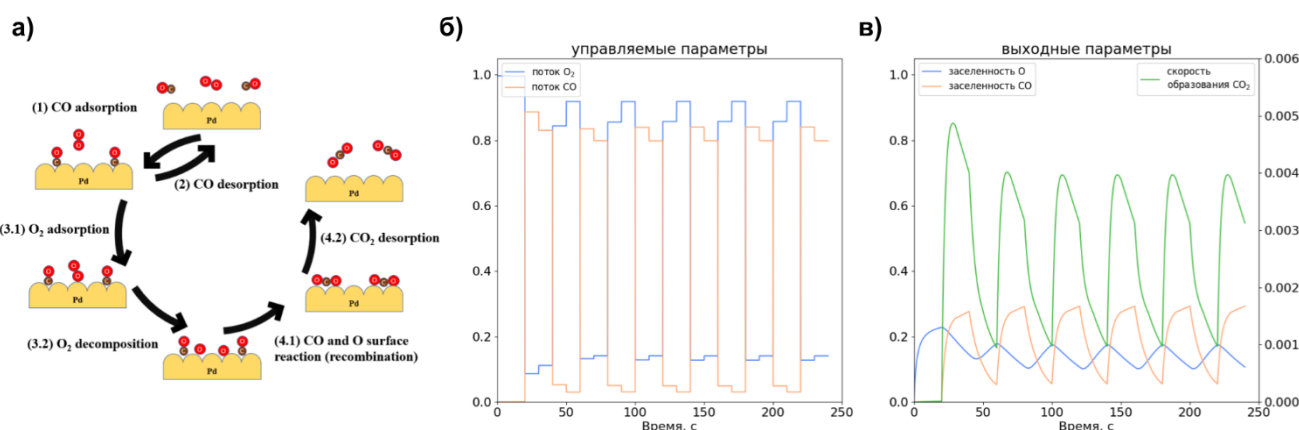


Рисунок. 1. а) Схема окисления CO и б, в) найденный агентом периодический режим.

В данной работе алгоритм Vanilla Policy Gradient (VPG) был натренирован для управления потоками CO и O₂ в модели реакции окисления CO на палладии. Алгоритм максимизировал среднюю скорость образования CO₂ на временном интервале фиксированной длины. На рисунке 1 показано нестационарное решение, которое даёт преимущество над лучшим стационарным решением. Приведенная методология открывает перспективу для оптимизации каталитических реакций в нестационарных условиях без ограничений на периодические осциллирующие режимы воздействия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания в сфере научной деятельности № FENW-2023-0019.

Автоматизация получения фрактальной размерности уровней освещенности фотоиндуцированного рассеяния света в фоторефрактивных монокристаллах ниобата лития с помощью программы в языковой среде Python для распознавания оптических свойств монокристаллов

Д.В. Мануковская¹, С.Л. Шевырев², А.О. Калашников³, Н.В. Сидоров¹, М.Н. Палатников¹

¹*Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В.Тананаева (ИХТРЕМС КНЦ РАН), 184209 Апатиты, Академгород, 26а*

²*Дальневосточный геологический институт (ДВГИ ДВО РАН), 690022 Владивосток, пр-т 100 летия Владивостока, 159*

³*Геологический институт Кольского научного центра РАН (ГИ КНЦ РАН), 184209 Апатиты, ул. Ферсмана, 14*

E-mail: d.manukovskaia@ksc.ru

Монокристалл ниобата лития (LN, LiNbO_3) – уникальный материал по перспективам применения. При легировании он способен менять свойства в очень широких пределах. Поэтому актуально разрабатывать такие методы контроля технологий, которые бы позволили наиболее полно понять связь между тонкими особенностями структуры, видами и концентрациями легирующих компонентов, технологическими особенностями выращивания кристаллов и свойствами полученного материала. Одним из свойств LN является фоторефракция – явление изменения показателя преломления под действием лазерного излучения (optical damage). Оно определяет применение LN как голографического материала, но мешает при всех остальных применениях. При освещении фоторефрактивного кристалла LN лазерным излучением видимой длины волны на выходной грани кристалла формируется динамически развивающаяся трехслойная спекл-структура фоторефрактивного рассеяния света (ФИРС). Анализ фрактальной размерности D слоев ФИРС позволяет определить перераспределение лазерно-индуцированных дефектов между слоями ФИРС в процессе освещения лазерным излучением. Однако «ручной» алгоритм получения D трудоемкий. Нами была написана программа в среде программирования Python, реализованная в среде «Ноутбук» Jupyter. Программа увеличивает эффективность обработки картины ФИРС в ≈ 20 раз. Выгрузка изображений всех секунд облучения для данного кристалла в директорию In происходит только один раз и экономится еще 5-8% времени. В перспективе это может стать основой для нового метода распознавания пригодности конкретного кристалла к тому или иному применению в различных областях электронной техники. Что касается самой программы, то в нашем случае предсказание свойств кристалла лежит скорее в области возможных будущих перспектив и на данный момент, вероятно, уместнее говорить просто о машинном обучении.

Работа выполнена по теме НИР 0186-2022-0002 (FMEZ-2022-0016).

Самоустирующиеся оптические системы на основе машинного обучения с подкреплением

**Е.И. Мареев, Н.М. Ашарчук, В.В. Ровенко, А.А. Гарматина, Т.А. Семенов,
И.Г. Дьячкова, Н.В. Минаев, В.Е. Асадчиков**

ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН, 119333, г. Москва, Ленинский проспект, 59

E-mail: mareev.evgeniy@physics.msu.ru

Прогресс в области машинного обучения предоставил возможность разработки самоустирующихся (самонастраивающихся) оптических систем, способных автономно адаптироваться к изменяющимся условиям окружающей среды. В данной работе демонстрируется концепция самоустирующихся оптических систем и представляется новый подход, основанный на использовании методов машинного обучения с подкреплением. Путем интеграции алгоритмов обучения с подкреплением в программно-аппаратный комплекс настройки завода излучения в волокно, а также в комплекс управления лазерно-плазменного источника, удалось добиться уменьшения в 2-3 раза дисперсии генерируемого рентгеновского сигнала за счет автоматической подстройки положения вращающейся медной мишени, полностью убрать линейный тренд, возникающий при абляции поверхности мишени, а также автоматизировать ввод лазерного излучения в волокно [1]. Подстройка системы, осуществляется по сигналу обратной связи, получаемого со спектрометра, а движение мишени, осуществляется с помощью управляемого нейронной сетью шагового двигателя. Разработанная методика на основе машинного обучения позволяет рассматриваемым системам оптимизировать свою производительность и адаптироваться в режиме реального времени, что приводит к повышению эффективности, точности и надежности.

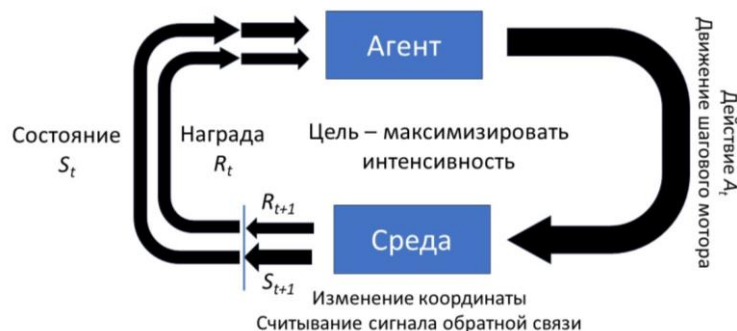


Рис. 1. Схематичное изображение принципа работы алгоритма.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН и по гранту № 075-15-2021-1362.

Список литературы

[1] Mareev, E.; Garmatina, A.; Semenov, T.; Asharchuk, N.; Rovenko, V.; Dyachkova, I. *Photonics* **2023**, *10*, 1097.

Использование языковых моделей и методов обработки данных для оптимизации научных исследований

**С.Э. Мирзаева¹, О.А. Загорулько², Р.Д. Сим², Р.Р. Хакимуллин²,
Р.С. Одобеску², Ю.С. Разливина²**

¹Московский государственный университет, 119991 Москва, Ленинские горы, 1

²Университет ИТМО, 197101 Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49

E-mail: razlivina@scamt-itmo.ru

Научные исследования играют важную роль в развитии общества и науки. Однако обработка и анализ научных статей часто представляют собой сложную задачу, требующую значительных усилий и времени. В свете этой проблемы, представляем инновационный инструмент - DiZyme Ассистент, объединяющий мощь языковых моделей и высокотехнологичные методы обработки данных для облегчения доступа к информации в научных статьях. Базовая модель построена на исследовании по предсказанию каталитических свойств нанозимов и работает с уникальной базой данных DiZyme.[1].

DiZyme Ассистент использует ChatGPT и Multilingual-E5-large для обработки запросов пользователей, принимая ссылку на статью и текстовый вопрос. Ассистент анализирует статью, создавая векторные представления частей статьи с помощью Multilingual-E5-large. Для ускорения процесса вывода, DiZyme Ассистент использует faiss index. Faiss - это библиотека для быстрого поиска векторов. С помощью этой технологии ассистент может эффективно находить релевантную информацию в статье, что является ключевой составляющей для предоставления пользователю точного и полного ответа. Однако, простое извлечение информации не всегда достаточно. ChatGPT проводит анализ семантического сходства между вектором вопроса и векторами "статья+контекст". Это позволяет выявить наиболее релевантные отрывки и создать ответ, который обобщает эти фрагменты в понятной и легко читаемой форме.

DiZyme Ассистент, объединяя в себе мощь языковых моделей и современные технологии обработки данных, играет важную роль в упрощении доступа к информации в научных статьях. Этот инструмент становится неотъемлемой частью современного исследования, ускоряя и упрощая процесс поиска и анализа данных. Таким образом, интеграция возможностей языковых моделей и методов обработки данных в DiZyme Ассистенте играет важную роль в упрощении анализа научной литературы, способствуя повышению эффективности и качества научных исследований.

Список литературы

[1] Razlivina, J., Serov, N., Shapovalova, O. & Vinogradov, V. *Small*. **2022**, 18, 2105673.

О применении метода байесовской оптимизации в химии

А.А. Митрофанов

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

E-mail: mitroffjr@gmail.com

Задача глобальной оптимизации – одна из наиболее часто встречающихся проблем во многих фундаментальных и прикладных задачах, начиная от поиска равновесной геометрии соединения до оптимизации параметров технологического процесса. Однако, решение подобной задачи в вычислительной химии зачастую сводится к ручному подбору параметров системы (по сетке или стохастически), в том числе вместе с использованием алгоритмов градиентного спуска для локальной оптимизации. Использование алгоритмов глобальной оптимизации, могло бы существенно сократить затраты времени и вычислительных ресурсов на оптимизационный процесс. При этом, теорема об отсутствии бесплатных завтраков ограничивает универсальность любого подобного алгоритма, заставляя подбирать свой подход для каждой прикладной задачи.

В докладе представлены результаты имплементации алгоритмов байесовской оптимизации с деревом Парзена для решений химических задач на нескольких уровнях организации материи. На электронном уровне описана разработка подхода к оптимизации параметров метода (функционала) теории функционала плотности. Показан пример разработки гибридного функционала, предназначенного для работы с соединениями f-элементов [1]. На атомарном уровне предложен подход к поиску равновесной геометрии малых органических молекул. Показано, что использование байесовского алгоритма способно существенно сократить время оптимизации геометрии при сохранении точности результата [2]. Наконец, продемонстрирован генеративный алгоритм, способный предлагать неорганические кристаллические соединения, обладающие заданными свойствами [3].

Список литературы

- [1] Mitrofanov, A.; Andreadi, N.; Korolev, V.; Kalmykov, S. *J. Chem. Phys.* **2021**, *155*, 161103.
- [2] Andreadi, N.; Zankov, D.; Karpov, K.; Mitrofanov, A. *J. Comput. Chem.* **2022**, *43*, 1434–1441.
- [3] Korolev, V.; Mitrofanov, A.; Eliseev, A.; Tkachenko, V. *Mater. Horizons* **2020**, *7*, 2710–2718.

Определение активации субстрата в активном центре фермента с использованием нейронной сети

Т.И. Мулашкина¹, М.А. Криницкий^{1,2,3}, М.Г. Хренова¹

¹*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3*

²*Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Институтский пер., 9*

³*Институт океанологии им. П.П. Ширшова Российской академии наук, 117997 Москва, Нахимовский пр., 36*

E-mail: mulashkinati@my.msu.ru

Для протекания химических реакций, катализируемых ферментами, необходимо, чтобы произошла активация субстрата в активном центре фермента. Её наличие можно определить по деконцентрации электронной плотности (ЭП) вблизи электрофильного атома в направлении нуклеофильной атаки. Исследуя молекулярно-динамические траектории, рассчитанные с потенциалами комбинированного метода квантовой механики / молекулярной механики (КМ/ММ МД) можно количественно оценить эффективность активации субстрата.

В данной работе мы разработали свёрточную нейронную сеть, основанную на архитектуре ResNet50, способную различать реакционноспособные и неакционноспособные фермент-субстратные комплексы. Нейронная сеть обучалась на изображениях карт лапласиана ЭП, рассчитанных для фермент-субстратных комплексов основной протеазы вируса SARS-CoV-2 с тремя различными субстратами. Во время обучения и валидации нейросети применялось искусственное дополнение данных для повышения инвариантности нейросети к поворотам и трансляциям. Для оценки работы нейросети были использованы наборы карт лапласианов ЭП, выбранных случайно из КМ/ММ МД траекторий комплекса бактериальной металло-β-лактамазы NDM-1 и антибиотика имипенема, а также комплексов капралактама и капралактона с липазой CALB. Коллекции данных на тренировочной и тестовой выборках были сбалансированы по целевому признаку - реакционному состоянию или его отсутствию. По результату обучения предложенная нейронная сеть различает реакционные и неакционные состояния во всех наборах данных с долей верных ответов, превышающей 97%; разница между тренировочной и тестовой выборками не превышает одного процентного пункта. Было также проанализировано поле внимания нейросети, которое показало, что ключевым фактором при принятии решения о реакционноспособности фермент-субстратных комплексов действительно является деконцентрация электронной плотности вблизи электрофильного атома.

Работа выполнена при финансовой поддержке Научно-образовательной школы МГУ (проект № 23-Ш03-04).

Машинное обучение в термическом анализе: Первые опыты

Н.В. Муравьев

ФИЦ ХФ РАН, 119991 Москва, ул. Косыгина, 4

E-mail: n.v.muravyev@ya.ru

Термический анализ представляет собой группу физико-химических методов, изучающих изменение свойств материала с температурой. В этой области, как и в других областях материаловедения, в последнее время появляются работы по применению методов машинного обучения (их обзор дан в [1]). Нами предложен новый подход к термокинетическому моделированию с использованием искусственных нейронных сетей [2]. Показано, что данный подход применим для одностадийных процессов, причем он в общем виде позволяет показать ряд известных из опыта фактов (необходимость более, чем трех неизотермических опытов для получения корректных кинетических параметров и др.). Однако, расширение метода для описания процессов с двумя независимыми стадиями требует больших вычислительных мощностей [3], и, по-видимому, создание общей модели для двухстадийных реакций практически невозможно. Поэтому был предложен альтернативный подход, классический для задач «структура-свойство». В этом случае ищется взаимосвязь между SMILES-структурой индивидуального соединения и характерной температурой начала термораспада из термоаналитических опытов и используются авторские экспериментальные данные по скринингу термостабильности органических соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант РНФ 19-73-20217).

Список литературы

- [1] N. V. Muravyev, G. Luciano, H. L. Ornaghi, R. Svoboda, S. Vyazovkin, *Molecules* **2021**, 26, 3727.
- [2] N. V. Muravyev, A. N. Pivkina, *Thermochimica Acta* **2016**, 637, 69–73.
- [3] K. H. Liland, R. Svoboda, G. Luciano, N. Muravyev, *Journal of Non-Crystalline Solids* **2022**, 588, 121640.

Роботизация процесса синтеза мембраны на основе оксида графена

А.А. Никитина¹, А.В. Мешков¹, Т.А. Алиев¹, В.С. Громов¹, С.Чен², К. Янг², Ч. Ванг²,
К.С. Новоселов², Д.В. Андреева², Е.В. Скорб¹

¹Университет ИТМО, 191002, Россия, Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, 9

²Institute for Functional Intelligent Materials, National University of Singapore, 117544, Singapore

E-mail: nikitina@itmo.ru

Роботизация химических процессов набирает популярность в последние десятилетия [1,2]. Использование роботов-манипуляторов стало возможным благодаря быстрому развитию коллаборативных роботов. Они не требуют внешних мер безопасности и безопасны для работы в общей среде с людьми.

В данной работе мы используем коллаборативного робота ABB YuMi для автономного непрерывного анализа и синтеза мембраны на основе оксида графена и полиэтиленimina, для унифицирования метода и раскрытия перспективы сбора больших данных. Мембраны уже продемонстрировали избирательное сродство к катионам калия, а также возможность регулировать проницаемость для других катионов благодаря изменению pH [3]. Масштабирование исследование и применение машинного обучения позволит создать матрицу параметров соответствия состава мембраны и селективной проницаемости. Для обучения робота было использовано позиционирование и система искусственного зрения. В ходе отработки технологии мы обучили робота взаимодействовать с различным лабораторным оборудованием (рис. 1), что делает предложенную технологию адаптивной для любой современной химической лаборатории.



Рис. 1. Фотография роботизированной платформы для анализа и синтеза гибридных мембран.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 21-13-00403). Авторы благодарят Приоритет 2030 за инфраструктурную поддержку.

Список литературы

- [1] Y. Jiang, H.Fakhruldeen, G.Pizzuto, L. Longley, A. He, T. Dai, R. Clowes, N. Rankin, A. Cooper, *Digit. Discov.* **2023**.
- [2] D. Caramelli, J. M. Granda, S. H. M. Mehr, D. Cambié, A. B. Henson, L. Cronin, *ACS Cent. Sci.* **2021**, 7, 1821.
- [3] D. V. Andreeva, M. Trushin, A. Nikitina, M. C. F. Costa, P. V. Cherepanov, M. Holwill, S. Chen, K. Yang, S. W. Chee, U. Mirsaidov, A. H. Castro Neto, K. S. Novoselov, *Nat. Nanotechnol.* **2021**, 16, 174.

Машинное обучение для высокопроизводительного поиска новых материалов для металл-ионных аккумуляторов

В.Т. Осипов¹, М.И. Гонгола^{2,3}, Е.А. Морхова¹, А.П. Немудрый², А.А. Кабанов^{1,2}

¹Самарский Государственный Технический Университет, 443100 Самара,
Молодогвардейская ул., 244

²Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения РАН, 630090
Новосибирск, ул. Кутателадзе, 18

³Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, 630090
Новосибирск, ул. Пирогова, 1

E-mail: vld.ospv@gmail.com

В работе были применены методы машинного обучения (МО) для прогнозирования энергии миграции рабочих ионов. Данные по более 200 каналам миграции ионов лития в 23 ионных проводниках составили обучающую выборку. Дескрипторами выступали геометрико-топологические параметры свободного пространства в кристалле, полученные методом разбиения Вороного [1]. В работе было применено два метода МО: регрессия методом опорных векторов и порядковая регрессия. Выявлено, что параметры свободного пространства коррелируют с энергией миграции, при этом лучшие результаты даёт порядковая регрессия. Разработанные МО-модели могут применяться как дополнительный фильтр в комбинированном подходе при анализе ионной проводимости в структурах [2].

Таблица 1. Значения метрик моделей. Обуч. – обучающая выборка, Тест – тестовая выборка.

Метрика	SVR		Порядковая регрессия	
	Обуч.	Тест	Обуч.	Тест
MAE	0.1421	0.1326	0.1211	0.1261
RMSE	0.1897	0.1817	0.1667	0.1728
R ²	0.7780	0.8043	0.8301	0.8231

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 19-73-10026).

Список литературы

- [1] Blatov V.A., Shevchenko A.P., Proserpio D.M. Cryst. Growth Des., **2014**, 14, 3576–3586.
[2] Kabanov A.A. et al. Comprehensive Inorganic Chemistry. **2023**, 3, 404–429.

Предсказание константы устойчивости комплексов металлов с помощью графовой нейронной сети

И.С. Пикулин, К.В. Карпов, А.А. Митрофанов

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

E-mail: ivan.pikulin@chemistry.msu.ru

Для эффективного экстракционного разделения при переработке отработавшего ядерного топлива необходимо подбирать лиганды, обеспечивающие прочное связывание с катионами металлов. Экспериментальное определение устойчивости комплексов требует значительных ресурсов, поэтому представляется актуальной задача теоретического предсказания констант устойчивости комплексов катионов с органическими лигандами.

В последние годы графовые нейронные сети с успехом применялись для решения различных химических задач [1,2]. В данной работе была исследована возможность использования подобной архитектуры для предсказания констант устойчивости комплексов металл-лиганд состава 1:1. Разработанная архитектура (рис. 1) позволяет строить прогноз на основании двумерной формулы лиганда и информации о катионе металла.

Предлагаемая модель была обучена на комплексах лантаноидов (и близких к ним по свойствам Sc и Y), а также некоторых актиноидов. Коэффициент детерминации (R^2) итоговой модели на валидационной выборке для трехвалентных катионов Am, Cm, Bk, Cf превысил 0.95.

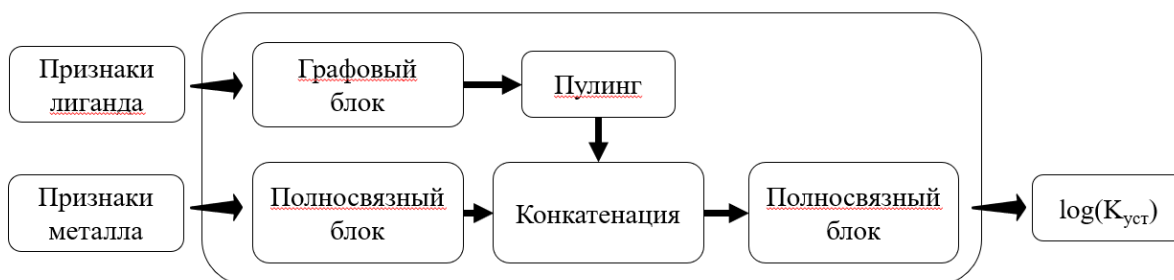


Рис. 1. Предлагаемая архитектура нейронной сети.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В.Ломоносова.

Список литературы

- [1] Chen C. et al. *Chemistry of Materials*, **2019**, 31, 9, 3564–3572.
- [2] Korolev V. et al. *J Chem Inf Model*, **2020**, 60, 1, 22–28.

Разработка машиннообучаемых потенциалов межатомного взаимодействия в системе Nb-O

И.С. Попов, А.Н. Еняшин, А.А. Валеева

ИХТТ УрО РАН, 620990 Екатеринбург, Первомайская, 91

E-mail: popov@ihim.uran.ru

Моделирование с использованием машиннообучаемых потенциалов (МП) может успешно конкурировать с квантовохимическими расчетами в описания свойств, но обладает на порядок более высокими скоростями. Чаще всего МП используются для моделирования кристаллических решёток простых или бинарных соединений, реже для расплавов или молекул. В данной работе предпринята попытка создания МП для наночастиц системы Nb-O в рамках исследования их нестехиометрии, структуры и термодинамической устойчивости.

Тренировочный и тестовый наборы включали 4044 конфигурации наночастиц Nb_nO_m ($n = 1-6$, $m = 0-6$), сгенерированных эволюционными алгоритмами USPEX [1] и молекулярной динамикой (МД), а также 620 конфигураций кристаллов Nb и NbO, полученных в ходе МД и активного обучения mlip-2 [2]. DFT расчеты межатомных взаимодействий в МД проводились с помощью VASP [3]. Результаты тестирования МП, сгенерированного в программе mlip-2, представлены на рисунке 1. Созданный МП имеет среднеквадратичную ошибку (σ) оценки полной энергии 0.08 эВ/атом и σ сил на атомах 0.6 эВ/Å. Планируются дальнейшие попытки улучшения МП на основе mlip-2, а также создание МП на основе DeepMD [4].

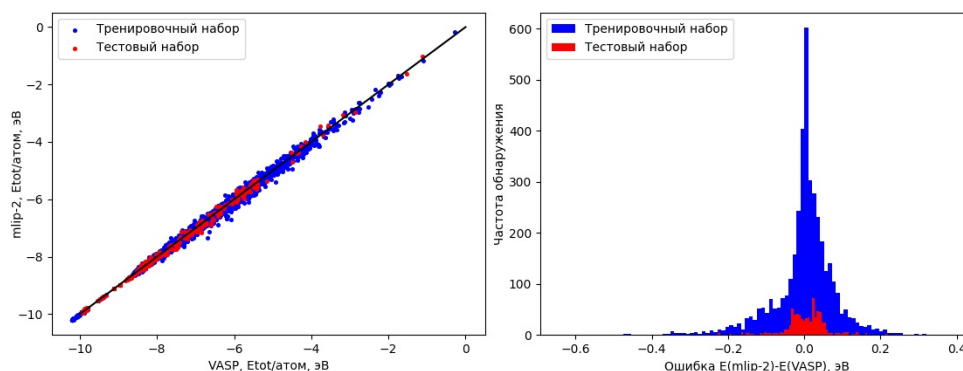


Рис. 1. Сравнение полных энергий наночастиц Nb_nO_m , полученных с использованием МП (mlip-2) и DFT (VASP).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (грант 19-73-20012-П) в Институте химии твердого тела УрО РАН.

Список литературы

- [1] A.O. Lyakhov, A.R. Oganov, H. Stokes et al, *Comp. Phys. Comm.* **2013**, 184, 1172.
- [2] I.S Novikov et al, *Mach. Learn.: Sci. Technol.* **2021**, 2, 025002.
- [3] G. Kresse, J. Furthmüller, *Phys. Rev. B.* **1996**, 54, 11169.
- [4] H. Wang, L. Zhang, J. Han, W. E, *Computer Physics Communications*, **2018**, 228, 178-184.

Досинтетическая оценка термодинамической стабильности кристаллических соединений методами машинного обучения

А.А. Поташников, А.А. Митрофанов

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

E-mail: a.a.potashnikov@gmail.com

В последние годы в материаловедении получили распространение генеративные модели, способные предсказывать структуры соединений с заданными свойствами [1]. Однако такие модели обладают существенным недостатком: среди предсказанных соединений доля реальных существующих невелика. Поэтому актуальна проблема предсказания термодинамической стабильности соединений, которые были предсказаны генеративной моделью и для которых ещё не существует никаких экспериментальных данных. Из-за большого объёма данных не представляется возможным использовать квантово-химические расчёты, но можно использовать методы машинного обучения.

Мерой термодинамической стабильности вещества является энергия над выпуклой оболочкой поверхности потенциальной энергии. Поскольку форма выпуклой оболочки зависит не только от свойств самого вещества, но и его окружения в химическом пространстве, классические методы машинного обучения дают низкую точность предсказания нахождения соединений на поверхности выпуклой оболочки [2]. В данной работе рассматривается возможность учесть локальное окружение вещества в химическом пространстве с использованием графовых нейронных сетей.

В работе было показано, что такой подход значительно увеличивает точность моделирования. При использовании различных сочетаний графовых свёрток и способов построения графа можно получить точность модели до 0.97 по взвешенной метрике F1 score на тестовом наборе. При проверке модели на стороннем наборе данных значения метрики F1 score достигают 0.95.

Однако на практике синтезируемые вещества не всегда термодинамически стабильны. Показано, что при трансферном обучении классификатора на наличии структур в экспериментальных базах данных достигается точность до 70% определения синтезируемых структур на тестовом наборе при проверке на системе PbO — ZrO₂ — NiO — MnO₂.

Список литературы

- [1] V. Korolev., A. Mitrofanov, A. Eliseev, V. Tkachenko, *Mater. Horiz.* **2020**, 7, 2710-2718
- [2] J. Riebesell et al. **2023**, *arXiv:2308.14920*
- [3] A. Bartók, R. Kondor, G. Csányi, *Physical Review B.* **2013**. V. 87 №. 18 P. 184115.

PyFitIt: интерпретируемое машинное обучение для спектроскопии на пути к простоте и удобству

**Б.О. Проценко¹, С.А. Гуда^{1,3}, Ю. Какучи², С. Шаповалова¹, А.В. Солдатов¹,
О.В. Сафонова⁴, К.К Коперет², А.А. Гуда¹**

¹Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов Южного федерального университета, 344090 Ростов-на-Дону, Сладкова, 178/24

²Институт математики, механики и компьютерных наук им. И.И. Воровича Южного федерального университета, 344090 Ростов-на-Дону, Мильчакова, 8-А

³Химический факультет ETH Zürich, Цюрих, CH-8093 Швейцария

⁴Институт Поля Шеррера, 5232 Филлиген, Швейцария

E-mail: laosian@mail.ru, bprocenko@sfedu.ru

Быстро развивающаяся спектроскопия рентгеновского поглощения (XAS) представляет мощный метод характеристики в современной физической химии, физики конденсированного состояния и многих других областях. Её уникальные возможности для исследования локальной атомной и электронной структур вещества не имеют ограничений на атомные конфигурации и могут быть с лёгкостью применены для исследования катализаторов прямо в ходе реакции, в том числе в режиме *operando*, и могут быть расширены благодаря применению искусственного интеллекта (ИИ) и больших данных [1]. Тем не менее, три главных препятствия стоят на пути приложения ИИ к XAS (и не только): (i) в сообществе XAS нет стандартизованных баз данных с широким спектром экспериментальных образцов; (ii) не отработана процедура надёжной предобработки и интерпретируемого анализа спектральных данных посредством алгоритмов машинного обучения (ML); (iii) отсутствуют удобные инструменты для ML-анализа спектроскопических данных, доступные широкому кругу физиков и химиков, не владеющих программированием. В данной работе авторами предприняты первые шаги по решению этих проблем в форме (i) унифицированной библиотеки экспериментальных спектров К-краёв Cr и V, (ii) устойчивой схемы предобработки и выравнивания спектров, выделения и оценки признаков для интерпретируемого ML, (iii) реализованной в наглядной форме Jupyter Notebook с графическим интерфейсом и пояснениями. Применение разработанного функционала иллюстрируется на примере обработки спектров Cr катализатора Филлипса, катализаторе восстановления альдегидов с V, и наконец, на теоретической выборке инфракрасных спектров цеолитов различных топологий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 22-23-01007).

Список литературы

[1] Martini, A. *et al. Computer Physics Communications*, **2020**, 250, 107064.

Применение вычислительного интеллекта и теории эффективной среды для моделирования структуры нанокomпозиционного материала

С.П. Романчук, Д.В. Терин

СГТУ им. Гагарина Ю.А., 410054 Саратов, ул. Политехническая, 77

E-mail: romanчук_sergey@mail.ru

В настоящее время интерес представляют разработки методик, алгоритмов и программного обеспечения проектирования и исследования новых материалов. На ряду с технологиями искусственного интеллекта особое место занимают методы вычислительного интеллекта, в частности, применение генетического алгоритма показывает свою прикладную эффективность в области предсказания кристаллических структур [1].

Задачи эксперсс-анализа и прогнозирования свойств нанокomпозиционных материалов достаточно хорошо решает подход теории эффективной среды. На основе моделей Максвелла-Гарнетта и Бруггемана разработана математическая модель взаимодействия электромагнитного излучения с нанокomпозиционным материалом с различными типами включений [2].

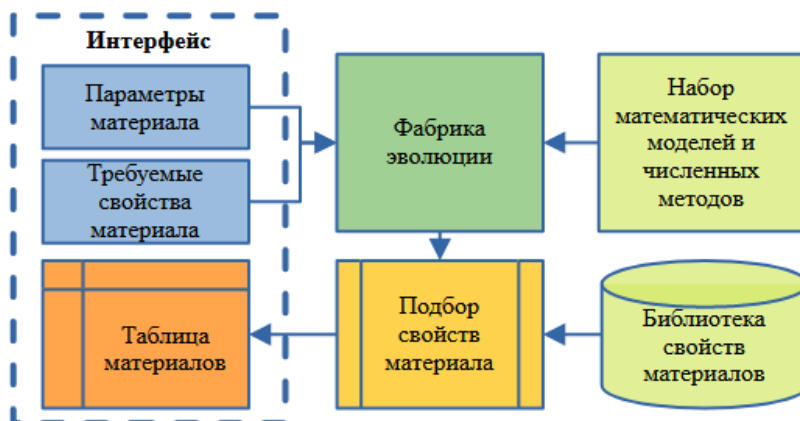


Рис. 1. Структурная схема программного комплекса

Для проведения численного эксперимента поиска состава нанокomпозиционного материала с требуемыми свойствами разработан программный комплекс (рис. 1).

Список литературы

[1] N. Rybin et al. *The Journal of Physical Chemistry*, **2022**, 126, 35, 15057-15063.

[2] С. П. Романчук, С. А. Корчагин, Д. В. Терин, *Математическое моделирование и численные методы*, 2018, 2, 18, 20-31.

Применение методов машинного обучения при поиске перспективных матриц для иммобилизации циркония

И.Д. Рубцов, В.В. Королев, А.А. Митрофанов

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

E-mail: Rubtsov.ivan3791@gmail.com

Оксидные керамические матрицы представляют собой перспективные материалы для иммобилизации циркония из радиоактивных отходов, и их основными характеристиками (согласно нормативам) являются механическая прочность, устойчивость к воздействию воды, радиационная и термическая стойкость. Методы машинного обучения могут значительно упростить поиск подходящих материалов для использования в качестве матриц для иммобилизации радиоактивного циркония. Таким образом, цель данной исследовательской работы заключается в поиске перспективных оксидных матриц для иммобилизации циркония с применением методов машинного обучения.

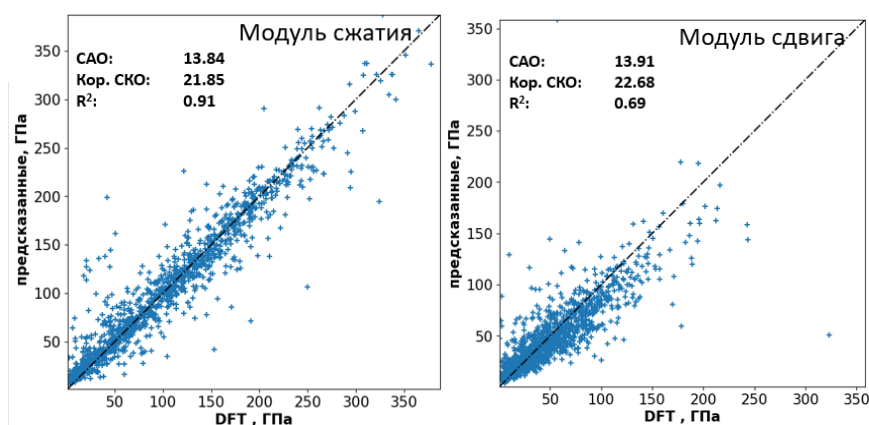


Рис. 1. Зависимость предсказаний моделей от DFT-расчетных значений для механических свойств соединений (CAO- средняя абсолютная ошибка, СКО – средняя квадратичная ошибка).

Для достижения заданной цели были обучены модели, основанные на архитектуре CrabNet[1], предназначенные для прогнозирования энергии образования, температуры плавления, модуля сжатия и модуля сдвига. Эти модели успешно предсказывают механические свойства (см. рисунок 1), энергию образования ($R^2=0.93$) и температуру плавления ($R^2=0.91$). С их помощью был проведен скрининг химического пространства стехиометрических оксидов, содержащих цирконий и два других металла. Дальнейшая работа предполагает синтез и исследование перспективных составов, предложенных в ходе моделирования.

Список литературы

[1] A. Y.-T. Wang et al. *npj Comput. Mater.*, **2021**, 7, 77.

Тренировка потенциала ReaxFF для AuPd

Ю.В. Русалев¹, Н.В. Тер-Оганесян², А.А. Гуда¹

¹ММИ ИМ ЮФУ, 344090 Ростов-на-Дону, ул. Сладкова, 178/24

²НИИ Физики ЮФУ, 344090 Ростов-на-Дону, просп. Стачки, 194

E-mail: yuri.rusalev@gmail.com

Коллоидный раствор наночастиц AuPd является перспективным катализатором конверсии метана в метанол при умеренных температурах [1]. Имея в виду важность сплава для каталитических применений, мы разработали потенциал ReaxFF для систем AuPd, предсказывающий энергии сплава и наночастиц с ошибкой менее 0.004 эВ на атом. Подбор параметров потенциала был произведён на основе выборки, состоящей из 1014 расчетов энергии различных структур с помощью DFT. Тренировка потенциала были произведена с помощью алгоритма СМА-ES. Поскольку потенциалы ReaxFF имеют большое количество параметров, можно получить неединственное решение. С помощью валидации на DFT расчётах, не включенных в обучающую выборку, и молекулярной динамики (МД), мы выделили 4 разных набора параметров, одинаково хорошо описывающих систему AuPd. Полученные потенциалы были использованы для изучения упорядочения с помощью гибридного подхода МД+Монте-Карло в сплавах и наночастицах Au-Pd. Ведётся расширение этого потенциала для взаимодействия с органическими молекулами для моделирования задач гетерогенного катализа.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки России (Соглашение 075-15-2021-1363).

Список литературы

[1] N. Agarwal, S. Freakley, *Science*, **2017**, 358, 223.

Предсказание параметров межзвёздной пыли по данным ИК-фотометрии с помощью нейросетей

А.В. Рылов¹, М.С. Мурга², Т.А. Лабутин¹

¹МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1с3

²ИНАСАН, 119017, Москва, ул. Пятницкая, д. 48

E-mail: arylov@laser.chem.msu.ru

Наблюдаемые ИК-спектры межзвёздной среды формируются излучением звёзд, макрочастиц пыли, состоящих преимущественно из кремния и углерода, атомными и ионными линиями разных элементов, а также молекулярными полосами, прежде всего полициклических ароматических углеводородов (ПАУ). Для определения состава межзвёздной пыли используется анализ ИК-спектров с помощью многопараметрических моделей. Расчет этих моделей требует исключительно больших вычислительных затрат.

Соответственно, в данной работе была поставлена задача оценить возможность предсказания параметров пыли с использованием нейросетей, где в качестве обучающего набора выступают данные моделирования. Мы использовали данные [1], рассчитанные на основе гиперспектральных изображений 61 галактики. В каждом пикселе представлена интенсивность излучения на 9 длинах волн, на основании которых рассчитываются оптимальные параметры модели: масса пыли, доля ПАУ, интенсивность межзвёздного излучения, доля частиц, облучаемых минимальной интенсивностью, распределение излучения. Нами были апробированы несколько алгоритмов классического машинного обучения и нейронные сети различной архитектуры. Показано, что наилучшая корреляция с расчетными данными достигается при использовании модели из 4 полносвязных слоёв для массы пыли и доли ПАУ. Несмотря на то, что точность результатов невысока, на большой выборке полученные значения можно использовать для сопоставления с параметрами галактик, измеренными по другим данным. В частности, планируется сопоставление доли ПАУ с кинематическими параметрами (скоростью и дисперсией скорости газа в них) для выявления взаимосвязи между содержанием ПАУ и турбулентностью среды, которая должна приводить к их разрушению.

Список литературы:

[1] Aniano, G. et al. *The Astrophysical Journal*, **2020**, 889, 2, 150

Межатомные потенциалы на основе нейронных сетей для атомистического моделирования металлургических расплавов

Р.Е. Рыльцев¹, Н.М. Щелкачев^{2,1}, И.А. Балякин¹, А.О. Типеев¹, Е.О. Хазиева¹,
А.А. Ремпель¹

¹Институт металлургии УрО РАН, 620016 Екатеринбург, ул. Амундсена, 101

²Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина, 142190 Москва, Калужское ш., 14

E-mail: rrylcev@mail.ru

В последние годы в вычислительном материаловедении наблюдается революционный прогресс, связанный с использованием методов машинного обучения для создания потенциалов межатомного взаимодействия (MLIP – Machine Learning Interatomic Potentials). Основная идея такого подхода – аппроксимировать поверхность потенциальной энергии системы с помощью многочастичных функций общего вида (например, нейронных сетей) используя эталонные значения энергий и сил, полученные в *ab initio* расчетах. Атомистическое моделирование с MLIP позволяет достигнуть *ab initio* точности при на порядки меньших вычислительных затратах [1].

Актуальным приложением MLIP является моделирование металлургических расплавов, поскольку экспериментальное изучение их свойств часто затруднительно. В цикле недавних работ показано, что MLIP на основе нейронных сетей обеспечивают достаточную точность и вычислительную эффективность для расчета широкого спектра наблюдаемых свойств расплавов, таких как структурные характеристики, плотность, энтальпии смешения, температуры фазовых превращения, вязкость и коэффициенты диффузии [2-8].

Вместе с тем, были выявлены проблемы, решение которых является вызовом для вычислительного материаловедения. Одной из них является недостаточная точность стандартных *ab initio* методов, основанных на теории функционала плотности, для описания некоторых систем. Другой проблемой является большие времена релаксации для некоторых (например, оксидных) расплавов, которые делают расчеты с помощью MLIP трудоемкими.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 22-22-00506).

Список литературы

- [1] Y. Mishin, *Acta Mater.* **2021**, 214, 116980.
- [2] R.E. Ryltsev, N.M. Chchelkatchev, *J. Mol. Liq.* **2022**, 349, 118181.
- [3] N. Kondratyuk et al. *J. Mol. Liq.* **2023**, 380, 121751.
- [4] A.O. Tipeev et al., *J. Mol. Liq.* **2023**, 387, 122606.
- [5] И. А. Балякин, Р.Е. Рыльцев, Н.М. Щелкачев. *Письма в ЖЭТФ.* **2023**, 117, 377-384.
- [6] N.M. Chchelkatchev et al. *J. Chem. Phys.* **2023**, 159, 064507.
- [7] I.A. Balyakin et al. *Phys. Rev. E.* **2020**, 102, 052125.
- [8] Е.О. Хазиева и др. *ЖЭТФ*, **2023**, 164, 1.

Дизайн бионаноматериалов с заданными свойствами и активностями методами искусственного интеллекта

**Н.С. Серов^{1,2}, Ю.С. Разливина^{1,2}, Н.И. Широкий¹, Е. Дин¹, С. Джьякхво¹,
А.В. Дмитренко¹, В.В. Виноградов¹**

¹Центр Химии и Искусственного Интеллекта, Университет ИТМО, 191002
Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, 9

²Передовая Инженерная Школа, АГНИ, 423462 Альметьевск, ул. Советская, 216

E-mail: serov@scamt-itmo.ru

Создание наноматериалов для биомедицины с заданными свойствами с использованием искусственного интеллекта – зарождающаяся область, насчитывающая не более 100 публикаций по всему миру, где не более 10 опубликованы в высокоимпактных журналах [1].

Поскольку поведение бионаноматериалов существенно зависит от морфологии, актуальная задача – создание методов ее количественного описания. Нами был предложен transfer learning подход для формирования сжатых представлений морфологии из изображений электронного микроскопа [2]. Полученные представления позволяют различать наноматериалы разных форм, размеров и микроструктуры поверхности и могут быть использованы в качестве предикторов, отражающих комплексность морфологий наноматериалов в количественной манере.

Другая проблема – отсутствие баз данных свойств бионаноматериалов и соответствующих предсказательных моделей. Нами впервые были собраны базы данных и построены высокоточные (результаты кросс-валидации Q^2 от 0.6 до 0.8) алгоритмы по предсказанию клеточной токсичности [3], каталитической активности [4] ([DiZyme](#)), а также контрастирующему и гипертермическому потенциалу наночастиц [5] ([DiMag](#)).

Помимо прямых предсказательных моделей, нами был разработан подход к генеративному дизайну бионаноматериалов с заранее заданными свойствами на примере дизайна избирательно токсичных по отношению к раковым клеточным линиям бионаноматериалов, прошедший валидацию как на литературных данных, так и в лабораторных условиях [6].

Работа выполнена при финансовой поддержке программы «Приоритет 2030».

Список литературы

- [1] [N. Serov](#), V. Vinogradov, *Advanced Drug Delivery Reviews*. **2022**, 184, 114194.
- [2] [N. Serov](#), V. Vinogradov, *Small Methods*. **2022**, 6(5), 2101619.
- [3] N. Shirokii et al. *Small*. **2023**, 2207106.
- [4] J. Razlivina et al. *Small*. **2022**, 8(12), 2105673.
- [5] P. Kim et al. *Small*, **2023**, 2303522.
- [6] S. Jyakhwo et al, *Small*, **2023**, 2305375.

Сенсоры «электронный язык» для анализа биологических смесей методами машинного обучения

А.Н. Синельников¹, И.С. Злобин^{1,2}, К.О. Титов¹, Н.С. Торопцев,¹ Ю.В. Нелюбина¹

¹Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук, 119334, Москва, ул. Вавилова, 28с1

²Московский Государственный Технический Университет им. Н.Э.Баумана, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., 5/1

E-mail: artem2001sn@gmail.com

Широкое внедрение машинного обучения привело к появлению новых подходов к анализу сложных биологических и иных многокомпонентных смесей, которые по своей доступности, простоте и скорости превосходят традиционные методы, такие как масс-спектрометрия. Один из таких подходов основан на использовании электрохимических многоэлектродных сенсоров «электронный язык» (*e-tongue*) с последующей классификацией образцов или определением концентрации компонентов сложной смеси при помощи искусственного интеллекта [1].

Нами предложена новая архитектура коммерчески доступных сенсоров «электронный язык» на основе металлоорганических координационных полимеров. Они успешно протестированы в задаче классификации различных образцов чая по сортам при помощи построенной сверточной нейронной сети (рис. 1).

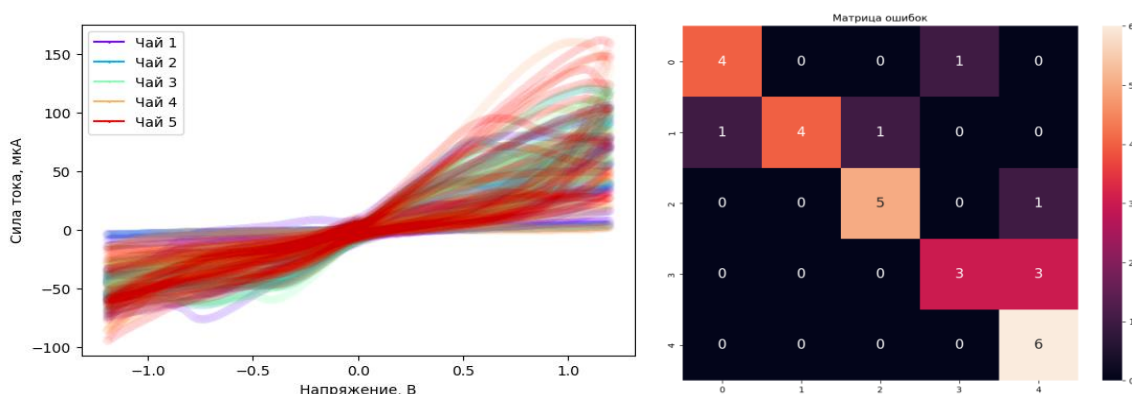


Рис. 1. Вольтамперограммы исследуемых образцов чая (слева) и матрица ошибок, полученная в результате работы построенной классифицирующей модели (справа).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №19-29-08032).

Список литературы

[1] С. Pérez-Ràfols et al., *Sensors*, **2019**, *19*, 4261.

Использование сверточных нейронных сетей и трансферного глубокого обучения для обработки XAS-спектров

А.А. Смирнова, А.А. Митрофанов, В.В. Королев

МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, г. Москва, Ленинские горы 1с10

E-mail: smirnova.anastasia2304@gmail.com

Одним из современных методов исследования структуры вещества является спектроскопия рентгеновского поглощения. Анализ протяжённой тонкой структуры (EXAFS - extended X-ray absorption fine structure) позволяет определять геометрию системы, область рентгеновского поглощения ближней тонкой структуры (XANES - X-ray Absorption Near Edge Structure) содержит информацию об электронной структуре. Кроме того, данные методы позволяют определять степени окисления элементов, окружение атома-абсорбера, перенос заряда; анализировать электрон-электронные взаимодействия.

Однако вышеописанную информацию о системе можно получить только через многоступенчатую и сложную обработку спектральных данных. Широко используемые сегодня подходы по обработке XAS-спектров являются ресурсоемкими и не всегда имеют однозначную интерпретацию из-за сложной тонкой структуры спектров и индивидуального подхода к обработке каждого отдельного специалиста.

Использование методов машинного обучения позволяет анализировать спектры различной сложности и избежать ошибок, связанных с человеческим фактором. Мы использовали сверточные нейронные сети для создания моделей на основе теоретически рассчитанных XAS-спектров для железосодержащих структур. Сначала мы смоделировали спектры XANES на K и L3-краях атомов железа с помощью FDMNES-кода, оригинальные структуры были взяты из базы данных The Materials Project. Полученные данные использовали для построения модели, которая позволяет определять химическое окружение атома (в частности, координационное число, расстояния между соседними атомами и т.д.), при этом показано увеличение точности при использовании данных для нескольких краев поглощения. Также уран содержащих соединений мы продемонстрировали, что с помощью трансферного обучения можно построить модель, которая способна работать со спектрами других элементов, данных для которых не хватает для построения классической модели.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта: «Развитие синхротронных и нейтронных исследований и инфраструктуры для материалов энергетики нового поколения и безопасного захоронения радиоактивных отходов» - проект 075-15-2021-1353.

Применение методов машинного обучения для предсказания значений изменения дипольного момента при электронном возбуждении в флуоресцентных белках на основе данных из молекулярно-динамических расчетов

Р.А. Степанюк¹, А.М. Кулакова¹, М.А. Криницкий², М.И. Варенцов², М.Г. Хренова¹

¹*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3*

²*Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с4*

E-mail: romanstepanyuk@outlook.com

Важной практической задачей в области рациональной разработки флуоресцентных белков является быстрая и точная оценка энергий электронных переходов. Используемые методы квантовой химии позволяют определять энергии возбуждения с точностью до 0.1 эВ, что может приводить к невозможности дифференциации флуоресцентных систем при их тонком дизайне, особенно, в длинноволновой области спектра. Изменение дипольного момента при возбуждении (dipole moment variation, DMV) – квантовохимический дескриптор, определяющий энергию вертикального электронного перехода по закону Штарка. Он может быть рассчитан с большей точностью и меньшими вычислительными затратами. В рамках данного исследования применяются методы машинного обучения для предсказания значений DMV в рамках решения задачи многомерной регрессии на основании геометрических параметров хромофора.

Расчёты молекулярно-динамических траекторий проведены для 12 модельных флуоресцентных белков с хромофором зеленого флуоресцентного белка комбинированным методом квантовой механики / молекулярной механики в варианте КМ(РВЕ0-D3/сс-pvdz)/ММ(CHARMM). Расчет значений DMV проводился для 400 точек каждой КМ/ММ МД траектории методом нестационарной теории функционала электронной плотности с функционалом ω B97X-D3. Получено несколько моделей машинного обучения, в том числе модели на основе деревьев решений (RF) и метода опорных векторов (SVM), со значениями коэффициента детерминации на внешней тестовой выборке (Q^2) в диапазоне от 0,78 до 0,90. Рассмотрены проблемы уменьшения ошибки предсказания и улучшения качества моделей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Научно-образовательной школы МГУ (проект № 23-Ш03-04).

Новый способ прогнозирования эффективности оптических лимитеров без проведения эксперимента

А.Ю. Толбин

ФИЦ ПХФ и МХ РАН, 142432 Черноголовка, Северный пр-д, 1, ИФВ РАН

E-mail: tolbin@ipac.ac.ru

Устройства ограничения мощности лазерного излучения (оптические лимитеры) играют важную роль в фотонике для защиты органов зрения и оптических устройств. В настоящем докладе будет представлена принципиально новая методология прогнозирования эффективности оптического ограничения [1] на основе индуцированных электрическим полем изменений в спектрах поглощения, рассчитанных с помощью квантово-химического метода LR-TDDFT на примере серии стабильных фталоцианиновых J-димеров **1a-f** (рис. 1).

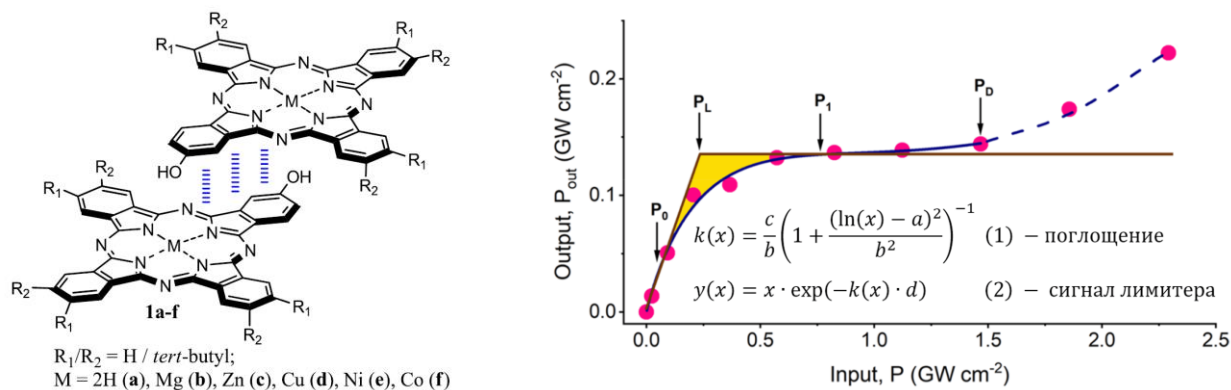


Рис. 1. Структуры красителей и сигнал модельного лимитера, полученный для **1c** методом TDDFT в присутствии внешних электрических полей. P_i – характеристические пороги для оценки эффективности лимитирования; x – шкала мощности электрического поля, d – толщина оптического слоя, {a,b,c} – коэффициенты функции (1).

Внешние электрические поля представлены как добавка к гамильтониану системы при решении уравнений самосогласованного поля и расчета энергий и сил осцилляции электронных переходов для возбужденных состояний. Анализ теоретических спектров поглощения, зависящих от напряженности полей, проводился на длине волны 532 нм, как в реальном эксперименте с источником Nd:YAG. Для аппроксимации абсорбционного отклика использовалась нелинейная функция (1), на основе которой были рассчитаны параметры эффективности оптического лимитирования и построены корреляции с реальным экспериментом с применением новейшего алгоритма *CORRELATO* [2,3].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 21-73-20016).

Список литературы

- [1] A.Yu. Tolbin, *et. al.*, *ACS Omega*. **2022**, 7, 28658.
- [2] A.Yu. Tolbin, *Mendeleev Commun.* **2023**, 33, 419.
- [3] А.Ю. Толбин, Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2022613888.

Применение автоматизированного алгоритма *de novo* идентификации продуктов химического синтеза методом жидкостной хромато-масс-спектрометрии высокого разрешения

М.Н. Усачёв, Е.С. Нерябова, Н.В. Суворов, П.В. Островерхов, Ю.А. Ефимова, М.А. Грин

Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, 119571, Российская Федерация, Москва, Проспект Вернадского, 86

E-mail: usachyov@mirea.ru

De novo идентификация продуктов химического синтеза с использованием метода высокоэффективной жидкостной хромато-масс-спектрометрии высокого разрешения (ВЭЖХ-МС ВР) является комплексной задачей, являющаяся актуальной при получении новых перспективных соединений. На кафедре ХТБАСМиОХ им. Н.А. Преображенского предложен автоматизированный алгоритм (рис. 1) идентификации впервые синтезированных соединений – потенциальных терапевтических средств различного применения. Предложенный алгоритм за счёт комбинированного использования комплекса программных продуктов и адаптивной ВЭЖХ-МС ВР системы позволяет проводить *in silico* прогноз спектральных характеристик продуктов реакции; автоматический выбор протокола выполнения измерений; регистрацию хромато-масс-спектров по выбранному протоколу анализа; идентификацию соединений по спрогнозированным характеристикам; внесение верифицированных спектральных характеристик в пользовательскую базу данных для последующего использования в работе.



Рис. 1. Схема автоматизированного алгоритма идентификации продуктов синтеза *de novo*.

Работа выполнена при реализации в РТУ МИРЭА программы стратегического академического лидерства «Программы Приоритет 2030» - «Радиофармпрепараты 2023» и при финансовой поддержке гранта РНФ (грант 21-13-00078).

Глубокое машинное обучение, структурная наследственность и дизайн функциональных материалов на основе металлических сплавов

Н.М. Щелкачев¹, Н.Д. Кондратюк², Р.Е. Рыльцев³, В.Е. Анкудинов¹

¹Институт Физики Высоких Давлений РАН, 108840, г. Москва

²Высшая школа экономики, 109028, г. Москва

³Институт металлургии Уро РАН, 620016 г. Екатеринбург

E-mail: chtchelkatchev@hppi.troitsk.ru

Расчет вязкости в многокомпонентных металлических расплавах представляет собой сложную задачу как для классических, так и для методов *ab initio* молекулярно-динамического моделирования. Первый подход может не обеспечить достаточную точность, а второй требует слишком много ресурсов. Потенциалы машинного обучения обеспечивают оптимальный баланс между точностью и эффективностью вычислений и поэтому кажутся очень многообещающим методом для решения этой проблемы. Мы провели моделирование кинематической вязкости в тройных расплавах Al-Cu-Ni с использованием потенциалов глубоких нейронных сетей, реализованных в пакете DeePMD. Рассчитаны как концентрационная, так и температурная зависимости кинематической вязкости в Al-Cu-Ni и сделан вывод, что разработанный потенциал позволяет моделировать вязкость с высокой точностью; отклонение от экспериментальных данных не превышает 12 % и близко к интервалу неопределенности экспериментальных данных, см. рис. 1. Что еще более важно, наше моделирование воспроизводит минимальную концентрационную зависимость вязкости эвтектического состава. Таким образом, мы приходим к выводу, что МД-моделирование на основе потенциалов машинного обучения является весьма перспективным способом расчета вязкости в многокомпонентных металлических расплавах.

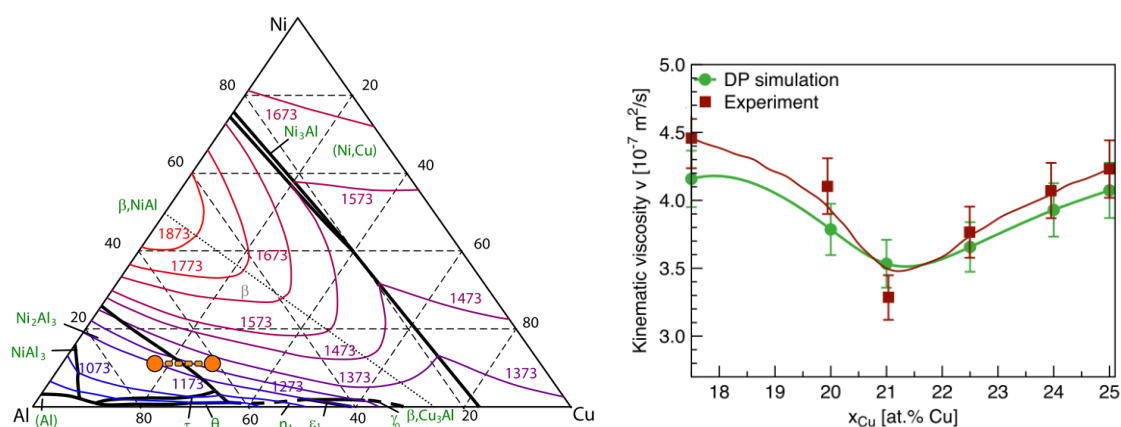


Рис. 1. Фазовая диаграмма Al-Cu-Ni и кинематическая вязкость.

Список литературы

[1] N. Kondratyuk, R. Ryltsev, V. Ankudinov, N. Chtchelkatchev, *Journal of Molecular Liquids*. **2023**, 380, 121751.

Автоматизация расчетов метадинамики при изучении ацилирования энантиомеров 2-метилпиперидина

М.А. Щетинкина, О.С. Бородина, Е.В. Барташевич

Южно-Уральский государственный университет (НИУ), 454000 Челябинск, пр. Ленина, 76

E-mail: sarey223@mail.ru

При изучении стерических особенностей реакции ацилирования R,S-форм 2-метилпиперидина (2,5-диоксопирролидин-1-ил)2-феноксипропаноатом [1] предложена методология, оценивающая сближение реагентов разных конфигураций в ходе метадинамического моделирования. Данные метадинамики анализировались с помощью количественного критерия, характеризующего симметричность энергетических карт (рис. 1а). Поскольку значения критерия варьируются в ходе метадинамики (рис. 1б), расчеты проводились до выхода на плато.

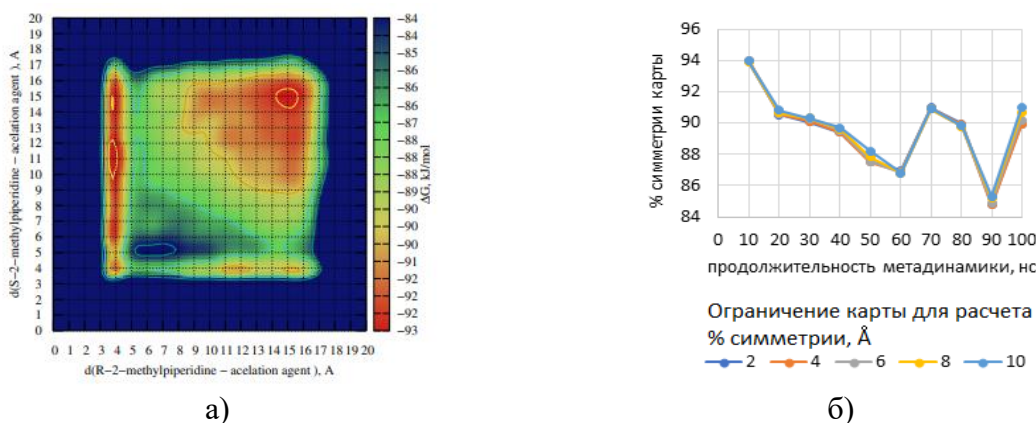


Рис. 1. а) Энергетическая карта метадинамики сближения S- и R-2-метилпиперидина с (2,5-диоксопирролидин-1-ил)2-феноксипропаноатом; б) изменение критерия симметричности энергетической карты с течением метадинамики

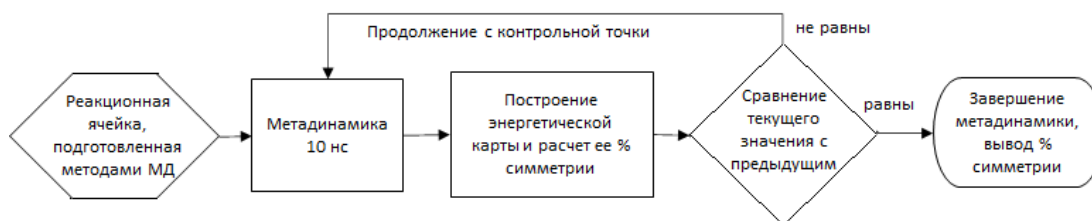


Рис. 2. Алгоритм расчетов с построением и анализом энергетических карт

Для автоматизации сбора данных в скрипт, реализующий алгоритм (рис. 2) был добавлен цикл, который после каждого этапа метадинамики выполняет построение энергетической карты, вычисляет процент ее симметричности и сравнивает его с предыдущим.

Список литературы

[1] Gruzdev D. et al. Org. Biomol. Chem. 2022 20, 862-869.

Конформационный поиск для малых органических молекул в газовой и твердой фазе с помощью алгоритма пчелиной колонии

М.Д. Яблонский¹, А.А. Смирнова¹, В.В. Королев¹, Е.И. Марченко^{2,3}, А.А. Митрофанов¹

¹*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3*

²*Факультет наук о материалах МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с73*

³*Геологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1*

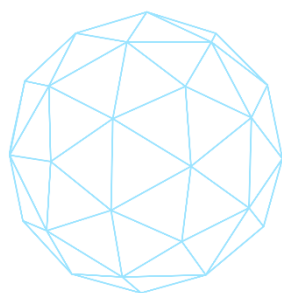
E-mail: maks618@mail.ru

Для того, чтобы описывать реальное поведение малых органических молекул в различных средах и условиях, зачастую необходимо знать набор присутствующих при этих условиях конформаций. В термодинамически равновесной системе молекулы располагаются в некотором наборе конформаций, соответствующих глобальному и локальным энергетическим минимумам. Поиск конформаций квантовохимическими методами вызывает значительные временные затраты. Перспективным является применение различных метаэвристических подходов – подходов, не имеющих строгого обоснования, но для поставленной задачи достигающих приемлемых результатов.

Широким классом метаэвристических подходов являются алгоритмы, вдохновленные реально происходящими в природе процессами, из которых можно выделить подкласс, имитирующий поведение различных животных сообществ. Данные алгоритмы получили широкое распространение для задач оптимизации. Одним из популярных эволюционных подходов является алгоритм пчелиной колонии – алгоритм, имитирующий поведение семьи медоносных пчел при поиске нектара, в котором положения с большим количеством нектара ассоциируется с меньшим значением оптимизируемой функции.

На основе алгоритма пчелиной колонии нами был разработан программный код, решающий задачу нахождения глобального и низколежащих локальных минимумов малых органических молекул. Принцип работы алгоритма заключается в представлении энергии конформации молекулы как функции от величины двугранных углов, входящих в молекулу. Проверка результирующего подхода на экспериментальных данных о глобальном и локальных минимумах малых органических молекул показала большое сходство между рассчитанными и литературными конформациями как для молекул в газовой фазе, так и для конформаций в кристаллических структурах.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ



Характеристики полиэдров Вороного-Дирихле как дескрипторы для прогнозирования поляризуемости молекул

А.Р. Абдульмянов

Самарский университет, 443086 Самара, Московское шоссе, 34

E-mail: abdulmyanov.ar@ssau.ru

Стереоатомная модель в последние десятилетия находит всё более широкое применение для описания строения кристаллов. Характеристики атомных и молекулярных полиэдров Вороного-Дирихле (ПВД) используются в качестве дескрипторов для поиска и установления взаимосвязей между структурой и свойствами кристаллических веществ. В данной работе с применением методов машинного обучения была установлена возможность прогнозирования величины поляризуемости металлорганических молекул на основании площадей граней межмолекулярных контактов (*H/C*, *H/H*, *H/Me*), суммарной площади граней молекулярного ПВД и степени сферичности ПВД центрального атома.

В ходе исследования была решена задача автоматизации сбора данных. Для этого на языке Python были написаны две программы для парсинга выходных файлов программ **Intermol** и **Dirichlet**, входящих в комплекс структурно-топологических программ **TOPOS** [1]. Исходные коды доступны по ссылкам: <https://colab.research.google.com/drive/1U3TG5ezDRLsEMEdPieloDyaVSTijlvKK> и <https://colab.research.google.com/drive/1OD6zW7N1IC7plwekIZ1B1Q6TaATOim6X>.

В качестве объектов для исследования были взяты комплексы меди с органическими лигандами, данные о структуре которых были отобраны из Кембриджского банка структурных данных. Характеристики ПВД были рассчитаны с помощью комплекса программ **TOPOS**. Значения поляризуемостей, рассчитанных методом DFT, брали из базы “The tmQM Dataset” [2]. QSPR-модель построили методом случайного леса. Коэффициент детерминации был получен кросс-валидацией и составил 0.96; средняя абсолютная ошибка 34,28 (25,78%). Полученный результат позволяет говорить о высокой степени корреляции набора предложенных дескрипторов с величиной поляризуемости. Уменьшение степени сферичности ПВД атома Cu, увеличение объема молекулы и площадей граней *H/C*, *H/H* дают положительный вклад в величину поляризуемости, в то время как увеличение доли контактов *H/Cu* способствует её уменьшению.

Список литературы

- [1] Serezhkin V.N., Serezhkina L.B., Shevchenko A.P., Pushkin D.V. *Russ. J. Phys. Chem.* **2005**, *6*, 918–928.
- [2] D. Balcells, B. B. Skjelstad. *J. Chem. Inf. Model.* **2020**, *60*, 6135–6146.

Перспективы применения биогибридных катализаторов на основе наночастиц меди и никеля в органическом синтезе

М.А. Абрамкина¹, В.В. Джумаев¹, Д.А. Богачихин¹, В.А. Арляпов¹, Б.Я. Карлинский^{1,2}, В.П. Анаников²

¹БиоХимТехЦентр ТулГУ, 300012 Тула, ул. Фридриха Энгельса, 157

²Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: abramkinamarina2@gmail.com

В настоящее время синтезу наночастиц металлов уделяется большое внимание в связи с широким спектром их применения в различных областях, таких как катализ, производство электроники, восстановление состояния окружающей среды и многих других. Это возможно благодаря размерам наночастиц (1-100 нм), большой площади поверхности и реакционной способности, кроме того, последней можно управлять, изменяя форму, размер и дисперсию наночастиц [1].

Металлические наночастицы обладают уникальными каталитическими, магнитными, электронными и оптическими свойствами, которые отличаются от свойств массивных металлов. Среди различных металлических частиц большой интерес в последнее время вызывают наночастицы меди и никеля, благодаря их реакционной способности и дешевизне получения [2]. Наночастицы получают различными методами: физико-химическими и биологическими. Первая группа методов, как правило, является не экологичной, так как в них используются токсичные вещества и относительно высокие температуры. Биологические методы позволяют проводить синтез наночастиц в мягких условиях, без использования высоких температур и высокотоксичных соединений, благодаря использованию живых организмов. Использование таких биоматериалов позволяет получить наночастицы размером не более 1 нм [3]. Но получение наночастиц меди и никеля на подложке из микроорганизмов в последние годы только начало получать свое развитие [4,5].

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме "Направленная модификация и исследование стабильности производных фуранов - ценных продуктов конверсии возобновляемой растительной биомассы" (FEWG-2022-0001).

Список литературы

- [1] Saleh T. A. *Environmental Technology & Innovation*. **2020**, 20, 101067.
- [2] Ghorbani H. R., Mehr F. P., Poor A. K. *Orient. J. Chem.* **2015**, 31, 527.
- [3] Gracioso L. H. *Science Advances*. **2021**, 7, 9210.
- [4] Santhoshkumar T. *South African Journal of Botany*. **2023**, 162, 484.
- [5] Kashyap P. *Journal of Agriculture and Food Research*. **2023**, 13, 100654.

Программная платформа для моделирования осаждения палладия на поверхности углерода методом Монте-Карло

Д.И. Андреев^{1,2}, Д.А. Бойко¹, А.С. Галушко¹, В.П. Анаников¹

¹Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

²Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 125047 Москва, Миусская пл. 9

E-mail: dmt.and.ivanson@gmail.com

Написана программа на языке программирования Python, которая моделирует осаждения атомов палладия на поверхность углерода. Модель принимает 4 ключевых параметра: длину стороны поля в нанометрах, матрицу дефектов, количество атомов и вероятности растворения, осаждения и передвижения частиц.

Данная работа дополняет недавнее исследование [1], где было экспериментально с атомарной точностью зафиксировано динамическое поведение атомов, кластеров и наночастиц на поверхности катализатора.

Вероятности передвижения частиц были рассчитаны из энергии связи частицы с поверхностью, которые получены ранее в отдельном исследовании [2]. Таким образом на каждой итерации программы частицы растворяются, осаждаются или передвигаются с заданной вероятностью. Также они объединяются в более крупные частицы.

Окончанием работы программы считается состояние равновесия, когда частицы не объединялись последние 10% итераций. В результате работы программа рассчитывает статистику системы, сохраняет график развития состава системы и делает снимок осаждения частиц.

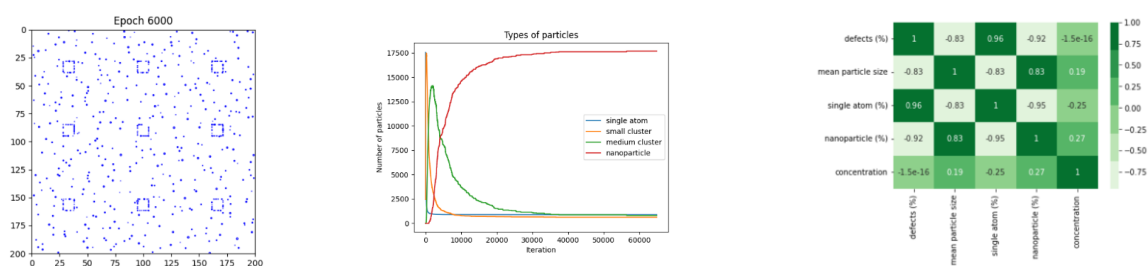


Рис. 1 Снимок осаждения частиц, график развития системы и матрица корреляций параметров системы

По рассчитанным данным построили матрицу корреляций, графики зависимости количества одноатомных центров и среднего размера частиц от количества дефектов. Из снимков сделали видео осаждения. Установили, что **количество одноатомных центров и средний размер частиц зависят от количества дефектов; состав системы зависит от упорядоченности дефектов.**

Список литературы

[1] Galushko A.S., Boiko D.A., Pentsak E.O., Eremin D.B., Ananikov V. P. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 9092-9103.

[2] Pentsak, E. O., Kashin, A. S., Polynski, M. V., Kvashnina, K. O., Glatzel, P., Ananikov, V. P. *Chemical Science*. **2015**, *6*, 3302–3313.

Создание базы данных цитотоксичности ионных жидкостей

Л.А. Аракелян, К. С. Егорова, В.П. Анаников

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: liana9991@ioc.ac.ru

Ионные жидкости (ИЖ) - это органические соли, обладающие низкими температурами плавления и проявляющие множество уникальных физико-химических и биохимических свойств. Благодаря высокой термической стабильности, незначительному давлению паров и низкой горючести, некоторые ИЖ рассматриваются научным сообществом как "зеленые" растворители. [1] Также не менее привлекательна структурная гибкость ИЖ, которая дает возможность проектировать и синтезировать ИЖ с целевыми свойствами.

ИЖ, иногда называемые "зелеными" растворителями [2], не являются по умолчанию безопасными для окружающей среды и человека, поскольку некоторые из них на самом деле довольно токсичны. Понимание механизмов биологического действия ИЖ является важнейшим условием для их широкого практического использования. Это также необходимо для разработки эффективных моделей прогнозирования токсичности ИЖ по отношению к различным живым организмам.

Высокая биологическая активность ИЖ отчасти объясняется их способностью легко растворяться как в водных средах, так и в липидных бислоях, из которых построены клеточные мембраны. Благодаря структурным особенностям, таким как длина и разветвленность боковой алкильной цепи.

В связи с очень большим количеством доступных ИЖ разработка надежных методов прогнозирования их токсичности является крайне важной. Учитывая время, необходимое для проведения экспериментальных исследований, методы вычислительного моделирования (*in silico*) стали надежной и менее затратной альтернативой при оценке риска ИЖ. [3] И в тех случаях, когда экспериментальная информация ограничена или отсутствует, подход QSAR позволяет быстро восполнить пробелы в данных [4].

Целью данной работы является создание базы данных цитотоксичности ИЖ и подбор дескрипторов, которые будут описывать вклад структурных особенностей в биологическую активность.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Научной Школы НШ-5199.2022.1.3.

Список литературы

- [1] Dommert F., Schmidt J., Krekeler J., *Mol. Liq.* **2010**, *152*, 2-8
- [2] Egorova K.S., Ananikov V.P., *ChemSusChem.* **2014**, *7*, 336-360.
- [3] Varnek, I. Baskin, J. *Chem. Inf. Model.* **2012**, *52*, 1413-1437.
- [4] Rybińska-Fryca A., Sosnowska A., Puzyn, T., *Materials.* **2020**, *13*, 2500.

Использование AI для решения прямых и обратных задач химической гидромеханики

И.И. Ахметзянов, Н.Н. Диева, Д.Е. Пивоваров

РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, 119991 Москва, Ленинский пр-кт, 65

Email: Axmetzyanov.ildan@mail.ru

Современное состояние выработанности большинства нефтяных месторождений, как на поздней стадии разработки, так и новых, демонстрирует неэффективность применения традиционных методов разработки. Появляется необходимость использования химических методов, частично тепловым воздействием. Создание математических моделей описывающих процессы химического и термохимического воздействия на пласты являются одним из инструментов обработки лабораторных и промысловых экспериментов и методов проведения прогнозных расчетов. Такие гидродинамические модели основаны на системе дифференциальных уравнений в частных производных. Как правило, для их решения вводятся так называемые разностные сетки, в узлах которых определяются параметры рассматриваемой системы. При этом точность итоговых вычислений зависит от размерности сеток, и от них же зависит длительность и сложность вычислений.

В целях уменьшения времени решения систем дифференциальных уравнений разностными методами, в данной работе рассмотрен подход, основанный на использовании искусственного интеллекта [1,2], по сути являющийся поиском наиболее оптимальных методов решений дифференциальных уравнений. Задавая функцию потерь $L_{phys} = L_{BC} + L_{DE}$ в виде, удовлетворяющем законам сохранения, мы учитываем все свойства аппроксимируемых уравнений, которые знаем. L_{BC} – функция потерь для граничных условий, а L_{DE} – функция потерь для дифференциальных уравнений. Таким образом, заданная функция потерь должна минимизироваться на тех решениях, для которых выполняются начальные и граничные условия, в рамках расчетов по рассматриваемым дифференциальным уравнениям.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (грант 22-77-10081).

Список литературы

- [1] Raissi M., et.al. Journal of Computational physics. 2019, 378, 686-707.
- [2] Liu L. et al. arXiv preprint arXiv:2206.03864. 2022.

Компонентный анализ газовых смесей по данным субтерагерцовой спектроскопии

М.И. Банников, П.С. Родин, О.И. Шаршов, А.В. Дубров

ИППЛИТ РАН – Филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, 140700 Шатура,
ул. Святоозерская, 1

E-mail: adubrov@laser.ru

ТГц-спектры поглощения содержат важную информацию, характеризующую состав вещества, которую можно извлечь путём соответствующего анализа. Для компонентного анализа газовых смесей по данным субтерагерцовой спектроскопии проведена разработка комплекса алгоритмов интеллектуального анализа спектральных данных. Исходными данными являлись модельные спектры поглощения в субтерагерцовой области из 2-ух, 3-х и 4-х-компонент всех возможных комбинаций восьми веществ: H_2O , O_3 , O_2 , CH_4 , SO_2 , NH_3 , NO , H_2S при различном давлении и температуре. Модельные спектры получены в автоматическом режиме из базы HITRAN с помощью программного интерфейса HAPI [1]. На первом этапе сырые данные спектров подвергались предобработке, а затем, на втором этапе, решалась задача классификации с использованием модели машинного обучения. Анализировалась эффективность двух подходов к предобработке данных: метода главных компонент и подсчёта количества спектральных пиков с формированием обучающей выборки на основе волновых чисел, соответствующим этим пикам. Проведена оценка оптимального количества главных компонент при предобработке данных. Выполнен анализ эффективности следующих моделей классификации: метод опорных векторов с разными ядрами, логистическая регрессия, случайный лес, kNN, гауссовский наивный байесовский классификатор, XGBClassifier. Установлены области применимости исследованных моделей машинного обучения. Определён перечень различных смесей, все компоненты которых могут быть достоверно идентифицированы хотя бы одной из разработанных моделей машинного обучения. Показано, что для построения универсального классификатора, лучшим качеством предсказания обладает метод опорных векторов с линейным ядром, однако для отдельных смесей преимущественно могут обладать и другие исследованные методы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках проекта № 075-15-2020-787 "Фундаментальные основы, методы и технологии цифрового мониторинга и прогнозирования экологической обстановки Байкальской природной территории".

Список литературы

[1] R.V. Kochanov, I.E. Gordon, L.S. Rothman, P. Wcislo, C. Hill, J.S. Wilzewski, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **2016**, *177*, 15-30.

2,5-диформилфуран – основа редокс-активного полимера биосенсора

Т.С. Белоусова, Р.Н. Перчиков, М.С. Челюканов

Тульский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, 92

E-mail: tatyana.belousova.2000@mail.ru

В работе изучена возможность разработки биосенсора на основе матрицы 2,5-диформилфуран/хитозан для определения содержания фенола в пробах сточных и природных вод. Редокс-активный полимер на основе 2,5-ДФФ имеет ряд преимуществ. Альтернативные полимерные матрицы имеют в своем составе глутаровый альдегид, ферроценкарбоксальдегид, сафранин и другие медиаторы. Получение таких веществ имеет в первую очередь высокую стоимость. По сравнению с ними применение 2,5-ДФФ наиболее выгодно, т.к. он производится из фруктозы, получаемой из биомассы и возобновляемого сырья.

Создание редокс-активного полимера проводится в 2 стадии. Первая стадия состоит из синтеза 2,5-диформилфурана (2,5-ДФФ) путем каталитического гидролиза и дегидратации фруктозы до 5-гидроксиметилфурфуrolа (5-ГМФ) и дальнейшего окисления [1]. Вторая стадия состоит в сшивке 2,5-ДФФ и хитозана, алгоритм которой схож с процессом сшивки хитозана и ферроценкарбоксальдегида [2].

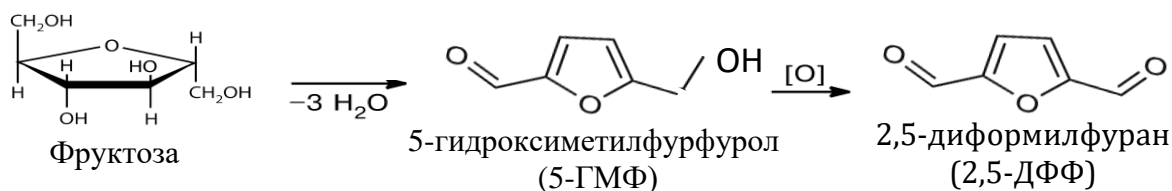


Рис. 1. Схема синтеза 2,5-ДФФ

В ходе работы было выявлено, что биосенсор на основе полимерной матрицы 2,5-ДФФ/хитозан и микроорганизмов *Delftia tsuruhatensis* ВКМ В-3752 способен определять фенол в модельных растворах с концентрацией 0,002 г/м³, что в 2 раза превышает предельно допустимую концентрацию фенола в воде водных объектов хозяйственно-питьевого и культурно-бытового водопользования. В дальнейшей работе планируется подбор наиболее эффективного соотношения компонентов редокс-активного полимера для расширения диапазона определяемых концентраций

Исследование выполнено за счет гранта РНФ № 23-13-20021 и поддержано правительством Тульской области.

Список литературы

- [1] Кашпарова В. П. и др. *Изв. АН, сер. хим.* **2015**, 5, 1069.
- [2] Харьковская А. С. и др. *Известия ТулГУ. Естественные науки.* **2018**, 3, 26-33.

Build-a-bio-Strip: специальный онлайн-сервис для быстрой оценки экологической опасности химических реакций

Д.С. Бойченко¹, Н.И. Коломоец¹, Д.А. Бойко², К.С. Егорова², А.С. Галушко²,
В.П. Анаников²

¹Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

²Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: dmitrii.boichenko@chemistry.msu.ru

Некоторое время назад в нашей научной школе была предложена методика быстрой предварительной оценки потенциальной опасности химических процессов для здоровья с помощью био-стрипов. В частности, био-стрипы подразумевают использование CC_{50} (полу-максимальных концентраций цитотоксичности) и нормализованной цитотоксичности веществ, которые участвуют в конкретной химической реакции для оценки его «общей цитотоксичности». Эта методика была успешно применена для анализа широко распространенных химических реакций, в том числе реакций Сузуки.

Построение подобных диаграмм является весьма времязатратной задачей, включающей в себя множество рутинных действий, причем этапы построения диаграмм относительно просто алгоритмизируются. Ввиду указанных причин нами был написан сайт, позволяющий быстро и просто строить диаграммы цитотоксичности. Сайт написан в фреймворке Flask, с включением ряда скриптом на языке Python и использует классические библиотеки языка: Matplotlib и Numpy.

Для построения диаграмм необходимо сформировать файл со всей необходимой информацией в определенном формате, используя разработанную нами нотацию реагентов. Пользователю нужно лишь сформировать файл входных данных и загрузить на сайт. На выходе пользователь может скачать полученные графики в векторных форматах и рассчитанные метрики цитотоксичности (рис.1). Данные проходят несколько этапов обработки: определяется количество всех комбинаций в пространстве химических веществ, формируется предварительная информация по каждой возможной комбинации реагентов и продуктов, а затем строятся и графики.

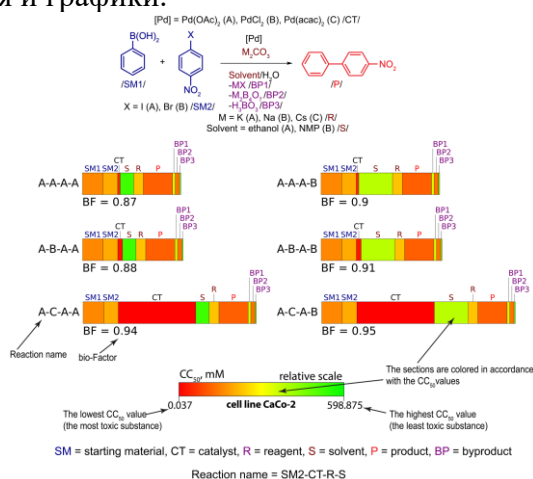


Рис. 1. Пример автоматически сгенерированных диаграмм для реакции Сузуки. Для наглядности представлена лишь часть диаграмм.

Таким образом, разработанная нами сетевая инфраструктура позволяет легко и интуитивно строить диаграммы. На сайте имеется обширный мануал.

Список литературы

[1]. Egorova, K.S., Posvyatenko, A.V., Galushko, A.S., & Ananikov, V.P. *Chemosphere*. **2023**, 313.

Особенности сорбции левофлоксацина в присутствии металлорганического координационного полимера MIL 88b

Л.С. Бондаренко^{1,2}, А.А. Дзеранов^{1,2}, Р.К. Баймуратова^{1,3}, Г.И. Джардималиева^{1,3},
Н.С. Тropicкая^{1,2}, А.Е. Романова¹, К.А. Кыдралиева¹

¹Московский авиационный институт (НИУ), 125993 Москва, Волоколамское ш., 4

²НИИ скорой помощи имени Н.В. Склифосовского, 129090 Москва, Большая Сухаревская площадь, 3

³Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, 142432 Черноголовка, п-кт академика Семенова, 1

E-mail: l.s.bondarenko92@gmail.com

Широкое распространение левофлоксацина, фторхинолонового антибиотика третьего поколения, привело к его обнаружению в поверхностных водах, грунтовых водах, сточных водах очистных сооружений и даже в питьевой воде во многих странах, что может повысить устойчивость бактерий и стать причиной появления антибиотикорезистентных бактерий и генов. В данной работе исследован механизм сорбции левофлоксацина мезопористым металлорганическим координационным полимером (МОКП), в частности, MIL-88b, состоящий из тримеров железа, соединенных лигандами терефталевой кислоты. В качестве целевого поллютанта для сорбции были использованы как химически чистый левофлоксацин (98%, Sigma-Aldrich), так и аптечный препарат «Левофлоксацин-Вертекс» с содержанием левофлоксацина 78.84%. Сорбционная емкость для образцов МОКП по отношению к левофлоксацину была исследована при pH 5.0, 7.0 и 9.0 соответственно. При сорбции как чистого левофлоксацина, так и коммерческого препарата наблюдалось изменение цвета супернатанта, связанное с высвобождением Fe^{3+} из МОКП (подтверждено данными ICP-OES и UV-Vis спектроскопии), при этом концентрация Fe^{3+} в супернатанте увеличивалась пропорционально увеличению концентрации левофлоксацина, что позволило предположить разрушение МОКП, инициированное комплексообразованием антибиотика с Fe^{3+} . Однако, более детальный анализ данного механизма требует использования инструментов моделирования. Кроме того, при сорбции коммерческого препарата на изотермах сорбции наблюдаются локальный максимум, участок десорбции и локальный минимум, затем рост сорбционного параметра. Отклонение формы различных изотерм сорбции от линейной указывает на сложные конкурентные механизмы межфазных взаимодействий в системе Fe^{3+} -содержащий МОКП – амфотерный левофлоксацин, включая комплексообразование, сорбцию, авторы также не исключают и мицеллообразование. Применение инструментов моделирования вероятно позволило бы выявить указанные механизмы.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФ (грант 22-73-10222).

Оптимизация условий формирования наночастиц палладия на бактериальной подложке

Д.В Борзова, П.В. Рыбочкин, О.А. Каманина

Тульский государственный университет, 300012 Тула, ул. Фридриха Энгельса, 157

E-mail: d.v.borzova01@gmail.com

Наночастицы металлов (НЧ) стали очень популярными благодаря своим физико-химическим, противомикробным и катализирующим свойствам. Однако традиционные методы синтеза этих наночастиц, основанные на физических и химических процессах, имеют недостатки, такие как: высокое энергопотребление, высокая стоимость и использование токсичных веществ. Сейчас известен альтернативный способ биологического синтеза наночастиц металлов экологически чистым и экономически эффективным способом [1]. Разработка биосовместимых, нетоксичных и экологически чистых методов синтеза наночастиц заслуживает внимания. В работе провели реакцию Хека с катализатором, представляющий собой НЧ палладия на аэробных бактериях *Paracoccus yeii* ВМК В-3302 при разном времени подачи водорода (рис. 1) и различной температуры формирования НЧ (рис. 2).

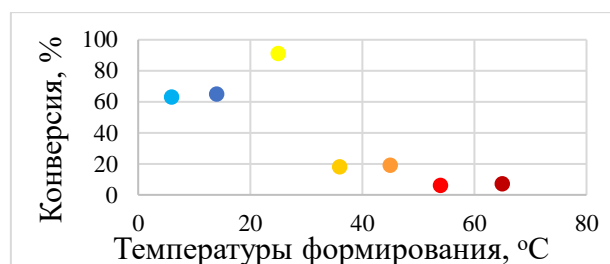
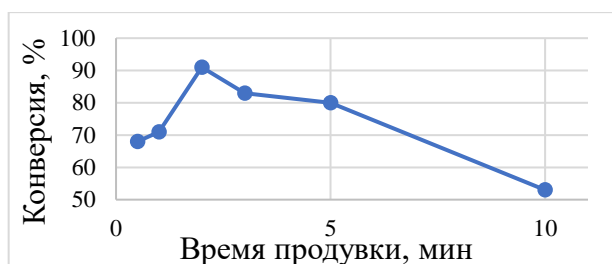


Рис.1 Различное время продувки водородом Рис.2 Различная температура формирования

Таким образом, наилучшим временем подачи водорода является 2 минуты и оптимальной температурой является 25 °C. При формировании наночастиц необходимо, чтобы клетка микроорганизмов находилась в каталитически активном состоянии, по всем видимости, именно эти параметры благоприятно сказываются на жизнеспособности микроорганизмов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме "Синтез таргетных биологически активных ионных соединений и новых биокomпозитных материалов" (FEWG-2021-0011).

Список литературы

[1] Ovais M. et al. *International journal of molecular sciences*. 2018, 12, 4100.

Моделирование переноса заряда Li^+ через интерфейсы $\text{Li}/\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ с помощью молекулярной динамики и машинно-обучаемых потенциалов

А.С. Буров, А.О. Боев, А.М. Абакумов, Д.А. Аксёнов

Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бул., 30с1

E-mail: burov.arseniy@skoltech.ru

Литий-ионные аккумуляторы с твердотельным электролитом обладают рядом преимуществ по сравнению с аккумуляторами с жидким электролитом. Среди достоинств твердотельных электролитов — широкое электрохимическое окно и более высокая термическая стабильность. Твердотельные электролиты потенциально совместимы с металлическим литием, позволяя значительно увеличить удельную плотность энергии аккумулятора [1]. На данный момент существуют способы изготовления интерфейсов между металлическим литием и перспективным твердотельным электролитом $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ (LLZO) с низким сопротивлением. Однако все данные методы предполагают модификацию LLZO и введение дополнительной фазы на границе раздела фаз электрод-электролит (интерфейс). Между тем, не совсем понятно, почему емкость аккумуляторов с немодифицированным электролитом LLZO быстро снижается и как меняется структура интерфейсов при циклировании. Моделирование интерфейсов Li/LLZO с последующим изучением трансформации структур вовремя циклирования может восполнить этот пробел.

Ранее мы изучали перенос ионов лития через интерфейс Li/LLZO с помощью расчетов в рамках метода функционала плотности (DFT) и методом упругой ленты (NEB). Наши результаты показали, что барьеры переноса заряда умеренно больше по сравнению с барьерами миграции в объемном LLZO. Разница составляет порядка 0.3 эВ, что указывает на потенциальное происхождение межфазного сопротивления, наблюдаемого в экспериментальных исследованиях [1]. Кроме того, мы демонстрируем, что рядом с интерфейсом выгодно образование вакансий Li , что указывает на возможную причину образования пустот в данной области и последующую деградации структуры интерфейса.

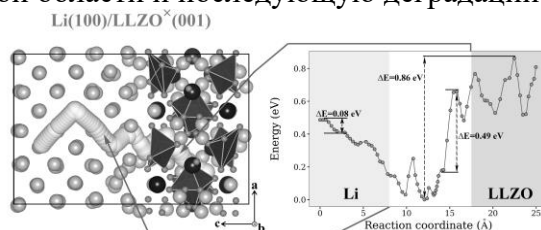


Рис. 1. Путь и энергетический профиль миграции ионов Li через интерфейс Li/LLZO .

Однако, ранее было показано, что в твердотельных электролитах зачастую кооперативная миграция может снижать барьеры миграции и соответственно повышать ионную проводимость [3]. Корректное моделирование такого процесса требует учитывать влияние конечной температуры, большого размера моделируемой системы (>10 нм.), длительное время процесса (>1 нс.) и одновременного описания лития в трех состояниях (в аноде, на интерфейсе и в электролите). Для этого мы применили молекулярную динамику с использованием машинно-обучаемых межатомных потенциалов [3]. Наши результаты показывают, что барьеры активации в этом случае существенно ниже (0.23 эВ) чем для DFT-NEB расчетов и находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант 23-73-30003).

Список литературы

- [1] Q. Liu, Z. Geng, C. Han, Y. Fu, S. Li, Y. B. He, F. Kang, B. Li, *J. Power Sources*, **2018**, 389, 120-134.
- [2] X. He, Y. Zhu, Y. Mo, *Nature communications*, **2017**, 8(1), 15893.
- [3] E. V. Podryabinkin, A. V. Shapeev, *Computational Materials Science*, **2017**, 140, 171-180.

Предсказание ширины запрещенной зоны гибридных 1D галогенометаллатов(III) методами ML

А.В. Быков, Т.А. Шестимерова, А.В. Шевельков

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

E-mail: bykov.andrey.sw@gmail.com

Органо-неорганические галогенометаллаты обладают уникальными оптоэлектронными свойствами (светопоглощение, фото-, электролюминесценция и др.) и рассматриваются в качестве потенциальных материалов в различных высокоэффективных оптоэлектронных устройствах. [1] Особенностью соединений этого класса является то, что наиболее важные физико-химические свойства в подавляющем большинстве случаев определяются строением и конфигурацией анионной подструктуры. При этом значительные успехи в установлении количественных соотношений «структура-свойство» (QSPR) были достигнуты для наиболее изученных 3D и 2D перовскитоподобных соединений свинца(II) [2], негативной чертой которых являются высокая токсичность и химическая неустойчивость [3]. В данной работе мы представляем решение задачи QSPR по предсказанию ширины запрещенной зоны (ШЗ) нетоксичных и устойчивых 1D органо-неорганических галогеновисмутатов(III) и галогеноантимонатов(III) с анионной подструктурой типа α - $\{M\text{Hal}_4\}^-$ (рис. 1).

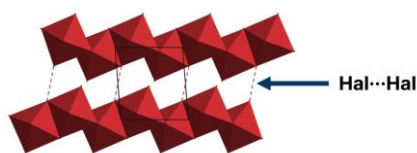


Рис. 1. Строение анионной подструктуры типа α - $\{M\text{Hal}_4\}^-$ (M – Sb, Bi; Hal – Cl, Br, I).

Основываясь на кристаллографических данных в собранном датасете из 159 структур, мы провели исследование возможных пространств дескрипторов (длины связей M–Hal, углы Hal–M–Hal, показатели степени искажения октаэдров $M\text{Hal}_6$, расстояния Hal...Hal) для решения задачи QSPR. Нами испытан ряд моделей машинного обучения (MLR, SVR, GPR, RF, XGB) для разных пространств признаков, определена важность дескрипторов, а также показано, что степень искажения октаэдров $M\text{Hal}_6$ сопоставима по влиянию на значение ШЗ со слабыми нековалентными взаимодействиями Hal...Hal между соседними анионами.

Работа выполнена при поддержке Некоммерческого Фонда развития науки и образования "Интеллект" и при финансовой поддержке РФФИ (грант № 21-53-50007).

Список литературы

- [1] J. Sun, J. Wu, X. Tong, F. Lin, Y. Wang, Z.M. Wang, *Advanced Science*. **2018**, 5(5), 1700780.
- [2] J. Chen, M. Feng, C. Zha, C. Shao, L. Zhang, L. Wang, *Surfaces and Interfaces*. **2022**, 35, 102470.
- [3] S. Attique, N. Ali, S. Ali, et al. *Advanced science*. **2020**, 7(13), 1903143.

Концепция экспериментальной программы нейросетевого моделирования показателей качества резинотехнических изделий

С.В. Фомин, В.С. Ростовцев, Р.Р. Ванчугов, Е.С. Широкова

Вятский государственный университет», 610000 Киров, ул. Московская, 36

E-mail: rostovtsev@vyatsu.ru, stud126577@vyatsu.ru

С 2019 года в Вятском государственном университете ведутся научно-исследовательские работы применения искусственных нейронных сетей для моделирования показателей качества химической продукции. В прошлой работе рассматривалась ситуация с 10 входами и 3 выходами. Данная работа сосредотачивается на разработке программной модели для решение прямой задачи, которая заключается в определении физических и химических свойств резиновой смеси на основе информации о ее рецептуре. При увеличении размерности входных и выходных векторов требуется разработать программу для оценки значимости входов, которая также решает следующие задачи:

1. Формирование обучающей выборки.
2. Применение методов аугментации для создания представительной выборки.
3. Разделение выборки на обучающее, валидационное и тестовое подмножества.
4. Оценка эффекта переобучения нейронной сети.
5. Выбор параметров нейронной сети и ее обучение.
6. Оценка среднеквадратичной ошибки обучения (MSE).
7. Оценка значимости входов обученной нейронной сети.
8. Вычисление коэффициентов корреляции до и после удаления входов для упрощения обучающей выборки.
9. Анализ результатов моделирования.

Разработанная программа позволяет оценивать влияние конкретных ингредиентов на свойства резиновой продукции, исключать ненужные входы и оптимизировать рецептуры. Результаты анализа показывают, что генерация новых данных не нарушает корреляционную зависимость между входами и выходами.

Исследования, проведённые ранее в университете, показывают, что целесообразно использовать нейронные сети для моделирования выходных параметров резиновых смесей, а именно сверточные нейронные сети.

Предсказание свойств офтальмологических препаратов с помощью машинного обучения

А.С. Вепрева, Н.В. Губина, В.В. Виноградов

Университет ИТМО, 191002 Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, 9

E-mail: vepreva@scamt-itmo.ru

При лечении офтальмологических заболеваний глазные капли являются наиболее удобным, экономичным и безопасным способом доставки лекарств в глаз по сравнению с инвазивными методами. [1] Однако создание капель с необходимыми свойствами (например, проницаемость роговицы) является сложной задачей, требующей проведения множества экспериментов на стадии доклинических испытаний.

Целью данной работы является создание модели, способной предсказывать набор свойств, предъявляемых к глазным каплям – проницаемость роговицы и конъюнктивы, связывание лекарственного средства с меланином, что обеспечивает пролонгированное действие препарата, а также токсичность и раздражение. В данной работе используются трансформеры - модель, которая использует механизм внимания для повышения скорости обучения.

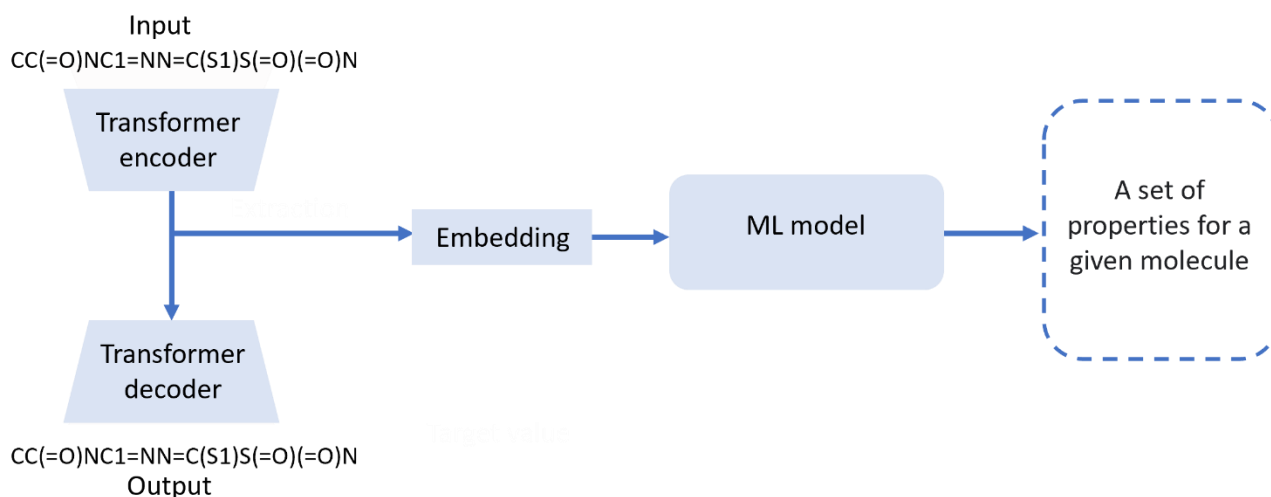


Рис. 1. Схема работы системы для предсказания свойств офтальмологических препаратов.

Полученная система позволит определять сразу несколько свойств, которыми должны обладать глазные капли для успешного прохождения стадии доклинических испытаний. Таким образом удастся сократить число испытаний на животных, минимизируя при этом затраты и время на производство лекарства.

Список литературы

[1] N. Kidron, H., Vellonen, K., Del Amo, E. M., Tissari, A., & Urtili, A, *Pharmaceutical Research*, **2010**, 27, 1398–1407.

Метрическое обучение для определения состава смесей по спектральным данным

А.П. Ворожцов

МГУ им. М.В.Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1

E-mail: artem2001qaz@gmail.com

Спектральные методы является важным инструментом для анализа структуры и физико-химических свойств химических соединений. Однако расшифровка спектров является довольно трудоемкой задачей, а в случае большого перекрыwania сигналов идентификация отдельных соединений становится крайне нетривиальной.

В данной работе был разработан алгоритм машинного обучения для идентификации химических веществ в смесях на основе спектральных данных. Для обучения и тестирования алгоритма использовался набор модельных спектров [1], в котором каждое из 500 соединений представлено 30 спектрами, отличающимися степенью уширения спектральных линий, вариациями положения сигналов и их интенсивности. Для достижения поставленной цели был использован подход метрического обучения, так как он позволяет алгоритму легко адаптироваться к увеличению количества классов. На первом этапе работы алгоритма происходит извлечение высокоуровневых скрытых представлений спектральных данных с помощью сверточной нейронной сети. Затем соединению (или смеси соединений) приписывался класс его ближайшего соседа в пространстве скрытых представлений. По результатам работы удалось разработать алгоритм, эффективно определяющий соединения по спектральным данным как индивидуально, так и в составе смесей.

Таблица 1. Точность алгоритма.

Количество верных предсказаний	Смесь 4 веществ	Смесь 4 веществ (неодинаковые количества)	Смесь 3 веществ	Смесь 2 веществ	1 вещество
1	100%	99.6%	100%	99.8%	98.6%
2	98.6%	94.2%	99.4%	96.6%	
3	92.8%	72.6%	86.8%		
4	72.2%	39.8%			

Код и данные доступны в гитхаб-репозитории [artemVorozhsov/MixtureAnalyzer](https://github.com/artemVorozhsov/MixtureAnalyzer).

Работа выполнена при финансовой поддержке Некоммерческого фонда развития науки и образования «Интеллект».

Список литературы

[1] J. Schuetzke, N.J. Szymanski, M. Reischl, *Comput. Mater.* **2023**, 9, 100.

Применение QSAR для прогнозирования биоактивности модифицированных наночастиц магнетита в условиях малой выборки

М.Э. Гасанов¹, В.Л. Лернер², Л.С. Бондаренко², А.П. Кирюшина³, А.А. Дзеранов², М.Ю. Сидоров², В.Д. Славиогло⁴, А. Ю. Шулаков⁴, К.А. Кыдралиева²

¹Сколтех, 121205, Москва, Большой бульвар, 30с1

²Московский авиационный институт, 125993, Москва, Волоколамское шоссе, д. 4

³Институт экологии и эволюции РАН, 119071, Москва, Ленинский проспект, д. 33

⁴Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 119234, Ленинские горы, 1/12

E-mail: Mikhail.Gasanov@skoltech.ru

Большие масштабы внедрения наноматериалов на основе наночастиц магнетита Fe_3O_4 в биомедицине и ремедиационных мероприятиях благодаря технологичности и возможности варьирования свойств на стадии синтеза поднимает острый вопрос о безопасности использования данных наноматериалов и снижения трудозатрат при проведении множества рутинных экспериментов при оценке их токсичности. В настоящем исследовании для установления взаимосвязи с помощью методов машинного обучения между параметрами условий синтеза, кристаллической структурой и биологическими свойствами собрана база данных рентгенофазового анализа из более 100 собственных образцов наночастиц, модифицированных различными соединениями и в различных условиях синтеза, из которых только 21 образец использован для моделирования токсичности по отношению к инфузориям (*Paramecium caudatum*) и горчице белой (*Sinapis alba*). В качестве предикторов были использованы параметры кристаллической решетки $a=8,2-8,9 \text{ \AA}$ с индексом Миллера [440] и различные соотношения спектра, полученные с помощью библиотеки для обработки временных рядов «tsfel». Отдельно решались задачи регрессии и классификации. В задаче регрессии прогнозировалось значение EC_{50} , а в задаче классификации прогнозировалось отношение к классу токсичных или нетоксичных соединений. В работе были использованы следующие модели: RandomForest, GradientBoosting, kNN и DecisionTree. Несбалансированность классов в выборке, вызванная отсутствием значительной токсичности у большинства образцов, не позволила построить адекватную регрессионную модель. В задаче классификации наилучшие метрики удалось достичь с помощью GradientBoosting, однако значения F-1 меры давали широкий разброс значений в зависимости от деления на обучающую и тестовую выборку. Для решения данной проблемы необходимо расширение выборки или использование методов искусственного расширения выборки с использованием как классических подходов, так и специализированных для молекулярного моделирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №23-23-00621).

Диагностика рака легких по отношению к раку других локализаций по выдыхаемому воздуху с применением различных алгоритмов оптимизации нейронных сетей

Э.М. Гашимова¹, А.З. Темердашев¹, Д.В. Перунов², В.А. Порханов², И.С. Поляков²

¹*Кубанский государственный университет, 350040 Краснодар, ул. Ставропольская, 149*

²*Научно-исследовательский институт – Краевая клиническая больница № 1 им. С. В. Очаповского, 350086 Краснодар, ул. 1 Мая, 167*

E-mail: elina.gashimova@yandex.ru

Выдыхаемый воздух активно исследуется как источник биомаркеров рака легких ввиду неинвазивности, простоты и удобства отбора проб. Множество исследователей работают над данной проблемой, однако большинство работ показывают результаты классической схемы эксперимента, представляющую собой исследование профилей летучих органических соединений в выдыхаемом воздухе пациентов с раком легких и здоровых людей. Тем не менее, другие заболевания, в том числе и рак различных локализаций потенциально могут отражаться на составе выдыхаемого воздуха, что также необходимо принимать во внимание при разработке методик диагностики.

В рамках настоящего исследования методом ГХ-МС проанализирован выдыхаемый воздух 85 пациентов с раком легких и 85 пациентов с раком других локализаций (гортани, молочной железы, предстательной железы, толстой кишки, почек, желудка, шейки матки). Диагностическую модель строили с применением нейронных сетей. При этом сравнивали эффективность двух алгоритмов оптимизации нейронных сетей: Бройдена — Флетчера — Гольдфарба — Шанно (BFGS) и метод сопряжённых градиентов. Полученные модели тестировали с помощью 3-кратной перекрестной проверки. В результате чувствительность и специфичность модели на тестовой выборке, построенной с помощью BFGS составили 67% и 69%, а в случае метода сопряжённых градиентов – 56% и 60%.

Производительность полученных моделей была выше в случае BFGS, однако, весьма низка для практического применения в клинической практике, что свидетельствует о недостаточном разделении пациентов с раком различных локализации по профилю выдыхаемого воздуха. При разработке диагностической модели для рака легких следует принимать во внимание, что модель может положительно реагировать не только на рак легких, но и на онкологию других локализаций.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда и Кубанского научного фонда (грант 22-13-20018).

Селективное (С-3)-Н арилирование гетероциклопентадиенов в условиях рутениевого катализа

И.Г. Гнатюк, К.Е. Шепеленко, В.М. Чернышев

*Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им.
М.И. Платова, 346428 Новочеркасск, ул. Просвещения, 132*

E-mail: iragnatyuk26.05@gmail.com

Гетероциклопентадиены – производные фурана, пиррола и тиофена, широко применяются в качестве лекарств, электропроводящих материалов и мономеров [1,2]. Актуальной проблемой в химии гетероциклопентадиенов является селективная С-Н функционализация ядра в положениях 3 и 4, которые являются малореакционноспособными по сравнению с положениями 2 и 5 [3,4].

Нами предложен новый метод селективного С3-Н арилирования иминов, производных соответствующих альдегидов ряда фурфурола, тиофена и пиррола, в условиях катализа комплексами рутения(II) с N-гетероциклическими карбенами. Этот метод позволяет получать с высокими выходами ранее труднодоступные 3-арил-2-карбоксальдегиды гетероциклопентадиенов.

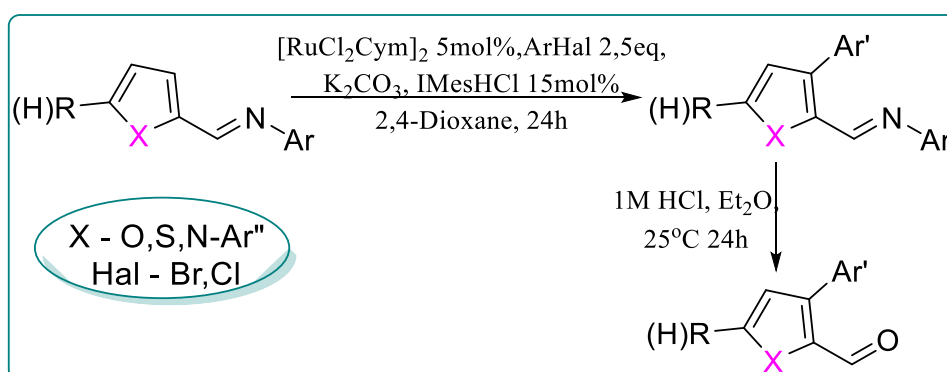


Рис. 1. Селективное С3-Н арилирование гетероциклопентадиенов с последующим гидролизом.

Получаемые альдегиды являются перспективными реагентами для синтеза различных производных фурана, пиррола и тиофена, востребованных в медицинской химии и материаловедении.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант РФФ 23-73-10129).

Список литературы

- [1] V. M. Chernyshev, O. A. Kravchenko, V. P. Ananikov, *Russ. Chem. Rev.* **2017**, 86, 5, 357.
- [2] K.E. Shepelenko, K.A. Nikolaeva, I.G. Gnatiuk, O.G. Garanzha, A.A Alexandrov, M.E. Minyaev, V.M. Chernyshev, *Mendeleev Commun.* **2022**, 32, 485-487.
- [3] A. Sagadevan, A. Charitou, F. Wang, M. Ivanova, M. Vuagnat, M. F. Greaney, *Chem. Sci.* **2020**, 11(17), 4439–4443.
- [4] R. Gramage-Doria, C. Bruneau, *Coord. Chem. Rev.* **2021**, 428, 213602.

Эффективный и доступный метод синтеза HMF и DFF

А.Н. Голышева¹, Д.А. Колыхалов¹, Б.Я. Карлинский^{1,2}

¹Тульский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, 92

²Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: nastyagolysheva2000@yandex.ru

Разработан простой способ получения 5-гидроксиметилфурфура (HMF) путем дегидратации фруктозы в ДМСО двумя способами: либо с использованием доступного катализатора, либо без катализатора, который может сопровождаться в жестких условиях катализируемым. В работе установлено влияние бромных добавок в качестве катализатора на процесс образования 2,5-диформилфурана (DFF) (рис. 1).

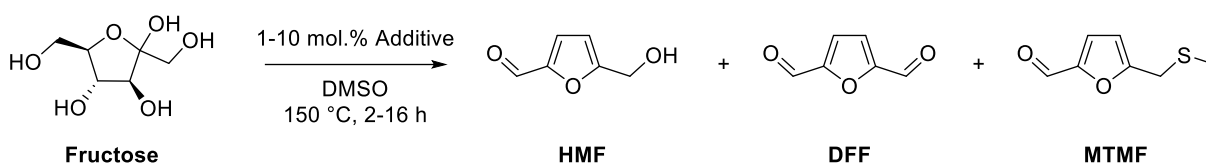


Рисунок 1. Преобразование фруктозы в фурановые производные

В результате были получены HMF и DFF из фруктозы с использованием ДМСО и бромидного катализатора, которым может быть даже бромид натрия, с выходом продукта до 87 % и 67 % для HMF и DFF соответственно. Оптимальными условиями для синтеза DFF были определены как 10 мол.% бромид натрия и 16 часов реакции. Стоит отметить, что при проведении реакции в закрытом сосуде, объем свободного пространства играет важную роль в образовании побочного продукта – метилтио-производного HMF (MTMF).

Оптимизированные технологии могут служить основой для производства ценных химических веществ фурановой платформы на биологической основе из возобновляемых источников в любой лаборатории, стимулируя развитие устойчивой химии и исследований в смежных областях по всему миру, поскольку это не требует использования дорогостоящих реагентов, катализаторов, растворителей или какого-либо специального оборудования.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме "Направленная модификация и исследование стабильности производных фуранов - ценных продуктов конверсии возобновляемой растительной биомассы" (FEWG-2022-0001).

Разработка алгоритма автоматического поиска равновесного состояния металлоорганических комплексов

А.А. Гребенкина, А.А. Митрофанов

Химический факультет МГУ, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

E-mail: nastya.greb@yandex.ru

Поиск геометрической структуры металлоорганического комплекса является важной задачей вычислительной химии, так как дизайн представителей этого класса соединений интересен во многих областях, а применение к данной задаче традиционных методов квантовой химии в настоящее время не всегда успешно.

В настоящей работе разработан алгоритм минимизации энергии комплексов, содержащих лиганд и металл в соотношении 1:1. Подход основан на разработанном ранее алгоритме для оптимизации малых органических молекул, использующем байесовский метод глобальной оптимизации (Tree Parzen Estimator). Степенями свободы выступают наборы двугранных углов молекулы, а поиск минимума осуществлялся полуэмпирическим квантово-химическим методом ХТВ [1]. Входными данными алгоритма служат SMILES-код лиганда, название металла, его заряд и количество шагов оптимизации ТРЕ. Алгоритм инициализации расположения атома металла на каждом шаге глобальной оптимизации описан на рис. 1а. Для избежания получения нереалистичных конформаций в алгоритме используется оценка расстояния металл – ближайший атом лиганда (азот/кислород/сера) на каждом шаге глобальной оптимизации. Оценка осуществляется на основании весового коэффициента, полученного из радиального распределения для этой пары (рис. 1б). Распределения построены по всем структурам из базы данных [2].

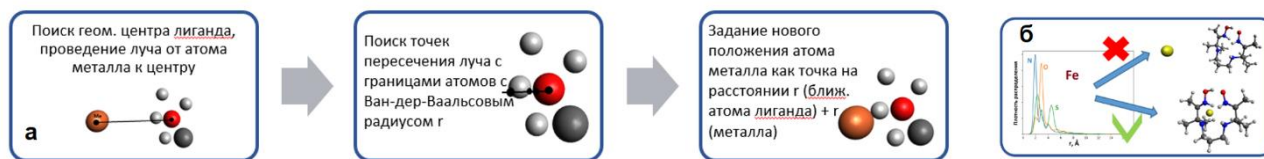


Рис. 1. а - алгоритм инициализации положения металла; б - отбор структур по расстоянию металл - элемент

Мы разработали новый алгоритм, позволяющий получить трехмерную структуру комплекса металла с органическим лигандом, принимающий на вход только одномерное представление молекулы.

Список литературы

- [1] N. Andreadi, D. Zankov, K. Karpov, A. Mitrofanov, *J. Comput. Chem.* **2022**, 43(21), 1434.
- [2] D. Balcells, B. Skjelstad, *J. Chem. Inf. Model.* **2020**, 60, 12, 6135–6146.

Генеративный искусственный интеллект для получения сокристаллов с заранее заданными свойствами

Н.В. Губина, Н.С. Серов, В.В. Виноградов

Национальный исследовательский университет ИТМО, 191002 Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, 9

E-mail: gubina@scamt-itmo.ru

Сокристаллизация представляет собой эффективный метод управления физико-химическими свойствами лекарственных препаратов за счет объединения в структуре биологически-активного вещества и коформера – вспомогательной молекулы, придающей необходимые функциональные свойства [1]. Однако создание сокристаллов с определенными характеристиками является сложной задачей, требующей проведения многочисленных экспериментов.

В данном проекте на основе генеративно-состязательной нейронной сети (процент генерируемых валидных структур >95%), набора моделей машинного обучения (точность предсказаний 70–80%) и графовой нейронной сети (CCGNet) была разработана система генерации коформеров для заданного фармацевтического ингредиента при необходимых механических параметрах сокристалла.

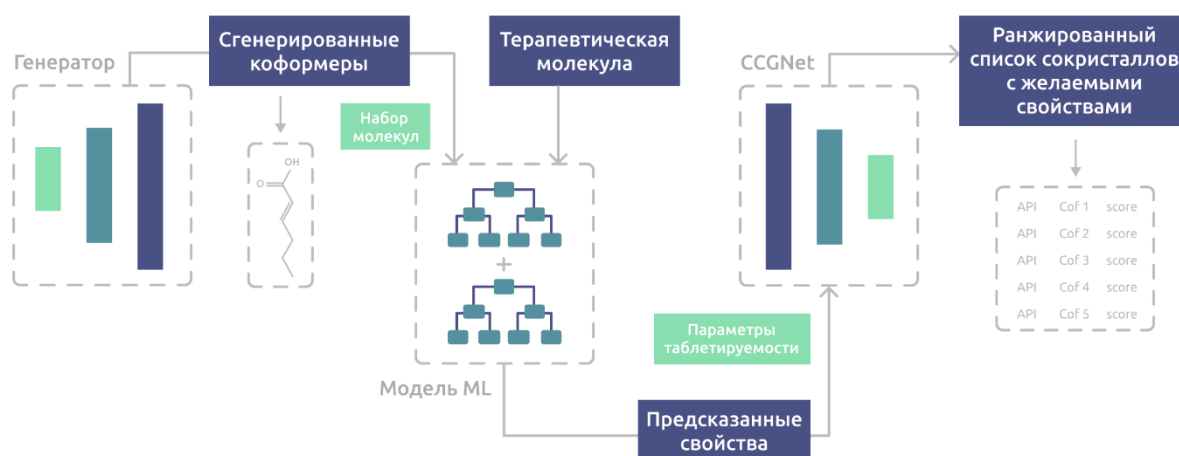


Рис. 1. Схема работы системы для генеративного дизайна сокристаллов.

Полученная система позволяет подбирать коформеры для улучшения свойств таблеттируемости лекарственного препарата, минимизируя при этом количество необходимых экспериментов и снижая затраты при разработке сокристаллов.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы "Приоритет 2030".

Список литературы

[1] Jiang Y. et al., *Nature Communications*. **2021**, 12(1), 5950.

Детектирование ионов переходных металлов в масс-спектрах с использованием свёрточных нейронных сетей

П.Е. Гуревич^{1,2}, Д.А. Бойко², К.С. Козлов^{2,3}, В.В. Ильюшенкова², Ю.В. Буркина²,
В.П. Анаников^{2,3}

¹Московский физико-технический институт, 117303 Москва, ул. Керченская, 1А, корп. 1
²Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47
³Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

E-mail: gurevich.pe@phystech.edu

Искусственный интеллект является крайне полезным инструментом для анализа данных. Он применим в широчайшем диапазоне отраслей: от лингвистики и экономики до химии, биологии и медицины.

В данной работе представлен подход для детектирования ионов переходных металлов в масс-спектрах высокого разрешения. Были реализованы четыре архитектуры моделей глубокого обучения на основе свёрточных и полносвязных нейронных сетей. Модели были обучены на синтетическом наборе данных, состоящем из 49 080 теоретически рассчитанных изотопных распределений. Валидация осуществлялась на наборе данных, включающем в себя 441 масс-спектр. В ходе работы было проведено сравнение эффективности представленных архитектур, исследовано влияние различных модификаций (batch normalization, padding, dropout) на качество моделей и показана интерпретируемость предсказаний нейронных сетей с помощью метода главных компонент и метода t-SNE (t-distributed stochastic neighbor embedding). У лучшей модели валидационный ROC AUC превысил 98%. Для демонстрации применимости обученных моделей на практике был проведён анализ мониторингов различных реакций с участием комплексов палладия и никеля, в результате которого были получены зависимости интенсивностей ионов, содержащих целевые элементы, от времени и положение этих ионов на спектре. На **рисунке 1** представлен результат анализа мониторинга палладий содержащей реакции.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 21-13-00193).

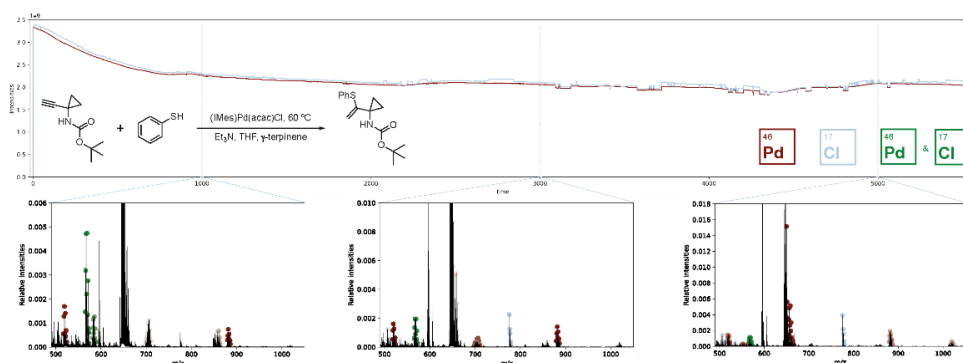


Рисунок 1. Анализ мониторинга реакции.

Биоплёнка на нановолокнах полианилина – новый подход для проводящего полимера в биоэлектрохимических устройствах

Г.К. Гуркин, Р.Н. Перчиков, В.А. Арляпов

Тульский государственный университет, 300026 Тула, ул. Ф. Энгельса, 157

E-mail: goga08202001@gmail.com

Проводящие полимеры, могут быть использованы в качестве одного из материалов для улучшения характеристик биосенсоров. К ним резко возрос интерес, так как они сочетают свойства органических полимеров (такие как прочность, пластичность, гибкость, жесткость или упругость) с электронными, оптическими и термоэлектрическими свойствами, обусловленными подвижностью заряда вдоль π -электронных цепей полимера.

Межфазная полимеризация полианилина позволила получить однородные полианилиновые волокна с контролем их морфологии. Метод является простым и экологичным. Благодаря большой площади поверхности наноматериала облегчается его дальнейшая переработка. Образование нановолокон происходит на стадиях зарождения и начального роста. Затем нановолокна выступают в качестве центров зарождения для дальнейшей полимеризации других мономеров анилина (вторичная стадия роста). Фактически, вторичный рост частиц полианилина приводит к образованию неправильной формы полианилина в микро размерном масштабе. При межфазной полимеризации конечный продукт появляется в виде нановолокна.

Существует проблема одновременного использования микроорганизмов вместе с полианилином, так как большинство из них дают сопоставимые ответы сенсора в пределах нейтральной среды, $\text{pH} = 6.8-7.0$. Это исключает возможность эффективной работы полианилина, который сохраняет свою электроактивную форму только в кислой среде $\text{pH} = 3$. Подход образования биоплёнок микроорганизмов непосредственно на наноматериале позволяет сохранить электроактивность нанополимера в кислой среде и увеличить продолжительность жизнеспособности микроорганизмов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме «Синтез таргетных биологически активных ионных соединений и новых биокompозитных материалов» (FEWG-2021-0011).

Оптимизация архитектуры ВТСП проводов II-го поколения

В.В. Гурьев, И.В. Куликов, В.Е. Крылов, С.В. Шавкин

*Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182 Москва,
пл. Академика Курчатова, 1*

E-mail: GuryevVV@mail.ru

ВТСП провода II-го поколения представляют собой пленки керамического высокотемпературного сверхпроводника $REBa_2Cu_3O_{7-x}$ (REBCO, RE - редкоземельный элемент), которые эпитаксиально выращиваются на буферных слоях, покрывающих гибкую металлическую ленту-подложку. Максимальный бездиссипативный ток REBCO существенно снижается при протекании через границы зерен с углом разориентации, превышающим 5-7 градусов. Поэтому основные задачи буферных слоев это: во-первых сформировать двуосную текстуру, во-вторых способствовать передаче этой текстуры без потери остроты слою REBCO во время эпитаксиального роста. При этом чтобы обеспечить саму возможность эпитаксии, необходимо, чтобы параметр элементарной ячейки верхнего буферного слоя был близок к параметру REBCO и, кроме того, отсутствовало химическое взаимодействие.

За 20 летнюю историю развития технологии ВТСП проводов II-го поколения было испробовано множество материалов буферных слоев и их комбинаций (MgO , Y_2O_3 , $LaAlO_3$, $La_2Zr_2O_7$, $LaMnO_3$, CeO_2 и др). Накоплен обширный экспериментальный материал как по способам формирования двуосной текстуры в слоях MgO и YSZ (Zr_2O_3 стабилизированный Y), так и о процессах эпитаксиального роста последующих буферных слоев. Исследованы диаграммы состояний и для некоторых случаев показано их резкое отличие от объемных материалов, связанное с эпитаксиальной стабилизацией фаз за счет образования структурно-когерентных границ.

Для дальнейшей оптимизации архитектуры буферных слоев представляется целесообразным использование современных инструментов на основе искусственного интеллекта (ИИ) с учетом накопленного опыта. В данной работе предлагается обсудить перспективы использования ИИ для автоматического поиска и анализа новых материалов с целью повышения эффективности и оптимизации процессов эпитаксиального роста в ВТСП проводах II-го поколения.

Генеративная система по предсказанию морфологии наноматериалов

И.С. Дубровский, Н.С. Серов, В.В. Виноградов

Университет ИТМО, 191002 Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, 9

E-mail: dubrovsky@scamt-itmo.ru

На сегодняшний день наноматериалы используются в различных областях, таких как катализ, оптика, медицина. При этом часто на эффективность наноматериалов в данных областях влияет их морфология, а именно линейные размеры, форма, структура поверхности. Например, геометрия наноматериалов влияет на их эндоцитоз клетками иммунитета [1].

Разработанная нами система способна генерировать изображения наноматериалов, получаемые со сканирующего электронного микроскопа, основываясь на процедурах синтеза данных наноматериалов. Это достигается за счет использования предобученной модели обработки естественного языка BERT, а также за счет генеративной системы, которая работает по принципу вариационного автоэнкодера и позволяет создавать изображения наноматериалов. Подобная система позволит исследователям тратить значительно меньше времени на эксперименты благодаря возможности предсказания результата синтеза.

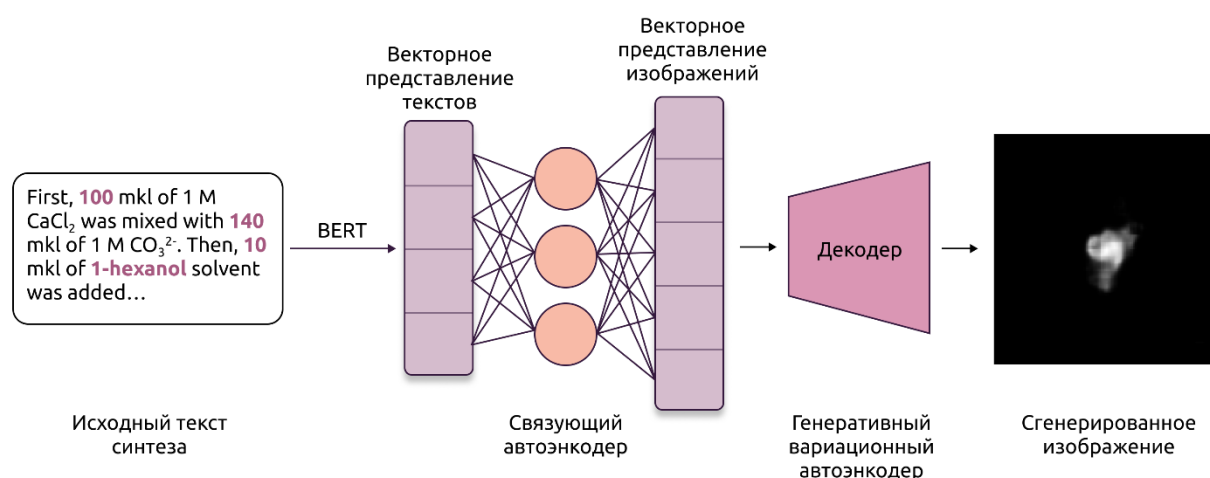


Рис. 1. Схема работы разработанной модели.

Охватывая все детали морфологии наноматериала, разработанный подход также позволит значительно сократить затраты на их разработку. Таким образом, становится возможным обратный дизайн наноматериалов с заранее заданными морфологическими свойствами.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы "Приоритет 2030".

Список литературы

[1] Champion J. A., Mitragotri S, *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2006, 103(13):4930-4.

Применение аддитивных технологий для повышения эффективности и безопасности органического синтеза

К.С. Ерохин, В.П. Анаников

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: erokhin@ioc.ac.ru

Аддитивные технологии (т.н. 3D-печать) находят широкое применение в науке и технике. Они дают возможность быстрого прототипирования, что значительно ускоряет оптимизацию строения конечного изделия. Кроме того, аддитивные технологии делают возможным изготовление изделий со сложным внутренним строением, создание которых классическими методами трудозатратно, а иногда просто невозможно. 3D-печать применима для изготовления реакторов и микрожидкостных устройств, которые позволяют проводить синтезы с высокой эффективностью. Аддитивные технологии также применимы для изготовления каталитических структур, отличающихся простотой рециклизации [1].

Ацетилен является важнейшим строительным блоком в органическом синтезе благодаря своей доступности. Однако работы по функционализации ацетилена встречаются в литературе редко, что обусловлено сложностью работы с ним (необходимость дополнительного оборудования для хранения и работы, взрывоопасность). Удобным источником ацетилена является карбид кальция, однако процесс гидролиза карбида кальция и целевая реакция должны быть разделены в пространстве особенно в случае металл-катализируемых реакций. В настоящей работе разработаны устройства для проведения синтезов на основе ацетилена, которые были изготовлены с помощью 3D-печати методом послойного наплавления [2-4]. Была показана применимость данных устройств на примере синтеза серазамещенных этенов и бутадиенов-1,3 по реакциям присоединения тиофенола и органических дисульфидов к ацетилену.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Научной Школы НШ-5199.2022.1.3.

Список литературы

- [1] Gordeev E.G., Ananikov V.P. *Russ. Chem. Rev.*, **2020**, 89, 1507-1561
- [2] Erokhin K.S., Gordeev E.G., Samoylenko D.E., Rodygin K.S., Ananikov V.P. *Int. J. Mol. Sci.*, **2021**, 22(18), 9919.
- [3] Rodygin K.S., Lotsman K.A., Erokhin K.S., Korabelnikova V.A., Ananikov V.P. *Int. J. Mol. Sci.* **2022**, 23(5), 2763.
- [4] Erokhin K.S., Ananikov V.P. *Org. Process Res. Dev.* **2023**, 27(6), 1144–1153.

Применение алгоритмов молекулярного моделирования для изучения свойств конъюгатов мезо-арипорфиринов с нацеливающим лигандом как потенциальных противоопухолевых фотодинамических агентов

Н.С. Захаров, Ю.С. Бортневская, Н.А. Ширяев, Н.А. Брагина, К.А. Жданова

МИРЭА – Российский технологический университет, 119571 Москва, пр. Вернадского, 86с8

E-mail: nikita_zakharov_0_0@mail.ru

На сегодняшний день онкологические заболевания являются одной из главных проблем человечества. Фотодинамическая терапия – перспективное направление борьбы с данной патологией. Применение таргетных фотосенсибилизаторов (ФС) позволяет обеспечить высокую селективность и снижение побочных эффектов. Протеинкиназы, такие как EGFRs, являются важнейшими мишенями в терапии онкологических заболеваний вследствие их определяющей роли в онкогенезе. Гиперактивация передачи сигналов EGFR опосредует внутриклеточное антиапоптотическое действие, что делает жизнеспособность клеток EGFR-зависимой.

В данной работе были разработаны подходы к синтезу ФС на основе катионного мезо-арилпорфирина, содержащего в своей структуре ингибитор тирозинкиназы – Эрлотиниб® в качестве нацеливающего лиганда, а также соединения сравнения [1].

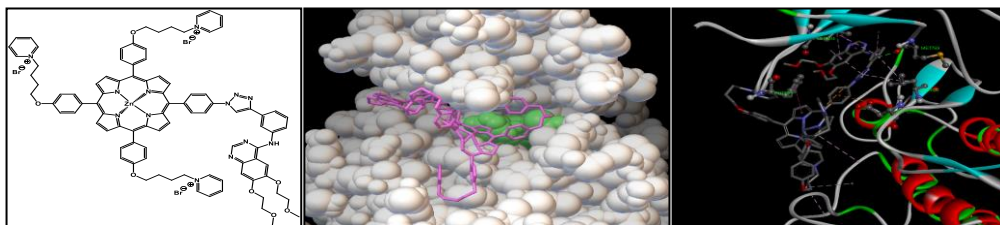


Рис. 1. Структура и модель связывания целевого конъюгата с белком EGFR.

При проведении молекулярного моделирования целевой конъюгат показал более высокую энергию взаимодействия с активным сайтом АТФ-связывающего кармана EGFR, по сравнению с соединением сравнения, не содержащим в своей структуре Эрлотиниб® (рис.1), что теоретически доказывает сохранение свойств обратимых ингибиторов Типа I. Данные МТТ-теста подтверждают расчеты компьютерного моделирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №22-73-10176).

Список литературы

[1] Bortnevskaia Y. S. et al., *Pharmaceutics*. 2023, 4, 15.

Органокаталитическая нуклеофильная активация винилирующих агентов – DFT-исследование

М.К. Ильющенко^{1,2}, Р.Ф. Саликов², В.А. Чалый², М.Г. Медведев²

¹Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

²Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского, 119991 Москва, Ленинский просп. 47

E-mail: motissyat@gmail.com

Одна из главных особенностей органокаталитического нуклеофильного катализа заключается в его способности проводить ранее невозможные реакции, как например триэтилсилилирование третичных спиртов. Тем не менее, среди всех вариантов катализируемых реакций подавляющее большинство составляют реакции ацилирования (Рис. 1А). В то же время известно, что субстраты-акцепторы Михаэля с уходящей группой обладают схожей реакционной способностью с ацилирующими агентами, что позволяет рассматривать их в качестве субстратов для них аналогичных каталитических процессов.

В рамках данного проекта было проведено квантовохимическое исследование (PBE0/def2-TZVP/D3BJ/CPCM(MeCN)) каталитической активности известных нуклеофильных катализаторов в реакциях нитрирования и Дильс-Альдера (Рис. 1В). Выбранные реакции так или иначе страдают от низкой скорости целевой реакции. Наилучшими каталитическими характеристиками обладают представители ряда гетероциклических N-оксидов (Рис. 1С), катализ которыми в обоих случаях приводит к значительному уменьшению энергий активации соответствующих реакций.

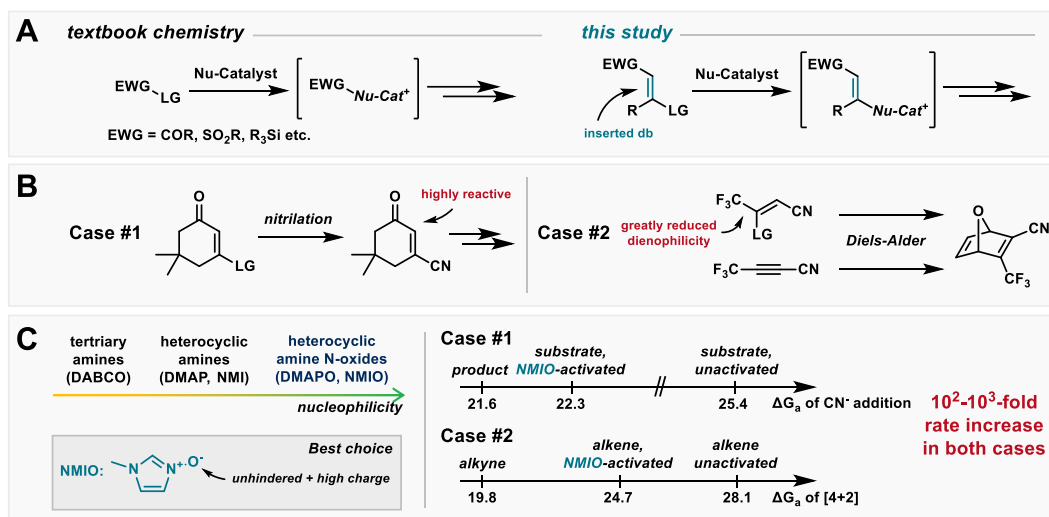


Рис. 1. Исследование нуклеофильного катализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант 23-73-10181).

Классификация синих шариковых ручек для определения возможного факта фальсификации документа

А.А. Кечин, А.В. Кравченко, Л.А. Карцова

*Санкт-Петербургский государственный университет,
Институт химии, 198504 Санкт-Петербург, Университетский пр., 26*

E-mail: kechin.ars@icloud.com

Одной из важных проблем, решаемых в криминалистике, является определение подлинности документа. Для этого могут быть использованы два подхода. В первом случае проводится качественный и количественный анализ составов чернил, взятых из разных частей исследуемого бумажного документа, а сравнение результатов позволяет сделать заключение о наличии или отсутствии подделки текста. Во втором случае основной целью является определение срока давности или последовательности нанесения текста. Для данных задач необходимо применять методы, способные обеспечивать высокую точность и воспроизводимость результатов. Перспективным представляется использование для этих целей высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ), позволяющей анализировать красители, входящие в состав матрицы чернил [1].

Для реализации модели, способной предсказывать подлинность исследуемого документа, были проведены эксперименты по анализу 16 шариковых ручек с целью их классификации на кластеры, имеющие схожие красящие составы. Также был осуществлен эксперимент по искусственному старению чернил (в результате действия УФ излучения) с получением характеристических профилей и построением дендограмм, отражающих изменение классификации шариковых ручек под действием света в течение определенного времени.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 22-23-00577 с использованием оборудования Ресурсного центра «Методы анализа состава вещества» Научного парка СПбГУ.

Список литературы

[1] Ashwini Kher, Mary Mulholland, Elinore Green, Brian Reedy, *Vib. Spectrosc.* **2006**, 40 (2), 270-277.

Исследование особенностей модифицирования цеолита ZSM-5 соединениями фосфора с использованием методов математического моделирования

В.А. Ковеза, О.В. Потапенко, А.С. Юртаева

*Центр новых химических технологий ИК СО РАН, Институт катализа СО РАН, 644040
Омск, ул. Нефтезаводская, 54*

E-mail: kovezavlad@ihcp.ru

Катализаторы на основе цеолита ZSM-5 широко применяются в процессах превращения спиртов в легкие олефины и ароматические углеводороды. Однако, главным недостатком данных катализаторов является низкая селективность и широкий набор получаемых побочных продуктов, что как следствие приводит к снижению выхода целевого продукта.

Основными активными центрами в процессе превращения спиртов являются брэнстедовские кислотные центры, образованные мостиковыми ОН группами, расположение которых зависит от распределения алюминия внутри поры цеолита, при этом ближайшее окружение алюминия влияет на стабильность и структуру активного центра. Также ближайшее окружение алюминия определяет структуру получаемого активного центра после модификации другим соединениями или ионами металлов.

Ближайшее окружение и распределение алюминия внутри поры можно регулировать при синтезе: соотношением Si/Al, используемым структурообразующим компонентом, или источником кремния и алюминия. Также распределение алюминия внутри поры возможно изменять после синтеза, используя модификаторы или различные методы обработки. Все эти способы направлены на то, чтобы изменить распределение доступных активных центров внутри поры цеолита.

Одними из модификаторов цеолита ZSM-5 могут являться соединения фосфора, которые вводят в цеолит ZSM-5 после синтеза чтобы увеличить выход олефинов и стабильность в процессах превращения спиртов.

В данной работе описан подход для оценки возможного распределения алюминия внутри поры цеолита и структуры наиболее вероятных активных центров. Результаты данного подхода применены для оценки влияния соединений фосфора на распределение и структуру активных центров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект АААА-А21-121011890075-1).

Автоматизированное исследование пространства реакций циклоприсоединения ацетилена

Н.И. Коломоец^{1,2}, Д.А. Бойко¹, К.С. Козлов¹, Л.В. Ромашов¹, В.П. Анаников^{1,2}

¹Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского, Ленинский пр-т., 47, Москва, 119991

²Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
Химический факультет, ул. Колмогорова, 1, стр.3, Москва, 119234

E-mail: nikolomoets@gmail.com

Открывая новые реакции, химики могут синтезировать важные соединения за меньшее число стадий и с большей эффективностью, делая их более доступными для широкого круга отраслей. Несмотря на значительные успехи органической химии последних лет, разработка новых молекул неизбежно ограничивается современным уровнем синтеза, что резко повышает важность поиска новых синтетических подходов.

В связи с этим нами было написано программное обеспечение, которое генерировало возможные реакции циклоприсоединения между ацетиленом и соединениями из базы данных QM9. Далее программа производила разбиение реакций на четыре класса, в зависимости от значений их термодинамических характеристик (энергии Гиббса реакции). Затем строилось векторное представление полученных реакций, это было сделано для более детализированной оценки этих реакций (Рис. 1).

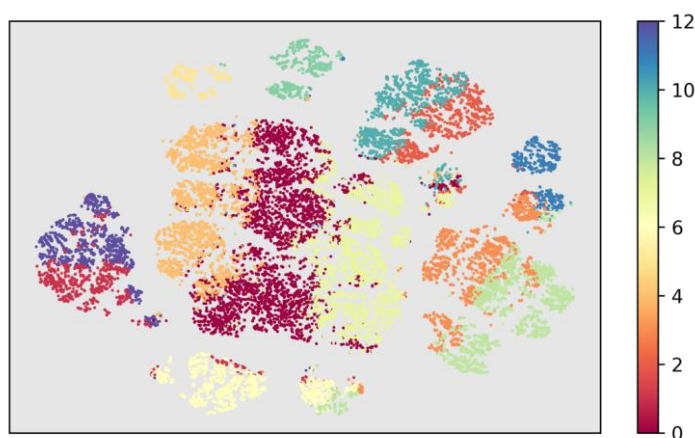


Рис. 1. Визуализация векторного пространства полученных реакций.

С помощью экспертного мнения было отобрано 10 реакций (0.03% от общего числа) для подтверждения экспериментом. В ходе которых были получены условия протекания реакции (Рис. 2), приводящей к количественному выходу продукта.

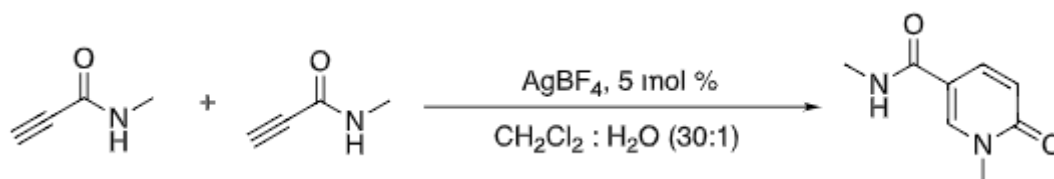


Рис. 2. Реакция циклоприсоединения N-метилпропиолята, сгенерированная программным обеспечением и подтвержденная экспериментом.

Новые подходы к синтезу полимеров на основе фуранов

Д.А. Колыхалов¹, Д.С. Гуров¹, Б.Я. Карлинский^{1,2}, В.П. Анаников²

¹Тульский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, 92

²Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: laften_71rus@mail.ru

Перспективным является полимеризация с помощью медь катализируемого азид-алкинового циклоприсоединения. Другим методом является метатезисная полимеризация с раскрытием цикла (ROMP) которая является интересным альтернативным процессом (рис 1.C), который может производить высокомолекулярные и ненасыщенные полимеры из циклического олефина, тогда как виниловая полимеризация (рис 1.D), может производить длинные насыщенные полимеры.

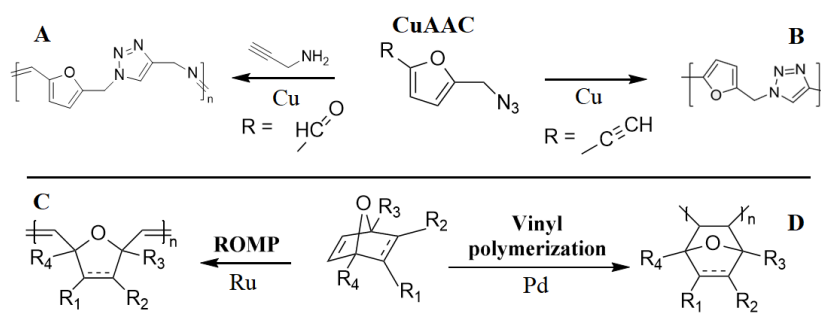


Рис. 1. Подходы

В работе, исследован случай, когда мономер содержащий карбонильный и аминный фрагмент поликонденсируется *in situ* (рис.1 A).

Таблица 1. Сравнительные результаты.

Кат.	Без растворителя	DMF	Толуол	MeCN	MeOH/H ₂ O
CuI	Быстрое осмоление	90% выход (желтый порошок)	Полимеризация не прошла	40% выход (желтый порошок)	60% выход (белый порошок)

Для образца, полученного в DMF (рис 1.A) была получена TG-DSC. 5% массы был потерян при температуре 267,4°C и 10% при 300,8°C. Показаны два перегиба на DSC. Первый с энтальпией 16,28 J/g, пиковое значение 269,9°C, начальная точка 250°C и конечная 252,4°C. Второй с энтальпией 35,26 J/g, пиковое значение 325°C, начальная точка 301°C и конечная 340,7°C. Эти пики могут соответствовать кристаллизации, окислению или разрушению.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме "Направленная модификация и исследование стабильности производных фуранов - ценных продуктов конверсии возобновляемой растительной биомассы" (FEWG-2022-0001).

Экспертная система для интерпретации ИК спектров на основе свёрточной нейронной сети с мультиклассовой классификацией

Д.С. Кошелев

Факультет наук о материалах, Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, 119234 Москва, Ленинские горы 1

E-mail: dan_kosh@mail.ru

Инфракрасная спектроскопия с преобразованием Фурье (FTIR) - широко распространенный спектроскопический метод рутинного анализа веществ и соединений. Спектральная интерпретация спектров это трудозатратный процесс, дающий важную информацию о функциональных группах или связях, присутствующих в соединениях и в сложных веществах. В данной работе на основе методов глубокого обучения (DL) свёрточных нейронных сетей (CNN) были разработаны модели для определения наличия 17 классов функциональных групп или 72 классов колебаний связей в ИК спектрах. С помощью веб-сканирования были получены спектры 14361 ИК спектров органических молекул в спектральной базе данных NIST. Протестированы 7 различных вариантов архитектур моделей с различными размерами карт признаков. На основе методов Shar и GradCam разработаны инструменты визуализации и выделения областей проявления полос поглощения соответствующих функциональных групп или связей в спектре. Для определения 17 и 72 классов взвешенная по классам f1 метрика достигла 93% и 88%, соответственно, при использовании в качестве дополнительного исходного слоя данных о положении максимумов поглощения в спектре. Полученная модель может быть использована для облегчения рутинного анализа спектров учёными органиками, материаловедами и биологами, а также для облегчения подготовки полученных экспериментальных данных к публикации.

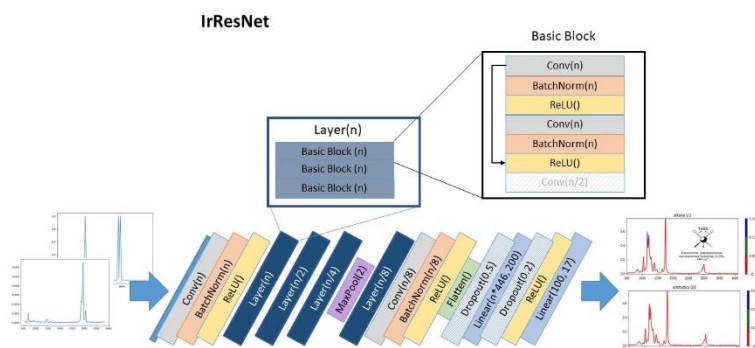


Рис. 1. Архитектура нейронной сети для интерпретации FTIR спектров.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда «Интеллект».

Генеративный дизайн аптамерных последовательностей с заранее заданной аффинностью и селективностью к малым молекулам

З.С. Красовская, М.А. Еремеева, Н.С. Серов, В.В. Виноградов, Х.К. Патра

Университет ИТМО, 191002 Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, 9

E-mail: krasovskaya@scamt-itmo.ru

Разработка аптамеров – коротких последовательностей ДНК или РНК – с высокой аффинностью и селективностью к молекулярным мишеням имеет ключевое значение в современной биотехнологии и медицине. Эта область привлекла внимание как многообещающая альтернатива традиционным биомолекулярным агентам, таким как моноклональные антитела, благодаря эффективности разработки, производства, стабильности и более широкому спектру мишеней. Однако современные методы, включая экспериментальный метод SELEX, затратны во времени и труде, что ограничивает использование аптамеров в разработке point-of-care диагностических систем.

Для решения этой задачи была поставлена цель - разработать интерпретируемую генеративную нейронную сеть, прогнозирующую аптамерные последовательности на основе физико-химических и структурных свойств молекулярных мишеней. С использованием обширной базы данных и параметров, описывающих аптамеры и молекулярные структуры, модель будет генерировать последовательности с заранее заданной аффинностью и селективностью. Она также обеспечит быстрый частотный анализ нуклеотидов, позволяя формулировать общие гипотезы о механизмах связывания аптамеров с конкретными молекулярными структурами.

В ходе проекта, в сотрудничестве с экспериментаторами, создающими аптамеры для связывания с молекулярными и белковыми мишенями, и с применением автоматической экстракции данных из открытых источников, формируется уникальная база данных "аптамер-мишень". В ней содержится информация о структуре аптамеров, их химических модификациях, структуре молекулярных мишеней, аффинности аптамеров (K_d , пределы обнаружения и т.д.), а также условиях проведения экспериментов (температура, pH, состав буферных растворов и т.д.).

Создается общедоступный веб-ресурс для ученых-экспериментаторов, объединяющий модели и инструменты для удобства работы в области аптамеров. Развитие потенциала аптамеров в исследованиях будет способствовать прогрессу в персонализированной медицине, диагностике, терапии и биотехнологических приложениях.

Работа выполнена при финансовой поддержке НИРМА ИТМО.

Гибридный нанокompозитный материал для создания универсального глюкозного датчика, применяемого в химической промышленности, биотехнологии и медицине

Л.С. Кузнецова, К.Д. Иванова, В.А. Арляпов

Тульский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, 92

E-mail: l.s.latunina@gmail.com

Универсальные датчики для определения уровня глюкозы имеют большую значимость благодаря способности предоставлять в реальном времени информацию о содержании глюкозы. В медицине такие датчики позволят пациентам с диабетом быстро реагировать на изменения уровня сахара в крови, принимать необходимые меры для управления заболеванием и предотвращения осложнений. В биотехнологическом/пищевом производстве могут обеспечить контроль производственных процессов, идентифицировать продукты с нежелательным содержанием глюкозы, а также обеспечить подлинные данные о пищевой ценности для потребителей. В сфере химической промышленности, например, при конверсии биомассы обеспечат контроль в процессах биохимического преобразования биомассы. Таким образом, подобные датчики обладают потенциалом значительно улучшить уровень заботы о здоровье и обеспечить более высокое качество продукции и протекания химических и биотехнологических процессов.

В данном исследовании для формирования универсального глюкозного датчика предложен новый нанокompозитный материал на основе кремнийорганической матрицы, ковалентно связанной с медиаторами феназинового ряда, содержащий углеродные нанотрубки. Данный метод позволяет получить материал для модификации электродной поверхности, сочетающий в себе несколько преимуществ: он пригоден для иммобилизации ферментов, обладает биосовместимостью и нетоксичностью, способен к переносу электронов, механически прочен, не склонен к набуханию [1]. В работе исследованы электрохимические характеристики данного материала, изучена его структура методами инфракрасной, ЯМР-спектроскопии, сканирующей электронной и лазерной конфокальной сканирующей микроскопии. Показана его применимость при мониторинге уровня глюкозы в медицине, а также при мониторинге биотехнологических и химических процессов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме "Синтез таргетных биологически активных ионных соединений и новых биокompозитных материалов" (FEWG-2021-0011).

Список литературы

[1] K. Deshmukh et al., *RSC Advances*, **2020**, 10(56), 33782-33835.

Выбор параметров печати для нержавеющей стали марки 316L используя МОВО алгоритм

Т. Чепига, П.А. Жилиев, А.А. Рябов, А.П. Симонов, О.Н. Дубинин, Д. Фирсов,
Ю.О. Кузьмина, С.А. Евлашин

Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бульвар, 30с1

E-mail: y.kuzminova@skoltech.ru

Аддитивное производство – это современная технология изготовления деталей сложной геометрии. Однако, выбор параметров печати – трудоемкий и дорогостоящий процесс. Использование машинного обучения позволяет сократить время и ресурсы на поиски требуемых условий печати [1]. В этом исследовании была исследована оптимизация параметров процесса лазерной сварки порошкового слоя нержавеющей стали 316L. По результатам ранних работ были выбраны изменяемые параметры печати, дающие вклад в свойства материала, такие как мощность лазера, скорость сканирования, расстояние штриховки и т. д. [2,3]. Используя Multi-Objective Bayesian Optimization (МОВО) алгоритм, были выявлены наиболее перспективные значения рассматриваемых параметров, дающие заданную твердость и пористость. Суррогатная модель гауссовского процесса была построена на 57 точках эмпирических данных, и благодаря эффективной выборке в пространстве проектирования три точки на фронте Парето были получены за шесть итераций (Рис. 1). Предложенная методология значительно сокращает количество экспериментов, тем самым экономя время и ресурсы. Предложенные моделью параметры процесса были экспериментально верифицированы.

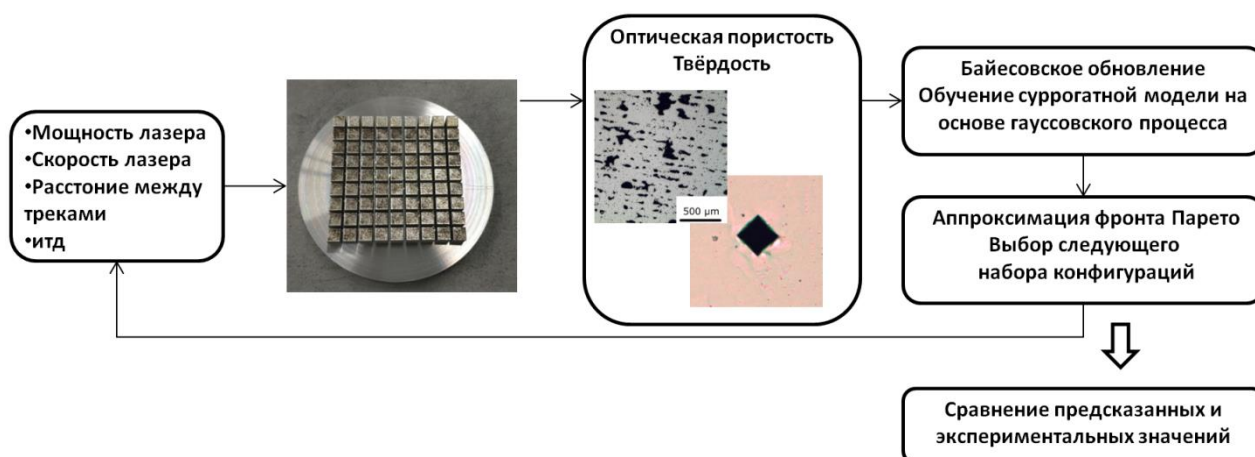


Рис. 1. Схема использованного цикла оптимизации параметров печати.

Список литературы

- [1] G. Tapia, *et al.*, *Addit. Manuf.* **2016**, 12, 282–290.
- [2] Y.O. Kuzminova *et al.*, *Letters on Materials*, **2019**, 9, 551–555.
- [3] K. Guan, *et al.*, *Mater. Des.* **2013**, 50, 581–586.

Графовые нейронные сети и XANES спектроскопия для исследования структуры центров меди в Cu-MOR

К.Д. Кулаев, Г.Б. Сухарина, Я.Н. Гладченко-Джевеликс, А.М. Ермакова, Е.Е. Поносова, Э.И. Шеметова, В.В. Прядченко, Л.А. Авакян, Л.А. Бугаев

*Южный федеральный университет, 344006 Ростов-на-Дону,
ул. Большая Садовая ул., 105/42*

E-mail: kulaev@sfedu.ru

Графовые нейронные сети могут быть перспективным инструментом в задачах прогнозирования структуры материалов, в частности центров меди в Cu-MOR по экспериментальным Cu K-XANES спектрам. Определение структуры центров меди является нетривиальной задачей ввиду того, что распределение сформированных медных центров в разных неэквивалентных частях каркаса цеолита является неравномерным [1].

На первом этапе предложенного в работе подхода методом Монте-Карло генерируются структуры центров меди в каркасе цеолита путем вставки группировок Cu^{2+} , $[\text{Cu-O-Cu}]^{2+}$ в каркас цеолита с учетом Ван-Дер-Ваальсовых радиусов атомов. Затем выполняется геометрическая оптимизация методом силовых полей, описанном в работе [2]. Сгенерированные медные центры оцениваются нейростью MEGNet, обученной на наборе данных, содержащем более 2100 структур центров меди и соответствующих им Cu K-XANES спектров, рассчитанных в пакете FDMNES [3], в котором уравнение Шредингера решается на дискретной сетке методом конечных разностей. Далее происходит суммирование оцененных спектров при помощи линейной регрессии (с положительными коэффициентами) с целью подгонки рассчитанных спектров под экспериментальный.

Ускоренные методы, лежащие в основе этого алгоритма, позволяют упростить и автоматизировать процесс определения структуры центров меди в материале Cu-MOR.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№ 23-22-00438).

Список литературы

- [1] Srabionyan, V. V., Sukharina, G. B., Kurzina, T. I., Durymanov, V. A., Ermakova, A. M., Avakyan, L. A., Bugaev, L. A. *The Journal of Physical Chemistry C*, **2021**, 125(46), 25867-25878.
- [2] Psfogiannakis, G. M., McCleerey, J. F., Jaramillo, E., & Van Duin, A. C. (2015). *Journal of Physical Chemistry C*, **2015**, 119(12), 6678-6686.
- [3] Joly, Y. *Physical Review B*, **2021**, 63(12), 125120.

Автокаталитическая внутримолекулярная C-X(X = Cl, Br, I)/C-H активация и циклизация 5,6-диарил-1H-пирроло[3,4-d]пиримидин-2,4-дионов при облучении видимым светом

И.В. Лаврентьев, А.В. Астахов, М.А. Шевченко, Ю.Н. Ткаченко, Д.В. Пасюков, В.В. Кутырев, В.М. Чернышев

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им.
М.И. Платова, 346428 Новочеркасск, ул. Просвещения, 132

E-mail: lavr19981112@gmail.com

Производные пирроло[1,2-*f*]фенантридина обладают широким спектром биологической активности и представляют интерес в качестве оптически активных материалов [1-3]. Ранее был описан единственный метод синтеза пиримидо[5',4':3,4]пирроло[1,2-*e*]фенантридин-12,14(11*H*,13*H*)-дионов (**1**) путем циклизации 5,6-диарил-1H-пирроло[3,4-*d*]пиримидин-2,4-дионов (**2**), содержащих атом галогена в *орто*-положении одного из арильных ядер, в условиях катализа комплексами Pd/NHC [3].

В докладе обсуждается новый метод синтеза соединений **1** на основе обнаруженной нами автокаталитической фотоциклизации соединений **2** под действием видимого света, протекающей с активацией связей C-X(X = Cl, Br, I)/C-H (Рис.1). Установлено, что обнаруженная реакция катализируется продуктами циклизации, соединениями **1**, которые выступают в роли фотокатализаторов. В докладе обсуждаются предполагаемый механизм реакции и потенциальные возможности применения соединений **1** в качестве фотокатализаторов реакций арилгалогенидов.



Рис. 1. Синтез пиримидо[5',4':3,4]пирроло[1,2-*e*]фенантридин-12,14(11*H*,13*H*)-дионов (**6**).

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 075-03-2021-016/4).

Список литературы

- [1] A.S. Patel, V. Jain, V.N. Rao, Y.W. Lin, A. Shah, K.C. Lai, T.L. Su and T.C. Lee, *Eur. J. Med. Chem.* **2020**, *202*, 112516.
- [2] G. Hong, X. Gan, C. Leonhardt, Z. Zhang, J. Seibert, J.M. Busch and S. Bräse, *Adv. Mater.* **2021**, *33*, 2005630.
- [3] M.A. Shevchenko, Y.N. Tkachenko, A.V. Astakhov, O.V. Khazipov, R.V. Tyurin, D.V. Pasyukov, V.A. Tafeenko, O.A. Kravchenko and V.M. Chernyshev, *Russ. Chem. Bull.* **2018**, *67*, 1684.

Синтез гибридного антисептического биокompозита с использованием кремнийорганической матрицы и октенидина дигидрохлорида

Е.А. Ланцова¹, А.С. Ходырева¹, Е.А. Саверина^{1,2}

¹Тульский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, 92

²Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: e.a.lantsova@tsu.tula.ru

Одной из мировых проблем современности является проблема растущей резистентности микроорганизмов к антибактериальным средствам [1]. Традиционный способ борьбы с клетками микроорганизмов заключается в использовании жидких форм антисептиков, что не всегда является эффективным методом [2]. Решением проблем может стать создание гибридного антисептического композита, с поверхности которого высвобождается эффективный антисептик, например, октенидин (ОКТ).

Были сформированы матрицы с использованием метилтриэтоксисилана и тетраэтоксисилана 85/15 и отожжены в диапазоне температур от 200 до 1200 °С. Методом УФ-спектрометрии определено высвобождение октенидина при возвращении аликвоты в раствор.

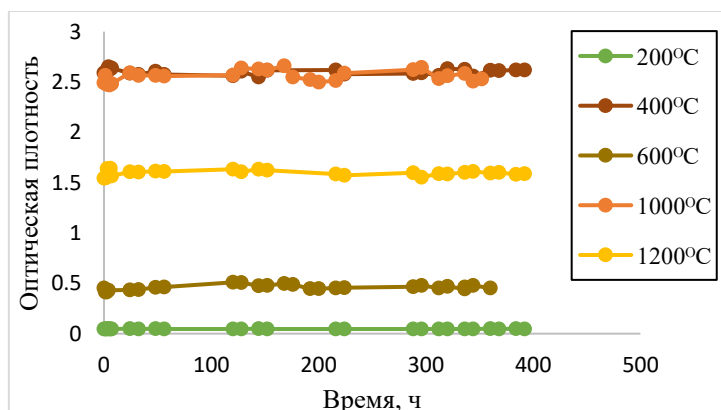


Рис. 1. Высвобождение октенидина из золь-гель материала.

Активное высвобождение ОКТ наблюдается в течение эксперимента. С помощью градуировочной прямой посчитано, что за это время высвобождается около 13% препарата у матрицы с температурой отжига 200°C, 12% - 400°C, 13% - 600°C, 11% - 1000°C и 8,8% - 1200°C.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме «Синтез целевых биологически активных ионных соединений и новых биокompозитных материалов» (FEWG-2021-0011).

Список литературы

[1] Matamoros-Recio A. et al. *ACS omega*. **2021**, 6, 6041-6054.

[2] Larsson, D. G. J.; Flach, C.-F. *Nat. Rev. Microbiol.* **2022**, 20, 257–269.

Новые материалы для использования в нейроморфных системах

Д.В. Мануковская, Г.Б. Куншина, И.В. Бочарова

ИХТРЭМС КНЦ РАН, 184209 Анатимы, Академгородок, 26а

E-mail: d.manukovskaia@ksc.ru

Одним из подходов к развитию нейроморфных вычислений может служить реализация синаптических функций с помощью устройств ионики твердого тела [1]. Хотя процесс нейроморфных вычислений на данный момент остается до конца неясным, уже сейчас имеет смысл разрабатывать устройства, пригодные для таких вычислений, а также синтезировать новые материалы, которые будут использоваться в этих устройствах. Вычисления на нейроморфных элементах могут привести к принципиально новым методам машинного обучения, подобным человеческому мышлению, и даже созданию искусственного интеллекта (ИИ). Так в недавнем исследовании [2] был реализован синаптический транзистор In-Ga-Zn-O (IGZO) на основе литий-ионного материала $\text{Li}_{1-x}\text{Al}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ для эффективной имитации механизма хранения и обработки данных в мозге с низким энергопотреблением. Синаптические транзисторы IGZO со слоем $\text{Li}_{1-x}\text{Al}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ демонстрировали большое окно гистерезиса и стабильность. В настоящее время в ИХТРЭМС ФИЦ КНЦ РАН разработаны эффективные способы синтеза неорганических твердых электролитов различных структурных типов с высокой Li-ионной проводимостью [3-5]. Это материалы со структурой NASICON состава $\text{Li}_{1+x}\text{Al}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ (LATP) и $\text{Li}_{1+x}\text{Al}_x\text{Ge}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ (LAGP), со структурой перовскита $\text{Li}_{3x}\text{La}_{2/3-x}\text{TiO}_3$ (LLT) и со структурой граната $\text{Li}_{7-3x}\text{Al}_x\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ (LLZ). Для снижения сопротивления слоя сепаратора твердого электролита в полностью твердотельных аккумуляторах нового поколения требуются ультратонкие пленки, которые можно получить современными методами: погружения подложки, ленточного литья, аэрозольного напыления, радиочастотного магнетронного распыления. Принципиальная возможность получения пленок методом погружения сапфировой подложки в водно-пероксидный раствор прекурсора LATP с глицерином в качестве пленкообразователя показана в работе [6]. Метод радиочастотного магнетронного распыления имеет преимущества: высокая скорость напыления, простота процесса и высокое качество пленок. В работе приводятся результаты формирования керамических мишеней для распыления LATP и LLZ стехиометрического состава методом холодного прессования с последующим высокотемпературным спеканием и методом искрового плазменного спекания из порошков твердых электролитов.

Список литературы

- [1] А.К. Иванов-Шиц, *Электрохимия*. **2023**, 59, 4-15.
- [2] J.-M. Park, H. Hwang, M.S. Song, S.C. Jang, J.H. Kim, H. Kim and H.-S. Kim. *ACS Appl. Mater. Interfaces*. **2023**, 15, 47229-47237.
- [3] Пат. 2493638 РФ, опубл. 20.09.13, Бюл. № 26.
- [4] Пат. 2583762 РФ, опубл. 10.05.16, Бюл. № 13
- [5] Пат. 2682325 РФ, опубл. 19.03.19, Бюл. № 8.
- [6] Г.Б. Куншина, О.Г. Громов, Э.П. Локшин, В.Т. Калинин, Неорг. *Материалы*. **2013**, 49, 59-64.

Атомистическое компьютерное моделирование диэлектрических свойств термопластичных полиимидов, ориентированных приложением одноосного растяжения

В.М. Назарычев

*Институт высокомолекулярных соединений РАН, 199004 Санкт-Петербург,
Большой пр. В.О., 31*

E-mail: nazarychev@imc.macro.ru

Создание новых термоинтерфейсных материалов (ТИМ), способных эффективно осуществлять отвод тепла от источника нагрева в электронных устройствах на основе термопластичных полиимидов (ПИ) без ухудшения их диэлектрических свойств, является одной из важных задач материаловедения. К сожалению, обладая одними из лучших эксплуатационных характеристик, ПИ имеют достаточно небольшое значение коэффициента теплопроводности κ , которое не превышает ~ 0.5 Вт/(м·К) [1]. Ранее в выполненной нами работе [2] было показано, что приложение одноосного растяжения может быть использовано для повышения среднего значения κ и создания анизотропии теплопроводящих свойств ПИ.

В данной работе методами атомистического компьютерного моделирования исследованы диэлектрические свойства трёх термопластичных ПИ: аморфного – ULTEMTM и двух частично-кристаллических ВРДА-РЗ и Р-ОДФО, ориентированных с помощью приложения одноосного растяжения. Изучено влияние упорядочения на изменение подвижности суммарного дипольного момента ПИ, определены времена локальной подвижности суммарного дипольного момента τ и частотные зависимости функции диэлектрических потерь $\varepsilon''(\omega)$.

Обнаружено, что упорядочение термопластичных ПИ приводит к увеличению значений суммарного дипольного момента как аморфных, так и частично-кристаллических ПИ, при этом слабо сказываясь на значении относительной диэлектрической проницаемости ε . Показано, что упорядочение полимерных цепей ПИ, вызванное приложением механического растяжения, увеличивает среднее время вращательной релаксации и приводит к смещению максимума функции $\varepsilon''(\omega)$ в область более низких частот по сравнению с частотными зависимостями функции $\varepsilon''(\omega)$ у неориентированных образцов исследуемых ПИ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (Соглашение № 22-73-00288, <https://rscf.ru/project/22-73-00288/>)

Список литературы

- [1] J. Chen, X. Chen, F. Meng, D. Li, X. Tian, Z. Wang, Z. Zhou *High Perform. Polym.*, **2016**, 29, 585.
- [2] V. M. Nazarychev, S. V. Lyulin *Polymers*, **2023**, 15, 2926.

Новые белковые дескрипторы

Е.В. Нам, Н.С. Серов, В.В. Виноградов*

Университет ИТМО, Центр Химии и Искусственного Интеллекта, 191002 Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, 9

**E-mail: vinogradov@scamt-itmo.ru*

Ферменты катализируют большинство реакций в клетках с огромной производительностью и избирательностью. Их эффективность привела к формированию отдельных областей, сосредоточенных на применении ферментов в самых разных биотехнологических процессах [1]. Несмотря на успешность перепрофилирования существующих ферментов под отдельные биотехнологические задачи, создание принципиально новых ферментов с заранее заданными активностями остается недостижимой мечтой.

Искусственный интеллект уже показал свою эффективность в ряде областей, например, в органической химии, где методы машинного обучения уже позволяют прогнозировать продукты органических химических реакций. Это обусловлено в первую очередь существованием молекулярных дескрипторов. На данный момент существуют предсказательные и генеративные модели, применяющиеся в области исследований новых белковых препаратов, в том числе и ферментов [2]. Однако, отсутствие дескрипторов ферментов, отражающих не только их строение, но и химические свойства, делает невозможной разработку высокоэффективных моделей машинного и глубокого обучения.

Целью данной работы является разработка дескрипторов ферментов, несущих информацию об их структурных и химических свойствах. При этом последние во многом зависят от фолдинга – организации белковых молекул в третичную структуру. Без учета данного явления невозможно создать точные модели машинного обучения. Фолдинг, в свою очередь, зависит от многих факторов, и одним из них является взаимодействие цепи аминокислот с ионами двухвалентных металлов, стабилизирующих формирующуюся структуру белка [1]. Таким образом, создание дескрипторов, характеризующих взаимодействие ферментов с ионами металлов, позволит лучше охарактеризовать процессы фолдинга ферментов в моделях машинного и глубокого обучения, значительно повысив их точность.

Список литературы

- [1] Héctor López-Laguna, et. al. *Trends Biochem. Sci.* **2020**, *45*, 992-1003.
- [2] J. Emonts, J.F. Buyel, *Comput. Struct. Biotechnol. J.* **2023**, *21*, 3234-3247.

Квантово-химическое моделирование последовательного алкилирования простых иодидных комплексов Pt^{II} иодалкильными производными

Д.В. Никитенко, К.Д. Кобец, Т.В. Краснякова, С.А. Митченко

Институт физико-органической химии и углехимии, 283111 Донецк, ул. Р.Люксембург, 70

E-mail: nykytenko.dv@gmail.com

Катализируемые переходными металлами реакции кросс-сочетания получили широкое распространение в органическом синтезе как универсальный инструмент формирования новых С-С связей. Ключевыми интермедиатами этих реакций являются *бис*-органильные комплексы металлов, способные распадаться с образованием продуктов С-С сочетания. Такие металлоорганические производные обычно получают путем переметаллирования или последовательного органилирования металлического центра.

В ацетоновых и водных растворах NaI нами были генерированы *бис*-органильные производные платины последовательным алкилированием простых иодидных комплексов [PtI₄]²⁻ иодалкильными производными RI (R = CH₃, CH₂C(O)CH₃, CH₂COOCH) (рис. 1).

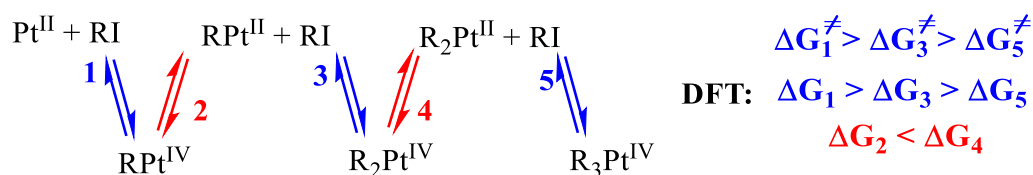


Рис. 1. Последовательное алкилирование комплексов Pt^{II} иодалкильными производными RI (R = CH₃, CH₂C(O)CH₃, CH₂COOCH).

Квантово-химическое моделирование этих реакций показало, что энергия активации ΔG окислительного присоединения RI к комплексам Pt^{II} с каждым последующим алкилированием платины снижается, а изменение свободной энергии ΔG становится все отрицательнее. Это означает, что с увеличением числа органильных лигандов в координационной сфере Pt^{II} реакции становятся кинетически благоприятнее и термодинамически выгоднее. Для реакций восстановления иодид-ионами органильных комплексов R_iPt^{IV} (i = 1, 2) до соответствующих производных R_iPt^{II} наблюдается обратная тенденция – согласно теоретической оценке восстановление *бис*-органильных комплексов платины более неблагоприятно по сравнению с восстановлением моноорганильных.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, бюджетная тема “Каталитические превращения углеводов и их производных в гомогенных и гетерогенных условиях с образованием новых связей С–С, S–O и С–элемент (FRES-2023-0005)”.

Устойчивые PEPPSI-комплексы на основе продуктов конверсии возобновляемой растительной биомассы

Е.В. Обухова¹, Б.Я. Карлинский^{1,2}, В.П. Анаников²

¹Тульский государственный университет, 300012 Тула, ул. Ф. Энгельса, 157

²Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: elena.obukhova.23@mail.ru

PEPPSI-комплексы широко применяются в гомогенном катализе [1] и являются превосходными катализаторами для реакций, направленных на образование связей С-С. Они отличаются высокой стабильностью и состоят из двух анионных лигандов (обычно Cl⁻), NHC и стабилизирующего пиридинового лиганда [2]. В отличие от многих альтернативных палладиевых катализаторов, Pd-PEPPSI комплексы устойчивы к воздействию воздуха и влаги. Помимо этого, комплексы Pd/NHC обладают сильными σ -донорными свойствами и высокой термической стабильностью [1].

Интересным направлением представляется разработка новых комплексов PEPPSI на основе продуктов конверсии возобновляемой растительной биомассы, что является перспективным решением проблем в органическом синтезе, а также для «зеленой» химии [3].

На данном этапе работы был проведен ряд модельных реакций: синтез N₁,N₂-диметилэтан-1,2-диамин ($\eta=81\%$) на основе глиоксаля в метаноле с последующей его циклизацией до соответствующей соли 1,3-bis(2,4,6-trimethylphenyl)-1H-imidazol-3-ium chloride (IMES·HCl, $\eta=67\%$). В результате сшивки IMES·HCl с хлоридом палладия (II) под действием карбонат калия был получен PEPPSI-комплекс [PdCl₂(IMes)(Py)] в виде светло-желтых кристаллов ($\eta=83\%$).

При получении PEPPSI-комплекса на основе продукта конверсии возобновляемой растительной биомассы в качестве исходного вещества был выбран фурфурол. Начальный этап являлось восстановительное аминирование фурфурола до 2-фурфуриламина ($\eta=75\%$) на основе гидроксиламмония хлорида, 37% соляной кислоты в этаноле.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме "Направленная модификация и исследование стабильности производных фуранов - ценных продуктов конверсии возобновляемой растительной биомассы" (FEWG-2022-0001).

Список литературы

- [1] Calimsiz S., Sayah M., Mallik D., Organ M. G., *Angew. Chem., Int. Ed.* **2010**, 49(11), 2014-2017.
- [2] S. Guillet, V. Voloshkin, M. Saab, M. Beli et al., *Chem comm.* **2020**, 56(44), 5953-5956.
- [3] Tong X., Ma Y., Li Y., *Appl. Catal. A: Gen.* **2010**, 385(1-2), 1-13.

Дизайн глубоких эвтектических растворителей с помощью алгоритмов искусственного интеллекта

В.С. Одегова, А.К. Лавриненко, В.В. Виноградов

Национальный исследовательский университет ИТМО, 191002 Санкт-Петербург,
ул. Ломоносова, 9

E-mail: odegova@scamt-itmo.ru

Глубокие эвтектические растворители (ГЭР) представляют собой двух- или трехкомпонентные смеси, которые имеют пониженную температуру плавления по сравнению с исходными веществами [1]. Благодаря их биodeградируемости и эффективности экстракции, сравнимой с известными органическими растворителями, они используются в различных областях химии, фармацевтики и нефтяной промышленности [1]. Однако поиск подходящих ГЭР для конкретных задач остается сложной задачей. Долгое время эмпирический подход был основным методом, но с развитием искусственного интеллекта научное сообщество получило возможность упростить и ускорить этот процесс с использованием методов машинного обучения (МО) [2].

В этом исследовании были предсказаны температура плавления, плотность и вязкость ГЭР, влияющих на состояние системы и ее технологические параметры. Мы создали базу данных с дескрипторами для двух- и трехкомпонентных ГЭР и обучили модели машинного обучения. Лучшие результаты показали модели на основе градиентных деревьев, особенно с использованием CatBoost. Мы достигли хороших значений R^2 на кросс-валидации: 0,76 для температуры плавления, 0,89 для плотности и 0,64 для вязкости.

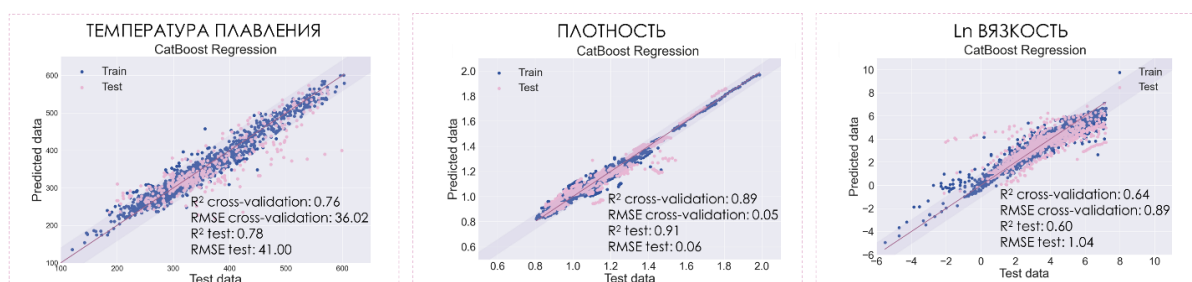


Рис.1. Лучшие метрики (R^2 и RMSE) на 5-кратной кросс-валидации “ mixtures out”

Кроме того, мы создали веб-ресурс DESignSolvents (dess.acidlab.itmo.ru), который предоставляет доступ к базе данных свойств ГЭР и соответствующим моделям прогнозирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Федеральной программы "Приоритет 2030".

Список литературы

- [1] Hansen V.B. et al. *Chem. Rev.* **2021**, *121*, 3. 1232–1285.
- [2] Abdollahzadeh, M., et al. *Sci Rep.* **2022**, *12*, 4954.

Применение улучшенных представлений химических реакций для предсказания выходов

А.А. Орлова, А.В. Дмитренко, В.В. Виноградов

Университет ИТМО, 197101 Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49, лит. А

E-mail: orlova@scamt-itmo.ru

Одним из ключевых направлений исследований в области применения машинного обучения в химии является прогнозирование выходов химических реакций. Существующие модели по предсказанию выходов зачастую сфокусированы на узких классах реакций, что ограничивает универсальность их применения [1]. В данной работе проводится сравнение различных улучшенных представлений реакций с целью повышения точности предсказания выходов для широкого диапазона органических реакций.

Эксперименты проводились с использованием общедоступной базы данных реакций USPTO, содержащей >500 тыс. реакций различных типов из патентов. Предсказание выходов осуществлялось на основе молекулярных и реакционных «отпечатков пальцев» (рис. 1). В ходе работы мы стремились улучшить данные представления, а именно мы дополнили отпечатки пальцев (FP) новыми представлениями, полученными с помощью анализа главных компонент (PCA), классической нейронной сети автоэнкодера (AE) как нелинейного эквивалента PCA и регуляризованного автоэнкодера (RegAE), предназначенного для получения представлений, содержащих скрытую информацию о выходах. Наилучшим образом себя показало представление на основе отпечатков пальцев и PCA, достигнувшее $R^2=0.26$ (табл. 1), что является лучшим результатом среди ранее опубликованных работ.

Таблица 1. Сравнение эффективности модели XGB, обученной на различных представлениях реакций.

Представление	Размерность	R^2	RMSE (%)	Время обучения (мин)
FP	8192	0.21 ± 0.00	22.55 ± 0.01	28.1
PCA	4671	0.25 ± 0.00	21.99 ± 0.01	50.7
AE	4671	0.25 ± 0.00	22.11 ± 0.01	65.5
RegAE	5120	0.24 ± 0.00	22.20 ± 0.02	52.4
FP+PCA	12863	0.26 ± 0.00	21.96 ± 0.02	70.4
FP+AE	12863	0.25 ± 0.00	22.05 ± 0.01	92.0
FP+RegAE	13312	0.25 ± 0.00	22.08 ± 0.02	79.8

Работа выполнена при финансовой поддержке Федеральной программы академического лидерства «Приоритет 2030».

Список литературы

[1] P. Schwaller, A. Vaucher, T. Laino, *Machine learning: science and technology*. **2021**, 2.1, 015016.

Исследование формирования биоплёнок на углеродных нанотрубках

Р.Н. Перчиков, Т.С. Белоусова, М.С. Челюканов

Тульский государственный университет, 300012 Тула, проспект Ленина, 92

E-mail: perchikov_roma@mail.ru

Биоплёнки некоторых микроорганизмов являются электроактивными, что даёт им способность переносить электроны через внешнюю матрицу [1]. Циклическая вольтамперометрия (ЦВА) и импедансная спектроскопия позволяют не только определить механизм переноса электронов, но и проанализировать рост электроактивной биоплёнки в течение времени [2,3]. В данной работе были рассмотрены электрохимические характеристики биоплёнок в процессе их роста на углеродных нанотрубках.

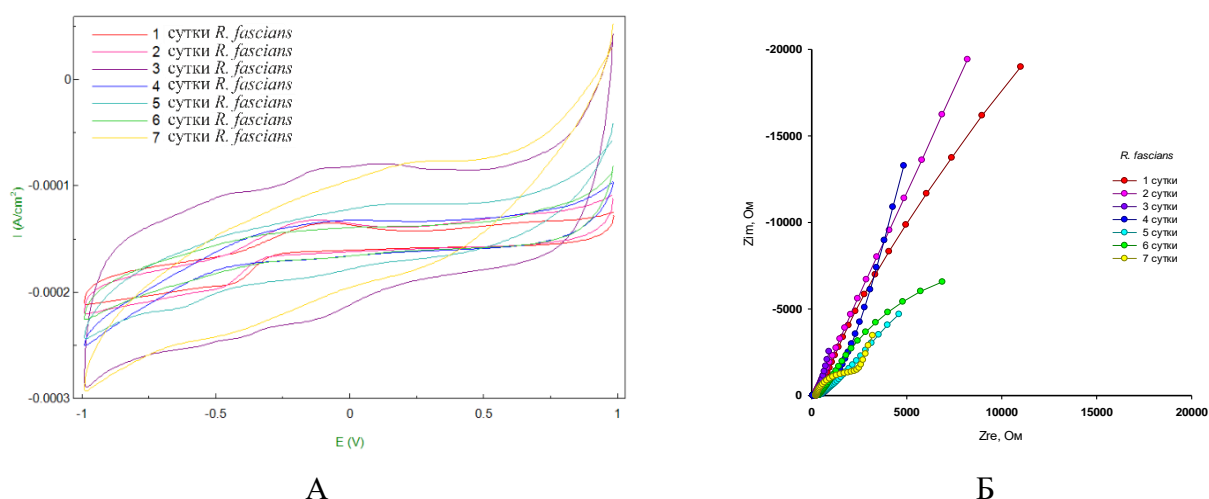


Рис. 1. Циклические вольтамперограммы (А) и диаграммы Найквиста (Б) для системы *R.fascians*-ОУНТ в течение 7 дней.

В начале роста биопленки было отмечено снижение сопротивления из-за появления эндогенных редокс-соединений в полисахаридном матриксе. Далее сопротивление увеличивается, из-за образования более плотного слоя биоплёнки, затрудняющего диффузию. К четвёртому дню сопротивление становится наибольшим, а потенциал увеличивается, из-за разрушения матрикса с неполным отсоединением от поверхности, и пик на вольтамперограмме может соответствовать цитохромам, оказывающимся в непосредственном контакте с электродом. Затем процесс формирования биоплёнки повторяется.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме "Синтез целевых биологически активных ионных соединений и новых биокompозитных материалов" (FEWG-2021-0011).

Список литературы

- [1] Kiran, R.; Patil, S.A., *ACS Publications*. **2019**, 159–186.
- [2] Harnisch, F.; Freguia, S. A, *Chem. Asian J.* **2012**, 7, 466–475.
- [3] Kretzschmar, J.; Harnisch, F., *Curr. Opin. Electrochem.* **2021**, 29, 100757.

Низкоразмерные наноматериалы для сенсорики и катализа

З.И. Попов, Е.В. Суханова

Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля, 119334 Москва, ул. Косыгина, 4

E-mail: zipcool@bk.ru

Фокус научных интересов в области низкоразмерных наноструктур все больше смещается в сторону тех двумерных материалов, синтез которых возможен только в лабораторных условиях. Это происходит из-за того, что большинство двумерных материалов, получение которых возможно из кристаллических материалов природного происхождения, имеющих слоистую структуру (графен, дихалькогениды переходных металлов и пр.) уже были подвергнуты всестороннему исследованию. Теоретические подходы предсказания и исследования новых материалов позволяют значительно сократить затраты времени на экспериментальный синтез и исследование материалов, перспективных для применения в электронике, катализе и сенсорики. Высокая площадь поверхности и вариативность химических составов двумерных наноструктур халькогенидов переходных металлов может быть использована для широкого спектра применений, особенно для различных сенсорных платформ и катализа.

В работе проведено теоретический поиск новых структур среди двумерных наноматериалов состава M-X, где M= Mo, V, W, Ru, Ti, Pt; X=S, Se, Te при помощи эволюционного алгоритма, реализованного в программном пакете USPEX [1], и их исследование при помощи квантово-механических расчетов с использованием теории функционала электронной плотности (DFT) [2,3], реализованной в программном пакете VASP. Был обнаружен ряд новых двумерных структур, среди которых можно выделить двумерную структуру V_3S_4 , которая проявляет антиферромагнитные полупроводниковые свойства с шириной запрещенной зоны 0.36 эВ. Расчет энергий адсорбции и электронных свойств показал, что V_3S_4 перспективен для использования в качестве сенсора для молекул NO_2 и NO , а также может найти применение в каталитических реакциях, в которых требуется понизить энергию диссоциации молекулы O_2 , например, в реакции восстановления кислорода.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (РЦНИ) (грант 20-53-05009 Арм_а).

Список литературы

- [1] A.R. Oganov, C.W. Glass, *J. Chem. Phys.* **2006**. 124. 244704.
- [2] P. Hohenberg, W. Kohn, *Physical Review*. **1964**.136, 864–871.
- [3] W. Kohn, L.J. Sham, *Phys. Rev.* **1965**. 140, 1133–1138.

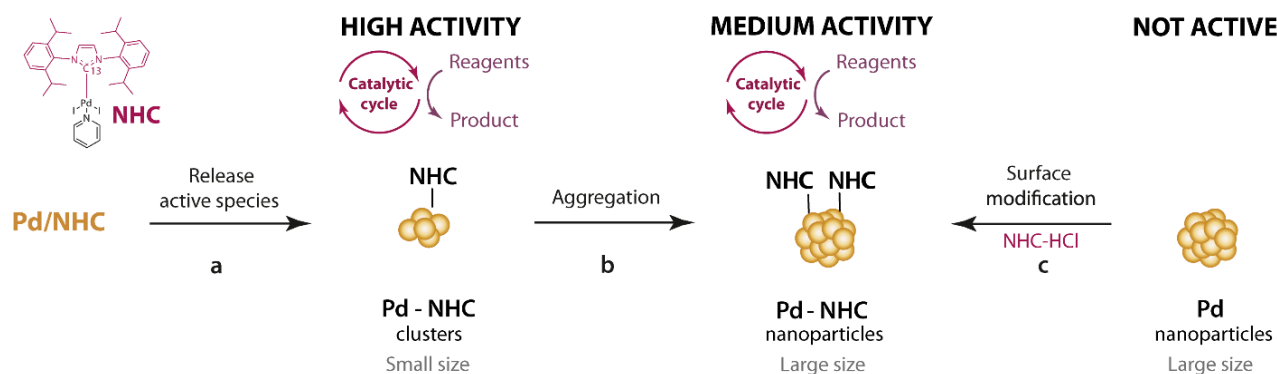
Исследование *in situ* и доказательство связывания *N*-гетероциклических карбенов с поверхностью наночастиц Pd в катализе Pd/NHC

Д.О. Прима, Н.С. Куликовская, В.П. Анаников

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: prima@ioc.ac.ru

Превращения, катализируемые переходными металлами, такими как палладий, платина, медь, никель, родий, рутений, иридий и т.д., широко используются в современном органическом синтезе для создания углеродного скелета молекул и введения в них различных гетероатомов и функциональных групп. Современные исследования в области металлокомплексного катализа показали, что металлосодержащие органические реакционные среды представляют собой сложные смеси, включающие каталитически активные частицы различной природы (так называемый "коктейль катализаторов" [1]), а также неактивные формы металла, которые могут генерировать активные участки или являются конечной точкой эволюции катализатора [2-3]. Соотношение различных форм металла в системе и их роль в конкретном каталитическом процессе определяют эффективность проводимого превращения, поэтому получение максимально широкого спектра структурной информации является актуальной задачей, решение которой не только выявит фундаментальные закономерности в поведении существующих каталитических систем, но и позволит прогнозировать свойства разрабатываемых катализаторов, что мы и показываем в этой работе.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Научной Школы НШ-5199.2022.1.3.

Список литературы

- [1] D. O. Prima, N. S. Kulikovskaya, A. S. Galushko, R. M. Mironenko, V. P. Ananikov, *Curr. Opin. Green Sustain. Chem.* **2021**, *31*, 100502.
- [2] D. O. Prima, M. Madiyeva, M. E. Minyaev, D. A. Boiko, V. P. Ananikov, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 7171–7188.
- [3] J. M. Asensio, S. Tricard, Y. Coppel, R. Andrés, B. Chaudret, E. de Jesús, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 865–869.

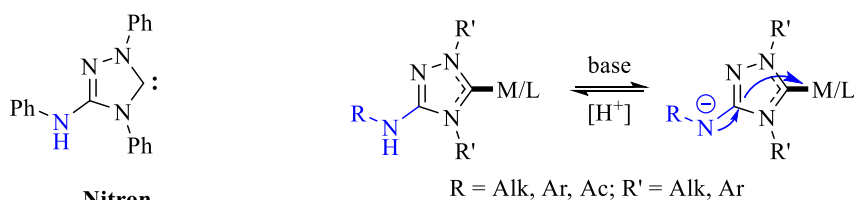
Комплексы Ni(II) с основно-ионизирующимися NHC-лигандами: синтез и каталитическая активность в реакции Сузуки-Мияура с участием арилхлоридов

А.С. Пятаченко, А.Ю. Черненко, С.Б. Солиев, В.М. Чернышев

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, 346428 Новочеркасск, ул. Просвещения, 132

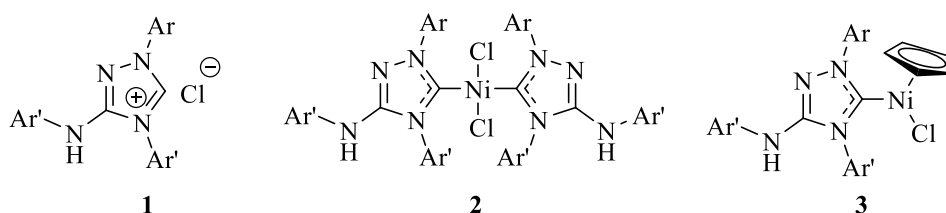
E-mail: anastasiapatacenko790@gmail.com

В последнее десятилетие большой интерес в металлокомплексном катализе вызывают N-гетероциклические карбены (NHC), несущие отрицательно заряженные группы или способные приобретать отрицательный заряд при определенных условиях. В качестве лигандов NHC, способных приобретать анионный характер за счет депротонирования NH в основной среде, можно использовать Нитрон и его производные [1].



Однако аналоги Нитрона, содержащие объемные N-арильные группы, такие как Mes (2,4,6-триметилфенил) или DiPP (2,6-диизопропилфенил), которые могут быть особенно интересны для металлокомплексного катализа, до сих пор не были описаны в литературе.

Нами разработан метод получения 1,4-диарил-3-ариламино-1,2,4-триазиолиевых солей **1** с различными N-арильными группами, включая Mes и DiPP, которые являются аналогами Нитрона и могут использоваться в качестве NHC-пролигандов. Металлированием полученных солей ацетатом никеля и никелоценом синтезированы новые комплексы Ni/NHC **2** и **3**.



Некоторые представители комплексов **2** показали высокую эффективность в катализе реакции Сузуки Мияура между арилхлоридами и арилборными кислотами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-73-00088).

Список литературы

[1] A. Y. Chernenko, A. V. Astakhov, V. V. Kutyrev, E. G. Gordeev, J. V. Burykina, M. E. Minyaev, V. N. Khrustalev, V. M. Chernyshev, V. P. Ananikov, *Inorg. Chem. Front.*, **2021**, 8, 3382.

Моделирование методом молекулярной динамики CVD синтеза графена на никелевой подложке

В.О. Рябов

Новосибирский Государственный Университет, 630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 2

E-mail: vitaliy.ryabov.1999@mail.ru

Двумерные материалы, такие как графен, представляют собой одно из перспективных направлений в физике твердого тела. Графен обладает уникальными электронными свойствами, включая высокую подвижность электронов и высокую теплопроводность. Благодаря этим свойствам, графен идеально подходит для использования в различных электронных устройствах, таких как сенсоры и транзисторы.

Один из наиболее популярных способов получения графена - это его химическое осаждение из газовой фазы, или CVD-синтез. В процессе CVD-синтеза графена, газы, содержащие углерод, вводятся в нагретую реакционную камеру, обычно сделанную из меди или никеля. При синтезе, атомы углерода взаимодействуют между собой и с атомами подложки, образуя графен на поверхности подложки. Однако, свойства полученной графеновой пленки существенно зависят от условий синтеза, и поэтому актуальной задачей является получение графеновой пленки с заданными свойствами.

В данной работе было проведено моделирование методом молекулярной динамики CVD синтеза графена на подложке Ni(111) при различных температурах 800 К – 1400 К. Над подложкой задавался горизонтальный поток газа из углерода, атомы которого осаждались на подложку формируя графеновые кольца, за счет образования ковалентных связей между атомами углерода. Для моделирования данного процесса использовался программный пакет LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [1], с потенциалом взаимодействия между атомами REAXFF [2]. На рисунке 1 представлен пример частично сформированного графена на никелевой подложке при температуре 1000 К. Сформировавшаяся графеновая структура на никелевой подложке качественно согласуется с результатами, представленными в работе [3].

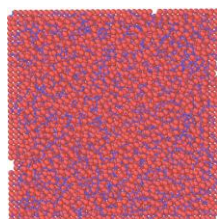


Рис. 1. Иллюстрация частично сформированного графена на никелевой подложке с кристаллографической ориентацией (111).

Список литературы

- [1] URL:<https://www.lammps.org>.
- [2] URL:<https://www.scm.com/product/reaxff>.
- [3] Meng L. et al., *J.Phys. Chem. C* **2012**, *116*, 6097.

Моделирование протонной проводимости металлоорганических каркасных структур с применением метода трансферного машинного обучения

С.А. Савельев^{1,3}, В.В. Королев^{2,3}, А.А. Митрофанов^{2,3}

¹Факультет наук о материалах МГУ, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с73

²Институт перспективных исследований проблем искусственного интеллекта и интеллектуальных систем МГУ имени М.В. Ломоносова, 119234 Москва, Ломоносовский просп., 27, корп. 1

³Химический факультет МГУ, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

E-mail: savelyev.s.a.2002@gmail.com

Металлоорганические каркасы (МОК) – перспективные пористые материалы, чья проводимость поддаётся тонкой настройке путём модификации металлических центров и органических линкеров [1]. Впечатляющее разнообразие последних усложняет экспериментальный дизайн и приводит к необходимости применения быстродействующих предсказательных методов на базе машинного обучения (МО). Цель данной работы – создание МО-моделей для прогнозирования свойств электропроводящих МОК.

Наиболее точным методом в оценке свойств МОК показали себя графовые нейронные сети. С использованием базы данных QMOF [2] и архитектуры нейронной сети MEGNet [3] нами обучена модель, способная количественно предсказывать ширину запрещённой зоны E_g на основе кристаллической структуры каркаса.

Для обучения моделей, предсказывающих протонную проводимость, использовались экспериментальные данные из литературных источников. Набор включает результаты измерений проводимости (σ) в диапазоне температур от 20 до 100 °С – 836 измерений для 98 структур. В качестве входных данных модель принимает кристаллическую структуру, а также температуру и относительную влажность.

Для повышения низкой предсказательной способности моделей, обученных на малом (относительно традиционно используемых в МО) наборе данных, был применен метод трансферного обучения. В качестве донорной выступила модель, предсказывающая E_g . Одновременная оптимизация параметров обучения и сравнительная оценка качества моделей проводилась методом «вложенной» кросс-валидации. Метрики качества для предсказания $\ln(\sigma/(1 \text{ S/cm}))$: $R^2 = 0.62$, средняя абсолютная ошибка MAE = 1.4, что соответствует приемлемой полуколичественной оценке проводимости.

В результате работы на основе собственной базы данных построена модель машинного обучения для оценки удельной протонной проводимости металлоорганических каркасов.

Список литературы

- [1] Safaei M. et al., *Trends in Analytical Chemistry*. **2019**, 118, 401–425.
- [2] Rosen A. et al., *Matter*. **2021**, 4, 1578–1597.
- [3] <https://github.com/Fung-Lab/MatDeepLearn>.

Каталитические свойства комплексов хрома на основе 1,2-бис(дифенилфосфино)бензола в процессе тримеризации этилена

А.А. Сенин¹, Д.Н. Чередилин¹, А.М. Шелоумов¹, В.В. Афанасьев¹,
Т.М. Юмашева¹, С.В. Воробьев²

¹ООО «РН-ЦИР», 119333, Москва, Ленинский просп. 55/1с2.

²РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, 119991 Москва, Ленинский пр., 65 корп. 1

E-mail: SeninAA@rdc.rosneft.ru

Известно несколько высокоселективных процессов получения 1-гексена, разработанных такими зарубежными компаниями, как Chevron Phillips Chemical, Sasol Technology, Mitsui Chemicals, Tianjin Petrochemical Company of China и др. В России в данный момент отсутствует оригинальная технология селективного получения 1-гексена. В этой связи разработка металлокомплексных каталитических систем для проведения процесса тримеризации этилена в 1-гексен представляется актуальной задачей.

При поиске подходов к решению задачи были испытаны синтезированные ранее металлокомплексные соединения хрома на основе 1,2-бис(дифенилфосфино)бензолов [1] в составе каталитических систем, включающих метилалюмоксан, триалкилалюминий в качестве активаторов (рис. 1).

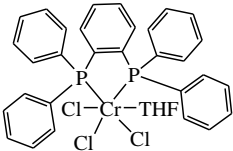
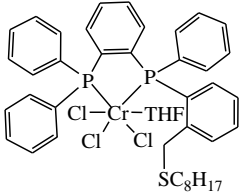
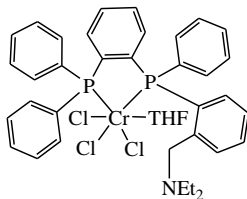
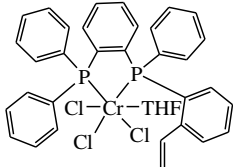
Комплексы хрома:				
Активность, кг/Гсr·час	254	46	124	1635
Селективность по 1-С6, %	50	67	80	91

Рис. 1. Металлокомплексные соединения хрома в процессе олигомеризации этилена (Т= 60–100 °С, Р = 2,0–4,0 МПа, среда – углеводороды)

Представленные каталитические системы тримеризации этилена в 1-гексен, по имеющимся в научной и патентной литературе данным, превосходят известные каталитические системы на основе комплексов хрома по производительности и чистоте целевого продукта. В процессе используется низкая концентрация комплексов хрома, практически не образуется побочный полимерный продукт.

Список литературы

[1] Д. Чередилин, А. Шелоумов, Г. Козлова и др. Патент РФ 2549897. 2015, Бюл. № 13.

Совместное использование градиентного бустинга и алгоритмов на графах в задаче многозарядного деизотопирования масс-спектров высокого разрешения

А.С. Сильверстов^{1,2}, К.С. Козлов^{1,2}, Д.А. Бойко¹, Ю.В. Бурыкина¹,
В.В. Ильюшенкова¹, В.П. Анаников^{1,2}

¹Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

²Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

Email: art.silver.artem@gmail.com

Масс-спектрометрия является одним из самых распространённых методов анализа в современной химии. Одной из задач в ней является деизотопирование. Данная работа является модификацией существующих разработок, в которых был реализован подход для масс-спектров однозарядных ионов с использованием подхода на основе разностей масс и машинного обучения.¹ Был предложен новый подход, основанный на представлении масс-спектра как ориентированного взвешенного графа и применении к нему алгоритма поиска в глубину. Данный метод показал свою высокую эффективность в сравнении с предыдущими вариантами, благодаря увеличению точности агрегации изотопологов из-за использования графов предсказаний классификатора (Таблица 1).

Таблица 1. Сравнение показателей различных подходов деизотопирования. AP@n – средняя точность модели при мере Жаккара большей n

Подход	AP@25	AP@50	AP@75	Среднее время, с
Линейный	0.63	0.45	0.34	0.27
ML	0.57	0.55	0.50	11.23
Графовый	0.92	0.69	0.59	0.74

Тем не менее, в реализованном ранее подходе на графах существуют проблемы, связанные с ложным объединением различных изотопных распределений в одно. Данную неточность предлагается решить при помощи алгоритмов классического машинного обучения. Благодаря обучению модели на большом количестве искусственно сгенерированных спектров можно получить более точный и чувствительный классификатор, который позволит графовому алгоритму избежать ситуаций с ложным объединением различных изотопных распределений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 21-13-00193).

Список литературы

[1] Boiko D. A., Kozlov K. S., Burykina J. V., Ilyushenkova V. V., Ananikov V. P., *J Am Chem Soc.* **2022**, *144*, 14590–14606.

Новый тип медь-катализируемых NHC-R и NHC=O сочетаний в условиях реакции Чана-Эванса-Лама

**В.А. Скуратович^{1,2}, А.С. Галушко¹, В.В. Ильюшенкова¹, М.В. Грудова¹, Д.О. Прима¹,
В.П. Анаников¹**

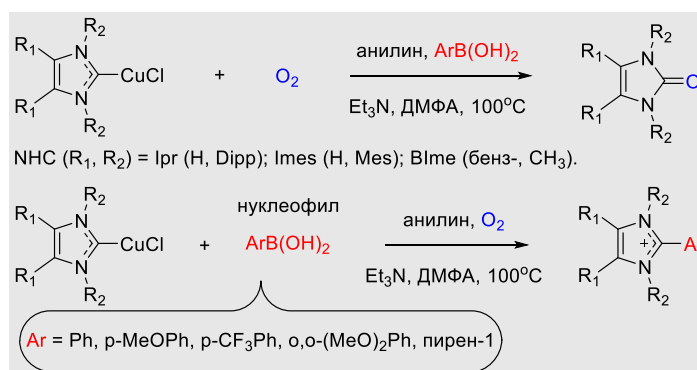
¹Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

²Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 125047 Москва, Миусская пл., 9

E-mail: vovaskur@mail.ru

NHC-несвязный катализ – один из признаков динамической природы каталитической системы M/NHC. Из-за разрыва связи металл-NHC металл вступает в динамические трансформации, а в реакционной массе образуется некоторое количество функционализированных NHC с различным составом. Наиболее типично образование частиц вида NHC-H⁺, кроме того, описаны особые коктейльные системы, сопровождающиеся образованием NHC-R⁺ и NHC=O. Первый тип частиц образуется из-за возникновения прочной связи с электрофильным арилгалогенидом (RX) в реакциях Хека, Соногаширы и Сузуки. Образование прочной связи с NHC-лиганда с кислородом (азолон) реализуется при использовании кислородсодержащих оснований. Такие процессы известны для никеля, палладия, для медных частиц такое поведение зафиксировано впервые.

Методом ESI-HRMS мы обнаружили в реакции Чана-Эванса-Лама весь набор частиц NHC-несвязного катализа NHC-H⁺, NHC-R⁺, NHC=O, свидетельствующих о сложной динамической природе катализа медных частиц. В нашем случае частицы типа NHC-R⁺ образуются с участием бороновой кислоты (нуклеофила), а также образуются азолон. Таким образом, показаны предпосылки сложной динамической природы медь-катализируемой реакции сочетания анилина и бороновой кислоты известной как реакция Чана-Эванса-Лама.



Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 23-13-00171.

Список литературы

[1] Shepelenko K.E., Soliev S.B., Galushko A.S., Chernyshev V.M., Ananikov V.P., *Inorg. Chem. Front.* **2021**, 6, 8, 1511-1527.

Поиск уязвимостей графовых сверточных нейронных сетей при работе с лекарственно подобными молекулами

А.А. Смирнова, А.А. Митрофанов

МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, г. Москва, Ленинские горы 1с10

E-mail: smirnova.anastasia2304@gmail.com

Сегодня графовые сверточные нейронные сети являются одним из основных методов искусственного интеллекта для решения химических задач. Одной из важнейших областей химического пространства являются лекарственно подобные малые органические соединения (drug-like molecules), применение сверточных нейронных сетей к таким объектам позволяет решать задачи поиска и *in silico* дизайна лекарственных соединений. Однако предложенные молекулы практически всегда претерпевают последующие изменения в структуре за счет модификации функциональных групп, что связано с требованиями, предъявляемыми к молекуле в каждой конкретной задаче. Однако известно, что графовые сверточные нейронные сети плохо устойчивы к небольшим возмущениям (adversarial attacks), что ставит вопрос о правильности их работы относительно молекул, претерпевающих структурные изменения.

Целью данной работы является поиск уязвимости в нейронных сетях, используемых в химии для создания новых молекул и определение границ применимости работы модели. Был создан датасет лекарственно подобных молекул, с рассчитанными нами квантово-химическими величинами для данных соединений. С использованием созданного набора данных из 10^5 структур построена графовая сверточная нейронная сеть для предсказания термодинамических (внутренняя энергия системы) и кинетических (разница энергий ВЗМО-НСМО) электронных свойств. В работе показана критическая важность процесса оптимизации геометрии молекулы при использовании трехмерных структур в качестве исходных данных. Нами была впервые построена модель, определяющая общую энергию системы, ($R^2 = 0.9998$, СКО = 0.010 а.е.), при этом обнаружены выпадающие точки, их анализ позволил выделить структурные фрагменты, представляющие уязвимость для нейронной сети.

Смирнова Анастасия Андреевна была поддержана грантом Некоммерческого Фонда развития науки и образования «Интеллект».

Разработка цифровой технологии подбора нефтепромысловых химических реагентов

Д.С. Султанова, В.Н. Гусаков, Д. Е. Новиков, Р.М. Султанова

Уфимский государственный нефтяной технический университет, 450064 Уфа, ул. Космонавтов, 1

E-mail: rimmams@yandex.ru

Разработана и протестирована в лабораторных и промышленных условиях цифровая технология подбора нефтепромысловых реагентов-аналогов растворителей асфальтено-смоло-парафиновых отложений (АСПО) «Флек Р016», «Пральт НК-3», «РТС-2» и «РКДмФ-2» и ингибиторов коррозии «Сонкор 9920А» и «Кормастер 1035» для замены базовых реагентов Dewaxol 7604 и «Сонкор 9011М» соответственно, методом регистрации и численного сравнения оцифрованных ИК- и/или КР- спектров.

Лабораторные исследования и промышленные испытания проводились на объектах добычи нефтедобывающего предприятия в регионе Урало-Поволжья на нескольких классах нефтепромысловых химических реагентов: растворителях АСПО, ингибиторах коррозии и солеотложений, деэмульгаторах, поглотителях сероводорода, бактерицидах.

Согласно полученным результатам, альтернативный растворитель АСПО марки «Флек Р016» с наиболее высоким значением коэффициента корреляции Пирсона ($R=0,943$) КР-спектра к спектру базового реагента «Dewaxol 7604» (рис. 1) показал наиболее близкое значение моющей способности и удельной емкости по АСПО.

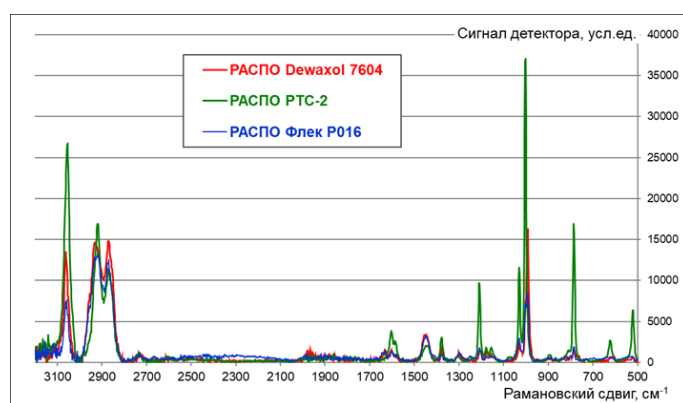


Рис. 1. КР-спектры растворителей АСПО.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR — 2022-0007 «Нефтехимические реагенты, масла и материалы для теплоэнергетики».

Разработка нового катализатора для окислительного амидирования альдегидов в фотокаталитических условиях

Я.И. Суржикова, Ю.В. Бурыкина, В.П. Анаников

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: ysurzkh@ioc.ac.ru

Формирование связи C-N является одним из центральных направлений в органическом синтезе природных соединений и разработке лекарств [1]. Функциональная амидная связь содержится в более чем 25% одобренных FDA фармацевтических препаратов. Среди всего разнообразия методов синтеза амидов наиболее мягкими и экологичными являются фоторедокс подходы. Например, замена избытка окислителя в реакции окислительного амидирования на фотокатализатор приводит к снижению побочных продуктов, а также расширению круга доступных субстратов. Кроме того, фотокатализ характеризуется низкой стоимостью и малыми затратами энергии.

В данной работе нами были проведены реакции окислительного амидирования между производными арил альдегидов и вторичными аминами с использованием новых однокомпонентных катализаторов на основе фотоактивных Pd-NHC (N-гетероциклический карбен) комплексов. В процессе оптимизации реакции были протестированы растворители, время реакции, катализаторы и их загрузка, источник и мощность излучения, различные добавки, в т.ч. радикальные ловушки. В результате были подобраны условия реакции, в которых выделенный выход целевого продукта составил 90%. Примечательно, что для проведения реакции оказались не нужны ни основания, ни внешние фотосенсибилизаторы, ни окислители.

Таким образом, использование светопоглощающих металлических катализаторов, т.е. однокомпонентных катализаторов, позволяет не использовать фотокатализатор, что значительно облегчает условия реакции. Кроме того, полученные Pd-NHC катализаторы в светопосредованном возбужденном состоянии обладают уникальной реакционной способностью и открывают новые синтетические возможности.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Научной Школы НШ-5199.2022.1.3.

Список литературы

[1] R. M. de Figueiredo, J.-S. Suppo, J.-M. Campagne, *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 12029-12122.

Программа Heterotool: построение геометрий вертикальных и латеральных гетероструктур

Е.В. Суханова, З.И. Попов

*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, 119334
Москва, ул. Косыгина, 4*

E-mail: yekaterina.sukhanova@mail.ru

Для изучения наноматериалов исследователи по всему миру используют методы компьютерного моделирования, позволяющие значительно сократить или даже заменить дорогостоящие и длительные лабораторные эксперименты. Автоматизация процесса исследования является приоритетной, так как позволяет высвободить ресурсы для творческой составляющей, в то время как рутинные задачи производятся компьютером.

Современные программные пакеты требуют в качестве исходного файла элементарную ячейку исследуемой структуры, построение которой в случае исследования гетероструктур достаточно сложный и длительный процесс. Многие существующие программные пакеты работают с периодическими граничными условиями, что накладывает некоторые ограничения на моделирование гетероструктур. При этом могут возникать трудности, которые могут быть связаны с расхождением параметров отдельных компонент гетероструктуры, с большим количеством атомов в моделируемой ячейке или с необходимостью создания геометрии с определенным углом поворота между отдельными частями структуры. Также из-за ограничения компьютерных ресурсов исследователям необходимо найти оптимальный баланс между размером структуры, от которого зависит время расчета, и величиной деформации отдельных компонент гетероструктуры, влияющих на достоверность полученных данных.

Программный пакет “Heterotool” объединил все необходимые функции для построения исходной геометрии различных гетероструктур. На основе выходных данных программы пользователь может оценить перспективность дальнейшего экспериментального изучения свойств данной гетероструктуры, что значительно сокращает время и стоимость проводимых лабораторных испытаний.

С использованием программного пакета “Heterotool” было проведено построение возможных элементарных ячеек двухкомпонентных гетероструктур на основе известных двумерных наноматериалов, среди которых были отобраны перспективные кандидаты для нейроморфных применений.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФ (грант 23-23-00490).

Молекулярный дизайн новых антибиотиков на основе бензимидазола

К.Р. Уразманова, А.А. Орлова, В.В. Виноградов

Университет ИТМО, 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49, лит. А

E-mail: urazmanova@scamt-itmo.ru

По прогнозам ВОЗ, к 2050 году устойчивость к антибиотикам приведет к смерти 10 млн человек ежегодно. Растущая резистентность бактерий и ограниченная эффективность существующих препаратов побуждают к поиску новых лекарств. Антибиотики на основе бензимидазола считаются перспективными из-за их широкого спектра воздействия, надежного механизма и эффективности против устойчивых штаммов [1].

Целью данного исследования является создание новых потенциально успешных лекарственных препаратов на основе гибридных производных бензимидазола с помощью методов машинного обучения.

Предлагаемый алгоритм совмещает прогностическую модель для предсказания биологической активности молекулы и генеративную модель для создания новых молекул. Для обучения моделей мы собрали базу данных гибридов бензимидазола с другими антибиотиками, включающую в себя более 2 тысяч молекул с такими параметрами, как минимальная ингибирующая концентрация и штаммы бактерий. Молекулы были преобразованы в формат SMILES, отражающий их состав и структуру. С использованием генеративной модели мы планируем предложить новые структуры гибридов бензимидазола с улучшенной антибактериальной активностью, которые, после экспериментальной проверки, могут успешно пройти клинические испытания и появиться на рынке (рис. 1).

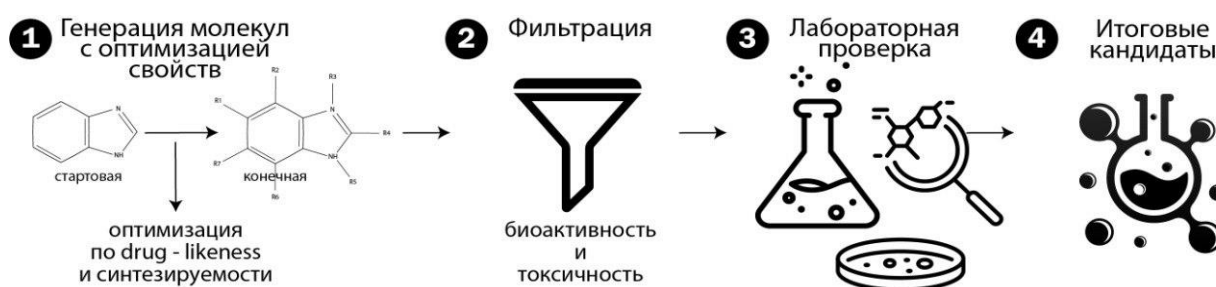


Рис. 1. Дорожная карта исследования

Работа выполнена при финансовой поддержке Федеральной программы академического лидерства «Приоритет 2030».

Список литературы

[1] S. Suvaiv, K. Singh, P. Kumar, S. Hasan, S.P. Kushwaha, A. Kumar, S.M.H. Zaidi, S.K. Maurya, Rasayan J. Chem., 2023, 48, 1892-1905.

Использование свёрточных нейронных сетей для решения практических задач порошковой рентгеновской дифракции

А.О. Дмитриенко¹, А.И. Хайбрахманов²

¹РЭУ им. Г. В. Плеханова, 117997 Москва, Стремянный переулок, д.36

²Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

E-mail: blackwood168@gmail.com

Значительная часть задач обработки данных порошковой рентгеновской дифракции поддаётся автоматизации, однако некоторые этапы, такие как извлечение фона и определение параметров формы пика, требуют человеческого вмешательства. Свёрточные нейронные сети, архитектура которых нацелена на эффективное распознавание образов, способны решать подобные визуальные задачи. Целью данной работы является автоматизация этапов обработки данных порошковой рентгеновской дифракции с помощью свёрточных нейронных сетей.

Для генерации данных, необходимых для тренировки моделей машинного обучения, было разработано [программное обеспечение](#) [1] на языке Python. В качестве профильной функции выбрана модель Томпсона-Кокса-Хастингса [2], в качестве фона используются стандартные полиномы Чебышева. Показано, что архитектура глубокого обучения Resnet18 [3], адаптированная нами для одномерного случая, после обучения на синтетических данных удовлетворительно предсказывает фон и параметры формы пика на реальных дифрактограммах, опубликованных в литературе.

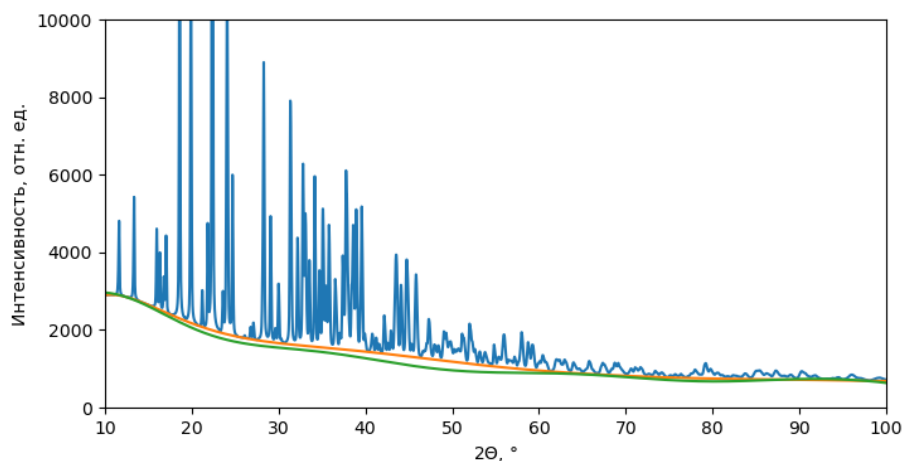


Рис. 1. Литературная дифрактограмма смешанного гидроцитрата $\text{NaKHC}_6\text{H}_5\text{O}_7$ [4] (синий), предсказанный (зеленый) и определённый методом Ритвельда (оранжевый) фон.

Список литературы

- [1] https://codeberg.org/dmitrienka/pxrd_simulator
- [2] P. Thompson, D. E. Cox, *J. Appl. Cryst.* **1987**, 20, 79-83.
- [3] M. Shafiq, Z. Gu, *Appl. Sci.* **2022**, 12, 8972.
- [4] A. Rammohan, J. A. Kaduk, *Acta Cryst. E72.* **2016**, 170-173.

Генерация размеченных изображений биопленок методами глубокого обучения для автоматического количественного анализа

А.А. Холичева¹, М.С. Каманин¹, К.С. Козлов², Д.А. Бойко², В.П. Анаников²

¹Тульский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, д.92

²Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119334 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: ang.hol@yandex.ru

Биопленки – основная форма существования бактерий в природе, представляющая собой множество микроорганизмов, расположенных на какой-либо поверхности (субстрате) и окруженных выделяемым ими веществом – матриксом.

Одним из методов изучения биопленок является сканирующая электронная микроскопия (СЭМ). Полученные при помощи микроскопа изображения подвергаются дальнейшему анализу, в том числе компьютерными методами.

Часто бывает необходимо осуществить поиск бактерий на снимке, определить их количество и взаимное расположение относительно друг друга. Данные задачи можно решить с помощью нейронных сетей, сведя их к проблемам сегментации и детекции. Для обучения соответствующих моделей требуется много размеченных данных, однако, зачастую на их получение уходит большое количество материальных ресурсов и внушительный объём ручного труда.

В данной работе описывается подход, основанный на генерации синтетического размеченного набора изображений, который впоследствии используется для обучения моделей сегментации и детекции (рис. 1). Каждый искусственный снимок биопленки конструируется из отдельно сгенерированных бактерий и субстратов с учётом закономерностей о расположении микроорганизмов из реальных данных.

Таким образом, имея небольшой набор снимков с микроскопа, можно получить синтетический датасет, пригодный для обучения моделей, осуществляющих количественный анализ изображений биопленок.

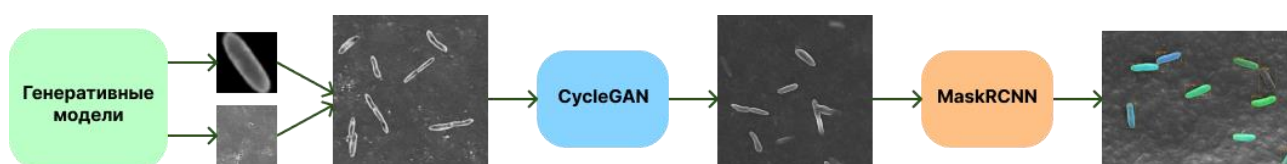


Рис. 1. Реализованный подход

Анализ связи остаточных ошибок оценочных функций со структурными и физико-химическими особенностями лигандов

Д.Д. Чернов, Д.А. Шульга

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с3

E-mail: daniil.chernov@chemistry.msu.ru

Оценочные функции являются повсеместно используемыми инструментами для обнаружения лекарств на ранних стадиях. В настоящее время их точность является умеренной, и существует явная необходимость в ее повышении, чтобы сделать весь процесс поиска лекарств менее рискованным и минимизирующим экспериментальные ресурсы.

В данной работе предлагается подход к анализу ошибок предсказания энергии связывания в системе лиганд-белок для оценочных функций. Этот подход основан на описании остаточной ошибки линейной моделью, построенной на интерпретируемых дескрипторах, а также анализе важности отдельных дескрипторов в этой модели в зависимости от значения коэффициента l_1 -регуляризации. Эта работа является развитием идей, сформулированных в статье [1].

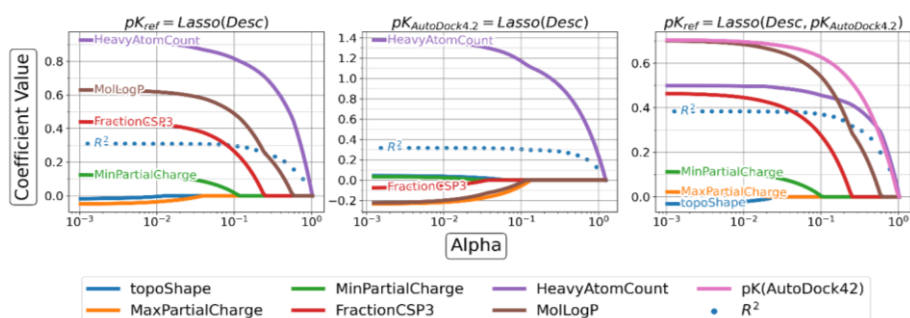


Рис. 1. Зависимости коэффициентов при нормированных дескрипторах в зависимости от коэффициента регуляризации для регрессионных моделей.

В качестве набора лиганд-белковых комплексов был выбран набор Core Set из CASF-2016, представляющий собой выборку из базы данных PDBind с наиболее достоверными экспериментальными данными. Анализ проводился на предварительно отобранных по интерпретируемости дескрипторах из библиотек RDKit и CDK.

В результате работы были выявлены систематические отклонения в работе оценочных функций и предложена интерпретация их причин. Так, было показано, что дескрипторы не вносящие большой вклад с описание энергии связывания, могут вносить значительный вклад в описание ошибки предсказания.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-23-00729).

Список литературы

[1] D.A. Shulga et al, *Int. J. Mol. Sci.* **2022**, 23, 15018.

Основно-ионизирующиеся NHC-лиганды в Pd-катализируемых реакциях арилхлоридов

**В.М. Чернышев¹, А.Ю. Черненко¹, В.А. Байдикова¹, В.В. Кутырев¹, А.В. Астахов¹,
М.Е. Миняев², В.П. Анаников²**

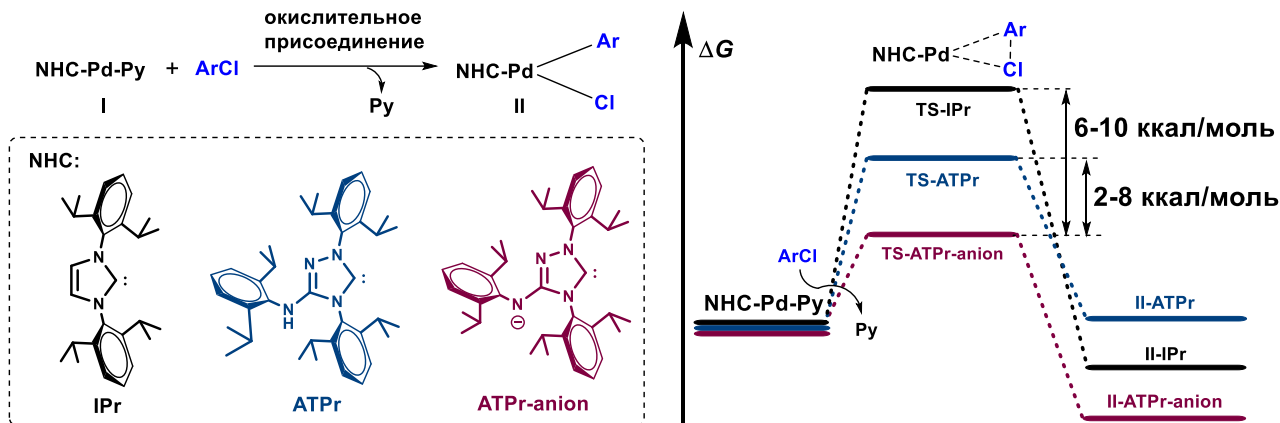
¹Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)

им. М. И. Платова (НПИ), 346428 Новочеркасск, ул. Просвещения, 132

²Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

e-mail: chern13@yandex.ru

В докладе обсуждается новый подход к дизайну N-гетероциклических карбенов (NHC), направленный на создание высокоэффективных систем Pd/NHC для катализа реакций с участием арилхлоридов и других малоактивных электрофилов. Рассматриваются NHC ряда 1,2,4-триазол-5-илидена, имеющие заместитель ArNH при атоме С3 триазольного цикла, так называемые аналоги нитрона. Предлагаемый подход основан на выявленном принципе синергии между специфическими пространственными характеристиками NHC-лиганда и его анионным характером, которые позволяют существенно, на 2-10 ккал/моль, снижать барьер окислительного присоединения арилхлорида по сравнению с неионизированными лигандами:



ATr обеспечивает снижение ΔG_{OA}^\ddagger на 2-10 ккал/моль по сравнению с аналогичными неионизируемыми NHC

Необходимые пространственные характеристики обеспечиваются двумя N-арильными заместителями, содержащими алкильные группы в положениях 2 и 6 бензольного ядра. Отрицательный заряд возникает вследствие депротонирования заместителя ArNH в основной среде, в которой проводится большинство реакций кросс-сочетания и C-H функционализации.

Мы предполагаем, что развитие обсуждаемого подхода к дизайну NHC лигандов может позволить решить проблемы активации многих деактивированных электрофилов в различных металл-катализируемых реакциях, реализуемых в основных средах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-73-00088).

Методы интегральной геометрии и алгебраической топологии в анализе сложных структур

М.В. Чернявский¹, Д.А. Ивонин¹, П.А. Гришин², Е.А. Грачев¹

¹Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с2

²Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бул., 30с1

E-mail: chernjavskiy.mv15@physics.msu.ru

Анализ сложных структур — быстроразвивающаяся отрасль, включающая широкий спектр приложений и современные методы анализа данных.

Данный доклад представляет собой обзор публикаций с единой методологией исследования структур материалов. Хотя многие математические методы направлены на описание таких объектов как статистических, в данных работах [1], [2], [3] основное внимание уделяется подходам, основанным на интегральной геометрии и топологическом анализе данных.

Статистические методы исходят из предположения об однородности структур, основываясь на частотном представлении изучаемых свойств, и хорошо подходят для выявления некоторых закономерностей, заключенных в структуре. Однако, когда речь идет об анализе образований существенной неправильной формы (в основном встречающихся в природе), статистические методы могут оказаться не в состоянии отразить многообразие пространственных особенностей, присутствующих в таких объектах.

Основное преимущество подхода, основанного на интегральной геометрии и топологии, заключается в том, что он позволяет фиксировать основные структурные особенности (такие как связанные части, туннели и полости), выраженные через топологические инварианты, что оказывается чрезвычайно полезным при описании как инженерных материалов (керамики, пены, сплавы), так и природных природных (геологические керны, образцы почвы и пр.) объектов.

Список литературы

[1] Tsukanov, A.; Ivonin, D.; Gotman, I.; Gutmanas, E.Y.; Grachev, E.; Pervikov, A.; Lerner, M. *Materials* **2020**, *13*, 541.

[2] Ivonin, D.A., Grishin, P.A. & Grachev, E.A. *Izv. Phys. Solid Earth*. **2021**, *57*, 366–374.

[3] Fedotov, A.; Grishin, P.; Ivonin, D.; Chernyavskiy, M.; Grachev, E. *Appl. Sci.* **2022**, *12*, 50.

Применение нейронных сетей для разработки мультимодального углеродного наносенсора ионов в воде

Г.Н. Чугреева, Т.А. Доленко

Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1с2

E-mail: chugreeva.gn17@physics.msu.ru

Углеродные точки (УТ) – наночастицы, обладающие стабильной интенсивной фотолюминесценцией (ФЛ), зависящей от условий синтеза наночастиц и чрезвычайно чувствительной к изменению параметров окружения [1]. Благодаря такому уникальному сочетанию свойств УТ имеют широкие перспективы использования в качестве оптических наносенсоров среды [2, 3]. Во всех известных работах УТ рассматривались как наносенсоры 1-2 параметров среды, хотя во многих практических задачах необходимо контролировать изменение нескольких параметров одновременно.

В работе представлены результаты применения нейронных сетей со сверточной архитектурой (Рис. 1А) для разработки мультимодального фотолюминесцентного наносенсора на основе УТ для решения обратной 6-параметрической задачи фотолюминесцентной спектроскопии. Показано, что с помощью 2D-сверточных нейронных сетей по матрицам возбуждения-испускания фотолюминесценции УТ можно одновременно определять концентрации катионов тяжелых металлов Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Al^{3+} , Cr^{3+} и аниона NO_3^- в водных растворах со средней абсолютной ошибкой 0.80 мМ, 0.86 мМ, 0.76 мМ, 0.67 мМ, 0.16 мМ и 1.64 мМ, соответственно (Рис. 1Б). Полученные погрешности удовлетворяют потребностям мониторинга состава технологических и производственных вод.

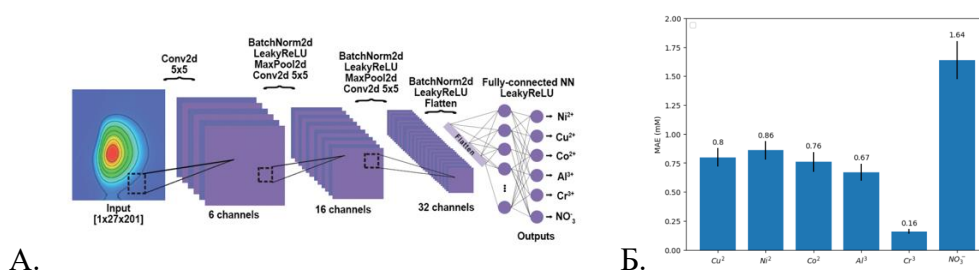


Рис. 1. А. Схема использованной нейронной сети. Б. MAE определения концентрации ионов.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 22-12-00138, <https://rscf.ru/project/22-12-00138/>.

Список литературы

- [1] A.M. Vervald, K.A. Laptinskiy, G.N. Chugreeva, S.A. Burikov, T.A. Dolenko. *J. Phys. Chem. C*, **2023**, *127*, 44, 21617-21628.
- [2] Y. Guo, Z. Wang, H. Shao, *Carbon*. **2013**, *52*, 583–589.
- [3] S. Liu, J. Tian, L. Wang, *RSC Adv*. **2012**, *2*, 411–413.

Использование GPT для извлечения данных о факторах удержания в тонкослойной хроматографии из научных статей

Х.Р. Агаджанов^{1,3}, К.С. Козлов^{1,2}, Д.А. Бойко^{1,2}, В.П. Анаников¹

¹ *Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского, Ленинский пр-т, 47, Москва, 119991, Россия*

² *Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Ленинские горы, дом 1 строение 3, Москва, 119991, Россия*

³ *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», факультет химии, Вавилова, дом 7, Москва, 117312, Россия*

E-mail: khragadzhanov@edu.hse.ru

Появление и развитие больших языковых моделей произвело революцию во многих сферах жизни. В нашем исследовании представлен способ извлечения информации и обработки данных о факторах удерживания в тонкослойной хроматографии из научных статей. Полученные данные будут использованы для генерации датасета, на котором планируется применить различные методы машинного обучения, в том числе графовые нейронные сети. Извлечение и обработка данных включало в себя несколько этапов:

- 1) Парсинг научных статей. Были получены 605 html-страниц научных статей с помощью GET-запросов.
- 2) Получение входных данных для GPT (промптов). Из каждой html-страницы были получены необходимые для дальнейшей обработки части статей.
- 3) Обработка данных при помощи GPT. Полученные промпты были загружены в GPT модель для получения списка из словарей, содержащих информацию о названии вещества, его факторе удерживания и системе растворителей, в которой происходило хроматографическое разделение. Итоговые списки сохранялись в JSON файл.

Для поиска наиболее подходящей модели GPT была произведена частичная разметка данных научных статей. По введенным метрикам (precision, recall) сравнивались модели GPT-4-0613, GPT-4, GPT-4-0314. На основе полученных метрик была выбрана лучшая модель для дальнейшей обработки данных.

Применение алгоритмов машинного обучения в задаче определения и прогнозирования параметров упругости мягких биологических тканей

Л.И. Семенов¹, А.Е. Крупнин¹, К.Г. Антипова¹, Т.Е. Григорьев¹

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», 123182 Москва,
пл. Академика Курчатова, д. 1.*

E-mail: leo.semenov1980@gmail.com

При разработке хирургических приборов и методов диагностических исследований широкое применение находят гидрогели на основе полиакриламида, которые могут выступать в качестве тканеимитирующих фантомов. Использование таких гелей для исследования механических свойств биологических тканей имеет ряд преимуществ, важнейшими из которых являются воспроизводимость механических свойств и возможность изготовления стандартизованных образцов с любой геометрией. Варьирование концентрации сшивающего агента позволяет гибко настраивать механические свойства гидрогеля, соответствующие свойствам выбранной мягкой ткани. Применение алгоритмов машинного обучения может не только выявить зависимость между концентрацией сшивателя и механическими свойствами фантома, но и существенно сократить время лабораторных исследований, включающее в себя как подготовку образцов, так и их испытания.

В данной работе алгоритм машинного обучения «случайный лес» применен для определения и прогнозирования механических свойств тканеимитирующих фантомов на примере гидрогелей из полиакриламида. Образцы получали свободной радикальной полимеризацией. В 20% раствор мономера, акриламида, добавляли сшиватель – N-N'-метиленбисакриламид и инициатор – персульфат аммония. Реакцию ускоряли добавлением катализатора – N,N,N'N'-тетраметилэтилендиамина. Для получения образцов с разной степенью сшивки количество сшивателя варьировали от 1% до 9%, после чего проводили механические испытания на индентирование. Аналогичные численные эксперименты проводили в конечно-элементном комплексе ANSYS для широкого диапазона модулей упругости материала, используя как линейно-упругую модель, так и модель неогука. Алгоритм обучен на основе синтетических данных о зависимости между глубиной вдавливания индентора и возникающей силовой реакцией. Валидированы предсказания алгоритма на выборке из 30% зарезервированных данных, не использованных в обучении, и результатах натуральных экспериментов.

Список докладчиков

Пленарные доклады

А.А. Гуда.....	20
С.В. Люлин	21
А.В. Нартова	22
О.В. Потапенко.....	23
Е.В. Скорб.....	24
А.В. Шапеев.....	25
В.В. Яньшолле.....	26

Устные доклады

А.С. Агликов.....	28
Е.В. Александров	29
Б.Г. Бегларян.....	30
О.С. Бородина.....	31
Е.О. Бухтеева	32
Р.Г. Зайцев	33
И.С. Злобин.....	34
Т.Ю. Иваненко.....	35
И.Р. Ишмухаметов	36
К.В. Карпов.....	37
К.С. Козлов	38
П.В. Комаров	39
В.В. Королев.....	40
В.Н. Кудияров.....	41
И.Н. Левченко.....	42
М.С. Лифарь	43
Д.В. Мануковская.....	44
Е.И. Мареев.....	45
С.Э. Мирзаева.....	46
А.А. Митрофанов	47
Т.И. Мулашкина.....	48
Н.В. Муравьев	49
А.А. Никитина.....	50
В.Т. Осипов.....	51
И.С. Пикулин.....	52

И.С. Попов	53
А.А. Поташников	54
Б.О. Проценко.....	55
С.П. Романчук	56
И.Д. Рубцов.....	57
Ю.В. Русалев	58
А.В. Рылов	59
Р.Е. Рыльцев	60
Н.С. Серов.....	61
А.Н. Синельников	62
А.А. Смирнова.....	63
Р.А. Степанюк	64
А.Ю. Толбин.....	65
М.Н. Усачёв	66
Н.М. Щелкачев	67
М.А. Щетинкина	68
М.Д. Яблонский.....	69
<u>Стендовые доклады</u>	
А.Р. Абдульмянов	71
М.А. Абрамкина.....	72
Д.И. Андреев.....	73
Л.А. Аракелян.....	74
И.И. Ахметзянов	75
М.И. Банников.....	76
Т.С. Белоусова	77
Д.С. Бойченко	78
Л.С. Бондаренко	79
Д.В. Борзова.....	80
А.С. Буров.....	81
А.В. Быков	82
Р.Р. Ванчугов	83
А.С. Вепрева	84
А.П. Ворожцов	85
М.Э. Гасанов.....	86
Э.М. Гашимова.....	87
И.Г. Гнатюк.....	88

А.Н. Голышева	89
А.А. Гребенкина.....	90
Н.В. Губина.....	91
П.Е. Гуревич	92
Г.К. Гуркин	93
В.В. Гурьев.....	94
И.С. Дубровский	95
К.С. Ерохин.....	96
Н.С. Захаров.....	97
М.К. Ильющенко.....	98
А.А. Кечин	99
В.А. Ковеза	100
Н.И. Коломоец.....	101
Д.А. Колыхалов	102
Д.С. Кошелев	103
З.С. Красовская.....	104
Л.С. Кузнецова	105
Ю.О. Кузьминова	106
К.Д. Кулаев	107
И.В. Лаврентьев.....	108
Е.А. Ланцова.....	109
Д.В. Мануковская.....	110
В.М. Назарычев	111
Е.В. Нам	112
Д.В. Никитенко.....	113
Е.В. Обухова.....	114
В.С. Одегова	115
А.А. Орлова	116
Р.Н. Перчиков.....	117
З.И. Попов.....	118
Д.О. Прима.....	119
А.С. Пятаченко	120
В.О. Рябов	121
С.А. Савельев	122
А.А. Сенин.....	123
А.С. Сильверстов	124

В.А. Скуратович.....	125
А.А. Смирнова.....	126
Р.М. Султанова.....	127
Я.И. Суржикова.....	128
Е.В. Суханова	129
К.Р. Уразманова	130
А.И. Хайбрахманов.....	131
А.А. Холичева	132
Д.Д. Чернов.....	133
В.М. Чернышев	134
М.В. Чернявский	135
Г.Н. Чугреева	136
Х.Р. Агаджанов.....	137
Л.И. Семенов	138

Присоединяйтесь к нам!

Сайт Научной школы:

ananikovlab.ru



Telegram-канал Научной школы:

t.me/ananikovlab



Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

Россия, 119991, Москва, Ленинский проспект 47

e-mail: alab@ioc.ac.ru

