

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Artificial Intelligence in Chemistry and Materials Science

II научная конференция

17-21 ноября 2025

МОСКВА

Институт органической химии
имени Н. Д. Зелинского РАН



СБОРНИК ТЕЗИСОВ



Сборник тезисов

II Научная конференция
«Искусственный интеллект в химии
и материаловедении»

17-21 ноября 2025
ИОХ РАН, Москва

Редакционная коллегия:
Архипова Д.М., Чернышова Д.В., Сейткалиева М.М., Аракелян Л.А.

II Научная конференция «Искусственный интеллект в химии и материаловедении»: Сборник тезисов

Сборник содержит аннотации и тезисы пленарных, ключевых, приглашенных, устных, постерных и заочных докладов участников II научной конференции «Искусственный интеллект в химии и материаловедении» (AICHEM-2025)

Тезисы опубликованы в авторской редакции.

Содержание

Организаторы	5
Приветствие академика-секретаря ОХНМ РАН академика М. П. Егорова.....	6
Тематические блоки конференции.....	7
Основные направления.....	7
Научный комитет	8
Организационный комитет	8
Информационные спонсоры	9
Пленарные доклады	10
Ключевые доклады	16
Приглашенные доклады	25
Устные доклады	62
Постерные доклады	152
Заочные доклады.....	239
Авторский указатель.....	245

Организаторы



Российская Академия Наук



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Министерство науки
и высшего образования РФ



Министерство
промышленности и
торговли РФ



Институт органической
химии им. Н. Д.
Зелинского РАН

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



Уважаемые коллеги!

От имени Отделения химии и наук о материалах РАН рад приветствовать участников II Научной конференции «Искусственный интеллект в химии и материаловедении». Эта встреча проходит в особое время, когда мы становимся свидетелями глубокой трансформации науки и технологий. Если еще совсем недавно искусственный интеллект рассматривался как самостоятельная цель исследований, то сегодня мы уверенно вступаем в эпоху «ИИ для химии».

Впервые о наступлении этой эпохи сказал в своем выступлении акад. В. П. Анаников на Форуме будущих технологий 21 февраля 2025 г. С тех пор этот прогноз нашел яркое подтверждение в многочисленных научных работах и практических приложениях по всему миру. Международное сообщество демонстрирует единую тенденцию: искусственный интеллект перестает быть отвлечённым инструментом, а становится интеллектуальным ядром химических исследований, разработок новых материалов, роботизации лабораторий, цифрового моделирования и устойчивых технологических решений. Для отечественной науки этот вызов особенно важен. Россия обладает сильными школами в области химии и материаловедения, и интеграция ИИ в эти области открывает перед нами уникальные возможности. Не менее значимым является и вклад ИИ в подготовку кадров для науки и промышленности: персонализированная исследовательская траектория, цифровые подходы, интеллектуальные системы наставничества помогут подготовить новое поколение исследователей, готовых к работе в условиях стремительно меняющейся научно-технологической картины мира.

Выбор тематики конференции отражает глобальные тренды и стратегические задачи. Сегодня мы не только обсуждаем научные идеи, но и формируем интеллектуальную инфраструктуру XXI века, где химия и искусственный интеллект становятся взаимно усиливающими партнерами. Желаю участникам конференции плодотворной работы, смелых идей и новых открытий. Убеждён, что совместными усилиями мы внесём значимый вклад в развитие мировой науки и в укрепление технологического лидерства нашей страны.

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

Тематические блоки конференции

- Цифровизация и стратегии ИИ в науке:
открытие, лекции, панельная дискуссия.
- ИИ в химии, материаловедении и устойчивом развитии:
пленарные доклады, научные сессии, постеры, круглый стол.
- ИИ в производстве и промышленных приложениях:
индустриальные доклады, технологические кейсы, круглый стол.
- Цифровая трансформация компаний и сервисов:
сессии от компаний и представителей бизнеса.
- Образование, кадры, стартапы:
панельные дискуссии, молодежная секция, обсуждения.

Основные направления

- AI в науке
- AI в образовании
- AI в разработке промышленных решений
- Междисциплинарные темы:
AI – технологии – химия – биология – медицина
- Современные исследования в химии
- Создание новых материалов



Программа форума

Научный комитет

Председатель научного комитета

Академик РАН Анаников В.П.

Научный комитет

Академик Алдошин С.М.

Академик РАН Антипов Е.В.

Академик РАН Бухтияров В.И.

Академик РАН Горбунова Ю.Г.

Академик РАН Григорович К.В.

Член-корр. РАН Гудилин Е.А.

Академик РАН Егоров М.П.

Член-корр. РАН Иванов В.К.

Академик РАН Калмыков С.Н.

Член-корр. РАН Комлев В.С.

Академик РАН Кукушкин В.Ю.

Член-корр. РАН Лукашин А.В.

Академик РАН Лысак В.И.

Академик РАН Максимов А.Л.

Академик РАН Мешалкин В.П.

Академик РАН Новаков И.А.

Член-корр. РАН Пономаренко С.А.

Академик РАН Ремпель А.А.

Академик РАН Синяшин О.Г.

Член-корр. РАН Трифонов А.А.

Академик РАН Федюшкин И.Л.

Академик РАН Хохлов А.Р.

Академик РАН Цивадзе А.Ю.

Академик РАН Чарушин В.Н.

Академик РАН Шевченко В.Я.

Член-корр. РАН Шевельков А.В.

Организационный комитет

Председатель оргкомитета

Академик РАН Терентьев А.О.

Зам. председателя оргкомитета

к.х.н. Кучуров И.В.

Оргкомитет

Член-корр. РАН Дильман А.Д.

Член-корр. РАН Третьяков Е.В.

Асп. Алексеева В.А.

К.х.н. Архипова Д.М.

Бинягова Р.Н.

К.х.н. Гордеев Е.Г.

Д.х.н. Елисеев О.Л.

Ерофеева А.В.

Кундрюкова О.В.

К.х.н. Ларин А.А.

К.х.н. Прима Д.О.

Асп. Провоторова Д.В.

К.х.н. Сахарова Л.Т.

Д.х.н. Ферштат Л.Л.

Информационные спонсоры



«Аддитивные
технологии»



«Аналитика»



«Mendeleev
communications»



НЕФТЕХИМИЯ

«Нефтехимия»

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ



ИИ В НАУКЕ: ВЫЗОВЫ И ВОЗМОЖНОСТИ

Аветисян А.И.

*Институт системного программирования им. В.П. Иванникова
Российской академии наук, 109004,
г. Москва, ул. Александра Солженицына, д. 25*

ЦИФРОВОЕ СОТВОРЧЕСТВО В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

Анаников В.П.

*Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН,
Ленинский проспект 47, Москва*

Современная наука вступает в эпоху цифрового сотворчества, где искусственный интеллект (ИИ) становится не просто инструментом, а партнёром исследователя в процессе творческого поиска. Если ранее цифровые технологии служили для автоматизации рутинных операций, то сегодня они начинают участвовать в отработке научных гипотез, формировании исследовательских стратегий и интерпретации сложных данных.

Можно выделить три уровня цифрового сотворчества. На первом уровне ИИ выполняет вспомогательные функции — обработку текстов, анализ литературы, структурирование информации и генерацию научных материалов. Это снижает общую нагрузку исследователя и ускоряет коммуникацию в науке.

На втором уровне формируется совместная вычислительная среда, где исследователь создаёт собственные алгоритмы на Python для обработки изображений, спектров и экспериментальных данных, а ИИ становится интеллектуальным расширением человеческого анализа.

Третий уровень — это оцифровка научной интуиции, когда системы машинного интеллекта начинают участвовать в самом процессе открытия: выделяют скрытые закономерности, оценивают вероятности, предлагают неожиданные связи. Здесь ИИ становится полноценным компонентом научных идей, а творческий акт превращается в диалог человека и алгоритма.

Переход к цифровому сотворчеству меняет само понимание научного труда: исследователь становится архитектором взаимодействия с ИИ, а цифровая среда — пространством для коллективного мышления человека и машины.

В докладе будет рассмотрена классификация ИИ-систем в химии и примеры применения [1-5].

Литература

1. Ananikov, V.P. Top 20 Influential AI-Based Technologies in Chemistry. *Artificial Intelligence Chemistry*, **2024**, 100075. <https://doi.org/10.1016/j.aiche.2024.100075>
2. Boiko, D.A.; Kozlov, K.S.; Burykina, Yu.V.; Ilyushenkova, V.V.; Ananikov, V.P. *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, 144, 32, 14590-14606. <https://doi.org/10.1021/jacs.2c03631>
3. Kozlov K.S., Boiko D.A., Burykina J.V., Ilyushenkova V.V., Kostyukovich A.Yu., Patil E.D., Ananikov V. P. , *Nat. Commun.*, **2025**, 16, 2587. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-56905-8>
4. Holicheva, A.A., Kozlov, K.S., Boiko, D.A., Kamanin M.S., Provotorova D.V., Kolomoets N.I., Ananikov V.P., *npj Biofilms and Microbiomes*, **2025**, 11, 16. <https://doi.org/10.1038/s41522-025-00647-4>
5. Tyrin A.S., Boiko D.A., Kolomoets N.I., Ananikov V.P., *Chem. Sci.*, **2025**, 16, 6895. <https://doi.org/10.1039/D4SC07320G>

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 25-13-00387.

ПРЕДСКАЗАНИЕ И ОБЪЯСНЕНИЕ НОВЫХ ХИМИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ И ВЕЩЕСТВ

Оганов А.Р.

*Сколковский институт науки и технологий,
Большой бульвар, д. 30, корп. 1, 121205 Москва, Россия*

Прорыв в предсказании кристаллических структур привел к прорывам в смежных задачах — предсказании соединений и стабильных молекул и кластеров. Растущий массив новых предсказанных явлений требует новых идей и концепций. Я рассмотрю несколько примеров:

1. Открытие аномальных соединений под давлением, таких как Na_3Cl , NaCl_7 , а также рекордных высокотемпературных сверхпроводников — H_3S , YH_6 , CaH_6 , ThH_{10} , LaH_{10} .
2. Открытие неожиданных явлений при высоком давлении — в т.ч. прозрачной диэлектрической фазы натрия и реакционной способности гелия.
3. Объяснение этих и других явлений на основе вновь разработанных шкал электроотрицательности и химической жёсткости, а также новой простой модели реакционной способности химических элементов.
4. Предсказание стабильных молекул — формализм и его приложения. В частности, я расскажу о результатах, полученных для молекул и кристаллических аллотропных модификаций серы, фосфора и бора. Будет объяснено химическое разнообразие углеводородов и молекул системе С-Н-N-O.

БОЛЬШИЕ ДАННЫЕ, ЕСТЕСТВЕННЫЙ И ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В СОЗДАНИИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Поройков В.В.

*Институт биомедицинской химии В.Н. Ореховича,
119121, Москва, Погодинская ул. 10, стр. 8*

Создание новых лекарственных препаратов основывается на использовании всей совокупности мультидисциплинарных данных, накопленных человечеством в области химии, биологии и медицины. Согласно современным оценкам, известно: 10 000+ молекулярных функций и 25 000+ биологических процессов в организме¹; 39 000+ болезней, 78 000+ фармакологических мишней и 18 000+ лекарств²; 122 000 000+ химических соединений и 297 000 000+ экспериментальных оценок биологической активности³. Преобразование этих данных в информацию и генерация новых знаний на основе полученной информации осуществляются с использованием методов ML/AI. Анализ показывает, что применяемые в настоящее время подходы, основанные на искусственном интеллекте, практически неотличимы от развивающихся в течение многих десятилетий подходов (Q)SAR/(Q)SPR. Погрешности построенных моделей в обоих случаях зависят от качества обучающих/тестовых выборок, представления химической структуры, описания биологической активности, метода построения зависимостей⁴. Повышение качества моделей требует осознания возможностей и ограничений методов ML/AI и преодоления имеющихся «барьеров», благодаря «естественному интеллекту». Интуиция и творческие способности человека обеспечивают выход за пределы существующих механистических представлений, формируя системный подход к поиску и разработке новых лекарств, который можно условно назвать “Цифровая фармакология 2.0”⁵. Гармоничное сочетание человеческого разума и искусственного интеллекта является необходимой предпосылкой к созданию более безопасных и эффективных лекарств, обеспечению здорового долголетия с учетом индивидуальных особенностей личности.

Литература

1. Gene Ontology, URL [<https://geneontology.org/>], доступно 10.10.2025.
2. Open Targets, URL [<https://www.opentargets.org/>], доступно 10.10.2025.
3. PubChem, URL [<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>], доступно 10.10.2025.
4. Поройков В.В. В кн.: Доклиническое изучение лекарственных средств (промышленная фармация): учебник для студ. высш. учебн. заведений. Под ред. А.Л. Хохлова, Н.В. Пятигорской. - М. - Из-во ООО «ГРУППА РЕМЕДИУМ», 2021. - с. 28-80.
5. Поройков В.В. *Биомедицинская химия*, 2020, **66**, 30.

БИТВА ИНТЕЛЛЕКТОВ

Черниговская Т.В.

*Институт когнитивных исследований СПбГУ,
199004, г. Санкт-Петербург, Большой пр. Васильевского острова, 21*



КЛЮЧЕВЫЕ ДОКАЗАДЫ

ГЕНЕРАТИВНЫЙ МУЛЬТИАГЕНТНЫЙ ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ИНЖЕНЕРИИ И ФИЗИКИ

Бурнаев Е.В.^{a,b}

^a*Сколковский институт науки и технологий,
121205, Москва, Большой бульвар д. 30, стр. 1*

^b*Институт искусственного интеллекта AIRI,
Москва, Пресненская набережная, 6, стр. 2*

Современные задачи инженерной физики и проектирования сложных инженерных систем требуют комплексного подхода, объединяющего знания из различных областей науки и техники. Традиционные методы проектирования часто сталкиваются с ограничениями при решении многозадачных и многопараметрических проблем. В ответ на эти вызовы развивается концепция инженерного искусственного интеллекта (ИИ), включающая генеративные мультиагентные системы.

Генеративный мультиагентный ИИ представляет собой интеграцию нейронных сетей и символьного ИИ, где нейронные агенты генерируют и оценивают возможные решения, а символьные агенты управляют процессом поиска, используя отраслевые знания и правила. Такой подход позволяет эффективно решать задачи оптимизации, прогнозирования и синтеза новых материалов и конструкций.

Применение данной технологии в инженерии и физике уже открывает новые горизонты для разработки инновационных решений. Например, в проектировании аэрокосмических и автомобильных конструкций, где необходимо учитывать множество взаимосвязанных факторов, таких как аэродинамика, прочность материалов и экономические показатели. Использование генеративного мультиагентного ИИ позволяет ускорить процесс проектирования, снизить затраты и повысить качество конечного продукта.

В докладе будут представлены примеры успешного применения генеративного мультиагентного ИИ в различных областях, включая оптимизацию конструкций и разработку эффективных инженерных систем. Особое внимание будет уделено методам интеграции физически информированного машинного обучения и генеративных моделей для описания сложных систем.

Представленные результаты подчеркивают потенциал инженерного ИИ как ключевого инструмента для трансформации подходов к проектированию и разработке в инженерии и физике.

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ ИСПРАВИТ ОШИБКИ В ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ И МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ ДАННЫХ?

Буряк А.К.

Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской Академии Наук, 119071, Москва, Ленинский проспект 31/4

Основная задача хромато-масс-спектрометрии (ХМС) это идентификация компонентов сложных смесей для случая известных соединений или "известных неизвестных", а для неизвестных соединений построение их структуры.

Искусственный интеллект (ИИ) получил в настоящее время широкое распространение в масс-спектрометрии и хроматографии в первую очередь для предсказания индексов удерживания (ИУ) и масс-спектров (МС).

Обширные и надежные базы данных, содержащие масс-спектры и индексы удерживания различных соединений, составляют основу успешного применения методов искусственного интеллекта для идентификации компонентов сложных смесей органических соединений, в том числе изомерных. В случае идентификации изомерных соединений хроматографическое удерживание (ИУ) часто оказываются более информативны, чем масс-спектры. Если сравнить масс-спектральные и хроматографические базы данных, то бросается в глаза существенно меньшее количество индексов, по сравнению с масс-спектрами. Причина этого в большом разнообразии неподвижных жидких фаз, применяемых в газовой хроматографии и огромном разнообразии сорбентов и подвижных фаз в жидкостной. Наиболее распространены спектры ионизации электронами при стыковке с газовым хроматографом и электрораспыления при стыковке с жидкостным. Размеры коммерчески доступных библиотек составляют сотни тысяч спектров, что очень мало, по сравнению с известным количеством соединений, около 200 миллионов. В связи с этим большое значение имеет создание баз данных, содержащих предсказанные индексы удерживания и масс-спектры.

Огромное значение имеет оценка надежности используемых хроматографических и масс-спектральных данных. Методы искусственного интеллекта могут использоваться и для оценки качества экспериментальных работ. В докладе будут представлены примеры использования методов ИИ для разработки и оптимизации методов анализа, детектирования и разделения перекрывающихся пиков, предсказания удерживания и масс-спектров, коррекции аналитических сигналов, идентификации соединений и контроля качества эксперимента.

ИНСТРУМЕНТАРИЙ ИИ ДЛЯ ОБРАБОТКИ, АНАЛИЗА И КЛАССИФИКАЦИИ СПЕКТРОВ ГКР В БИОАНАЛИТИКЕ

**Курочкин И.Н.,^а Евтушенко Е.Г.,^а
Васильева А.Д.,^а Алиев Р.О.,^а Курочкин И.И.,^б Богинская И.А.,^в
Рыжиков И.А.,^{в,г} Мерзликин А.М.,^в Лагарьков А.Н.,^в
Крылов В.Б.,^д Нифантьев Н.Э.^д**

^аИнститут биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской Академии Наук,
119334, Москва, улица Косыгина 4

^б Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича Российской Академии
Наук, 127051, Москва, Б. Калетный пер., д.19, стр. 1

^в Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской Академии
Наук, 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр.6

^г Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва

^д Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47

Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния света (ГКР) позволяет проводить сверхчувствительную молекулярную идентификацию. Идентификация целевых соединений и построение классифицирующих моделей с использованием ГКР прочно связаны с применением методов многопараметрической статистики, машинного обучения и другого инструментария ИИ. Интерпретация спектральных данных является серьёзной проблемой, возникающей из-за перекрытия полос, шумовых помех и изменчивости интенсивности сигнала в сложных смесях. В докладе рассмотрены методы коррекции базовой линии, сглаживание, шумоподавление, нормализация, спектральное выравнивание, обнаружение аномалий и отбраковки некорректных спектров. Проведение кластерного анализа, детализация спектров и построение классифицирующих моделей рассмотрено на примере использования ГКР для высокочувствительного иммуноанализа при определении кардиомаркеров и грибковых инфекций, оценки устойчивости бактериальных клеток к действию лекарственных препаратов, определения транскриптов при развитии онкологических заболеваний, идентификации вирусных частиц и белковых молекул.

Работа выполнена в рамках проведения фундаментальных научных исследований по Государственным заданиям с кодами научных тем FFZZ-2024-0004, FFZR-2024-0005, FFUR-2024-0010.

MICROSCAN — НОВАЯ БАЗА ИК-СПЕКТРОВ ЧАСТИЦ МИКРОПЛАСТИКА ДЛЯ РАЗРАБОТКИ И ТЕСТИРОВАНИЯ МОДЕЛЕЙ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

**Люлин С.В.,^{a,b} Жданов И.А.,^{a,b} Волгин И.В.,^a
Власова Е.Н.,^a Ананьев В.В.,^{a,b} Баранов А.С.,^a
Земнухов Е.С.,^{a,b} Карпулевич Е.А.^{a,b}**

^a*Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, 173003,
Великий Новгород, ул. Большая Санкт-Петербургская, д. 41*

^b*Институт океанологии им. П.П. Ширшова Российской академии наук, 117997, г.
Москва, Нахимовский проспект, д. 36*

^b*Институт системного программирования
им. В.П. Иванникова Российской академии наук,
109004, Москва, ул. Александра Солженицына, д. 25*

В данной работе представлена новая общедоступная спектральная база данных MICROSCAN (MICROplastics Spectroscopy for Contamination ANalysis)¹, содержащая 2010 ATR-FTIR спектров частиц микропластика из полиэтилена (ПЭ), полипропилена (ПП), полистирола (ПС), а также сополимеров ПЭ/ПП. При создании базы MICROSCAN применены несколько подходов к аннотированию данных - метод спектрального соответствия, экспертный анализ и сверточная нейронная сеть CNN1D из пакета mPSAT². Совместное применение данных методов позволило тщательно разметить базу данных MICROSCAN, а также оценить эффективность классификации микропластика с помощью нейронной сети. Помимо этого, разработана новая модель классификации спектров на базе архитектуры DenseNet-121. Данная модель является более устойчивой по сравнению с CNN1D благодаря применению специально разработанной адаптивной процедуры предобработки данных (автоматическая коррекция базовой линии и улучшенная схема генерации синтетических спектров). Результаты тестирования модели на базе MICROSCAN показывают стабильно высокие значения метрик качества классификации спектров.

Литература

1. <https://doi.org/10.5281/zenodo.15277130>
2. Liu Y., Yao W., Qin F., Zhou L., Zheng Y. *Environ. Sci. Technol.* 2023, **57**, 6656.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2025-016, МегаГрант).

СИНЕРГИЯ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ И МЕТОДОВ ИИ В МЕДИЦИНСКОЙ ДИАГНОСТИКЕ

**Мерзликин А.М.,^а Богинская И.А.,^а
Сафиуллин Р.Р.,^а Звягина Ю.Ю.,^а Седова М.В.,^а Рыжиков И.А.,^а
Васильева А.Д.,^б Курочкин И.Н.,^б Крылов В.Б.,^в
Нифантьев Н.Э.^в, Лагарьков А.Н.^а**

^а*Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской Академии Наук, 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 6*

^б*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской Академии Наук, 119334, Москва, улица Косыгина 4*

^в*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47*

Большой импульс к использованию комбинационного рассеяния в аналитической химии придало открытие в 1974 году явления гигантского комбинационного рассеяния – ГКР, выражющееся в усилении на несколько порядков интенсивности сигнала комбинационного рассеяния на поверхности металла. В настоящее время ГКР является высокочувствительным и удобным методом для диагностики различных молекулярных анализаторов *in vitro*.

Однако следствием высокой чувствительности спектроскопии ГКР является огромное количество линий в спектре при исследовании сложных соединений. В этом случае с задачей обработки спектральной информации можно справиться, только используя методы распознавания образов.

На основе разработанных алгоритмов удалось решить ряд задач по определению некоторых клинически значимых анализаторов:

- разработан метод определения гликированного альбумина в плазме крови;
- предложен безмаркерный метод регистрации и определения ряда вирусов;
- предложен метод определения кардиологических рисков на примере фибрилляции предсердий на основе ГКР спектров плазмы крови пациентов;
- разработан метод разделения спектров ГКР олигосахаридов, являющихся маркерами грибковых заболеваний человека.

Работа выполнена в рамках проведения фундаментальных научных исследований по Государственным заданиям с кодами научных тем FFZZ-2024-0004, FFZR-2024-0005, FFUR-2024-0010.

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ЛИТИЕВЫХ И ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ: КАК ML РАСШИРЯЕТ ВОЗМОЖНОСТИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

**Тупикина Е.Ю., Капланский М.В.,
Верхов В.В., Мешалкин С.А.**

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

Невалентные взаимодействия играют важную роль в формировании структуры и реакционной способности разнообразных молекулярных систем – от катализических комплексов до биомолекул и материалов с заданными свойствами. В докладе обсуждаются два примера таких связей: литиевые связи в ассоциатах металлорганических соединений и системы с кооперативно взаимодействующими водородными связями.

Литийорганические соединения – важная категория металлорганики, широко применяемая в современной химии благодаря высокой нуклеофильной активности. Эти соединения склонны образовывать ассоциаты с особыми структурными и реакционными свойствами. Понимание электронного строения связи $C\cdots Li$ и динамики ассоциатов важно для оптимизации синтеза и контроля реакционной селективности. Важной задачей остается и определение набора параметров, корректно описывающих многообразное электронное строение таких связей.

Кооперативные водородные связи определяют стабильность и функционирование биологических макромолекул. Эффекты кооперативности – взаимное усиление или ослабление соседних связей – существенно модифицируют свойства систем их содержащих, однако количественное описание этого явления остается сложной задачей.

Современные *ab initio* квантово-химические методы дают глубокое физико-химическое понимание электронного строения связей и их динамики, но их вычислительные потребности ограничивают размер систем и длительность моделирования. Машинное обучение может комплементарно дополнять эти методы, ускоряя анализ данных, выявляя информативные дескрипторы и обеспечивая расширение масштабов моделирования без потери физической ясности.

В докладе представлены примеры применения методов ML к исследованию литиевых связей и кооперативных водородных связей. Рассматриваются возможности и ограничения интеграции классических методов и ML для молекулярного моделирования невалентных взаимодействий.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-73-10155.

НЕЙРОСЕТЕВОЙ ПОДХОД ПРИ ПОИСКЕ НАУЧНОЙ ИНФОРМАЦИИ

Хохлов А.Р.^{a,b}

*^aМосковский государственный университет им. М.В.Ломоносова,
119991 г.Москва, Ленинские горы, д.1*

*^bИнститут элементоорганических соединений РАН им. А.Н.Несмеянова
119334 г.Москва, ул. Вавилова, д.28, стр.1*

В докладе будет обсуждена практика использования нейросетевого подхода в научном поиске для извлечения полезной информации из «моря» разнообразных сведений, доступных в электронном формате. В частности, будут рассмотрены достоинства и недостатки применения больших языковых моделей в научной работе. Будут представлены результаты совместного проекта МГУ и Научной электронной библиотеки (elibrary) по поиску тематически похожих статей к данной публикации или данному фрагменту текста, по идентификации автора с учетом тематической близости статьи к другим его публикациям, по автоматической рубрикации публикаций, по подбору рецензентов и экспертов. Будут обсуждены и другие имеющиеся российские и международные разработки, связанные с нейросетевым поиском научной информации.

ИНТЕРПРЕТИРУЕМЫЙ АІ В ИССЛЕДОВАНИЯХ СЛОЖНЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

**Шмидт А.Ф., Ларина Е.В.,
Курохтина А.А., Лагода Н.А.**

*Иркутский государственный университет,
664003, Иркутск, К. Маркса 1*

Сложившаяся на сегодняшний день практика использования методов машинного обучения (МО) в исследованиях катализитических реакций в основном сводится к созданию предсказательных моделей с целью определения условий для достижения оптимальных значений количественных характеристик реакции. Создаваемые при этом модели являются эмпирическими математическими моделями, в которых математические связи между входными и выходными параметрами описываемого процесса никак не соотносятся с фундаментальными теоретическими представлениями. Это приводит к невозможности интерпретации результатов МО традиционными методами, подходящими для анализа теоретических моделей. Число примеров интерпретируемых моделей МО крайне ограничено.

С использованием больших наборов данных для Pd-катализируемых реакций кросс-сочетания Мицороки-Хека и Сузуки-Мияуры, спецификой которых являлось наличие информации о динамике процессов, были созданы наборы датасетов, различным образом учитывающих информацию о дифференциальных и интегральных характеристиках процессов (скорость, дифференциальная и интегральная селективность, выход продукта, время реакции). Созданные датасеты были использованы для обучения ряда моделей (решающие деревья, их ансамбли и нейронные сети), продемонстрировавших хорошую предсказательную способность в отношении кинетики реакций. Для интерпретации результатов работы моделей предложен подход, базирующийся на известном методе аблляции, при этом, однако, позволяющий однозначно определять комбинации наиболее значимых параметров моделей (природа и количества реагирующих веществ, катализатора, добавок, растворителя, типа атмосферы в реакторе, скорости перемешивания), а также выявлять и учитывать эффекты взаимного влияния параметров на их относительную значимость. В докладе обсуждаются новые данные о фундаментальных закономерностях исследуемых реакций, выявленные в результате интерпретации работы моделей, обученных на больших наборах данных, получение которых было невозможным на основании анализа «узких» экспериментальных серий.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-23-00382.



ПРИГЛАШЕННЫЕ ДОКЛАДЫ

НЕЙРОННЫЕ СЕТИ В РАЗРАБОТКЕ ГЕНОМА ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

**Абруков В.С.,^а Панг Вэйцян,^б
Ануфриева Д.А.,^а Сапёров Д.А.^а**

^аЧувашский государственный университет,
428015, Чебоксары, Московский пр., 15

^бСианьский научно-исследовательский институт современной химии,
710065, Сиань Китай

Мы представляем Геном высокоэнергетических материалов (ГВЭМ) - платформу, использующую нейронные сети (НС) для моделирования процессов горения и детонации высокоэнергетических материалов (ВЭМ).

ГВЭМ позволяет решать прямые (прогнозирование характеристик горения и детонации ВЭМ) и обратные (проектирование состава ВЭМ) задачи, проводить виртуальные эксперименты и нивелировать случайные погрешности реальных экспериментальных данных. ГВЭМ обеспечивает снижение затрат на эксперименты и ускорение разработки новых ВЭМ и материалов в целом¹.

Получены многофакторные вычислительные модели горения и детонации различных ВЭМ, демонстрирующие возможности НС в науке о ВЭМ^{2,3}. Использовались «простые» НС прямого распространения с одним внутренним (скрытым) слоем.

Разработан метод генерации «идеальных экспериментальных данных» на основе зашумленных реальных наборов данных, который может быть применен как в науке о ВЭМ, так и в различных областях экспериментальной химии. Используются три последовательно применяемые НС для аппроксимации реальных экспериментальных данных. Среднеквадратичная ошибка третьей нейросетевой модели обычно не превышает 10⁻⁵.

Предлагается новый способ оценки качества НС моделей – степень гладкости зависимостей, генерируемых с помощью НС.

Литература

1. Kalil T., Wadia C. Materials Genome Initiative for Global Competitiveness. A whitepaper. — Washington, D.C. 20502: 2011. — June 24. — URL:
https://www.mgi.gov/sites/mgi/files/materials_genome_initiative-final.pdf
2. Pang, W.; Abrukov, V.; Anufrieva, D.; Chen, D. Burning Rate Prediction of Solid Rocket Propellant (SRP) with High-Energy Materials Genome (HEMG). Crystals 2023, 13, 237.
<https://doi.org/10.3390/crust13020237> and
https://www.researchgate.net/publication/367412407_Abrukov-Pang-25-01-23
3. Abrukov V, Pang W, Anufrieva D. Methodology for Studying Combustion of Solid Rocket Propellants using Artificial Neural Networks. Ann Adv Chem. 2024; 8: 001-007i

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ «ЭЛЕКТРОННОГО НОСА»

**Агина Е.В.,^{a,б} Абрамов А.А.,^а Пойманова Е.В.,^а
Пойманов В.Д.,^а Труль А.А.^а**

^aИнститут синтетических полимерных материалов им. Н.С.Ениколопова Российской Академии Наук, 119991, Москва, Профсоюзная ул., д.70,

^бФакультет фундаментальной физико-химической инженерии МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, МГУ имени М.В. Ломоносова, дом 1, стр. 51

Электронный нос — это устройство, способное обнаруживать и распознавать запахи с помощью массива полу-селективных сенсоров, дополненного методами искусственного интеллекта, в т.ч. машинного обучения, широко востребованное в здравоохранении, промышленной безопасности, криминалистике, а также для мониторинга окружающей среды и выявления качества продуктов питания, включая их раннюю порчу.

Нами разработан подход к созданию портативных систем класса «электронный нос» на основе различных полупроводниковых сенсоров и выявлено влияние метода машинного обучения, в т.ч. величины обучающей выборки и числа дифференцируемых параметров на достоверность классификации. Продемонстрированы практические применения, в т.ч. для анализа состава атмосферы¹, медицинской диагностики по выдыхаемому воздуху² и для поиска разных типов анализаторов в составе жидкого, в т.ч. биологических сред³. Использование разработанных алгоритмов позволило достичь в слепых тестах чувствительности и специфичности 100% и 90% для COVID-19 и 83 и 92% для туберкулеза, соответственно.

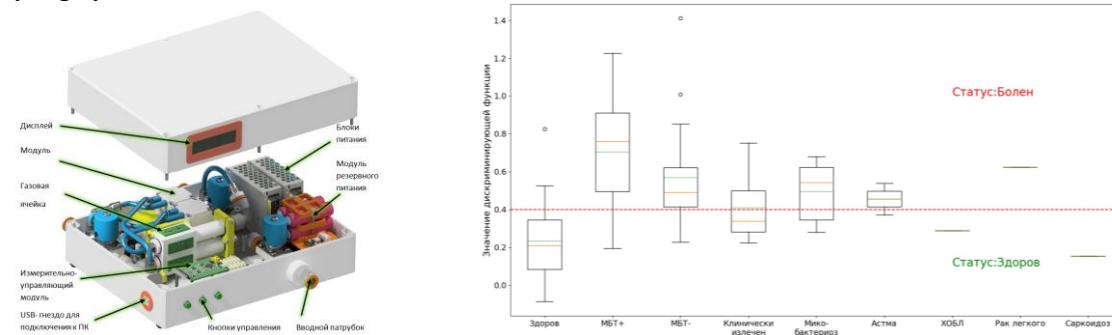


Рисунок 1. «Электронный нос» на основе массива металлооксидных сенсоров для диагностики по выдыхаемому воздуху и диаграмма размаха значений функции дискриминации для разных категорий участников при диагностике туберкулеза

Литература

1. Anisimov D. S., Chekusova V. P. et al, *Sci Rep*, 2021. 11(1), 10683
2. Пойманова Е.Ю., Абрамов А.А. и др. *Лабораторная служба*, 2024, 13 (4), 12–20.
3. E.Yu. Poimanova, E.A. Kretova et al, *J Mater Chem B*, 2025, 13, 4681 - 4692

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки (тема FFSM-2025-0001).

ДЕСКРИПТОРЫ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ

Александров Е.В.

МГТУ им. Н. Э. Баумана,
105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д.5, стр.1

Металл-органические координационные полимеры (МОКП) относятся к мягким материалам. Анизотропия механических свойств напрямую коррелирует с ориентацией линкеров и формой полостей.¹ В развитие этой тематики мы провели *ab initio* моделирование для перовскитоподобных МОКП $C_3H_8N[Zn(HCO_2)_3]$ ($C_3H_8N^+$ = катион азетидиния), $C_3H_8N[Mn(HCO_2)_3]$, $C_4H_{12}N[Mn(HCO_2)_3]$ ($C_4H_{12}N^+$ = катион тетраметиламмония), $N_2H_5[Mn(HCO_2)_3]$ ($N_2H_5^+$ = катион гидразиния), $N_2H_5[Zn(HCO_2)_3]$ и установили зависимости величины и анизотропии механических свойств от состава, геометрии каркаса и топологии водородных связей. Ранее предложенный алгоритм анализа подсеток² мы развили для поиска структурно-механической анизотропии, приводящей к возможности отшелушивания наночешуйек в 3032 МОКП (рис. 1).³ Сетки, учитывающие ионные взаимодействия и катенацию колец, позволяют расширить этот подход на материалы более сложного строения.^{4,5}

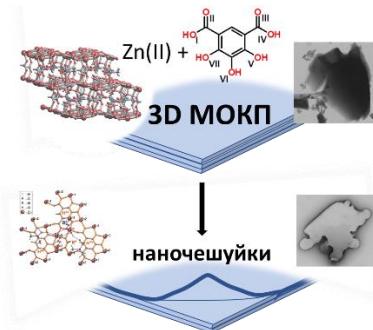


Рисунок 1. Схема отшелушивания наночешуйек от трех-периодического каркаса $[Zn_4(THIP)(HCO_2)_3(H_2O)_4]$

Литература

- Alexandrov E.V., Goltsev A.V., Eremin R.A., Blatov V.A. *J. Phys. Chem. C*, 2019, **123**, 24651.
- Alexandrov E.V., Yang Y., Liang L., Wang J., Blatov V.A. *CrystEngComm*, 2022, **24**, 2914.
- Zhang Y., Sokolov A.V., Vologzhanina A.V., Sudakova T.V., Wang J., Alexandrov E.V. *Mater. Chem. Phys.*, 2024, **325**, 129804.
- Zorina-Tikhonova E.N., Matiukhina A.K., Korlyukov A.A., Goloveshkin A.S., Babeshkin K.A., Alexandrov E.V., Efimov N.N., Kiskin M.A., Eremenko I.L. *CrystEngComm*, 2025, **27**, 3352.
- Kunitsyn A.Yu., Nekrasova N.A., Krivoshchapov N.V., Alexandrov E.V., Pavlov A.A., Medvedev M.G. *J. Chem. Phys.* 2025, **162**, 104114.

ЕСТЬ ЛИ БУДУЩЕЕ У ОПИСАТЕЛЬНОЙ КРИСТАЛЛОХИМИИ В ЭПОХУ «ЦИФРЫ»?

Ананьев И.В.

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова
Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 31*

Опираясь на кристаллографию, квантовую механику и физику твердого тела, кристаллохимия одной из первых химических наук начала вводить в практику исследований цифровую обработку данных. Тем не менее, еще в недавнем времени кристаллохимия, по крайней мере в описательной ее части, все еще предполагала ведущей роль человека в процессе познания.

В докладе будет кратко освещен круг цифровых методов, используемых в кристаллохимии на сегодняшний день. Основной акцент будет сделан на, по всей видимости, единственной составляющей кристаллохимических исследований, требующей интерпретации человеческим интеллектом, – объяснении стабильности и свойств кристаллической структуры. На основании полученных в группе автора результатов, будет продемонстрировано, что и эти задачи могут быть решены при помощи методов машинного обучения – в частности, для создания химически интерпретируемых экспрессных дескрипторов структуры и разработки основанных на них метрик устойчивости молекулярных кристаллов.

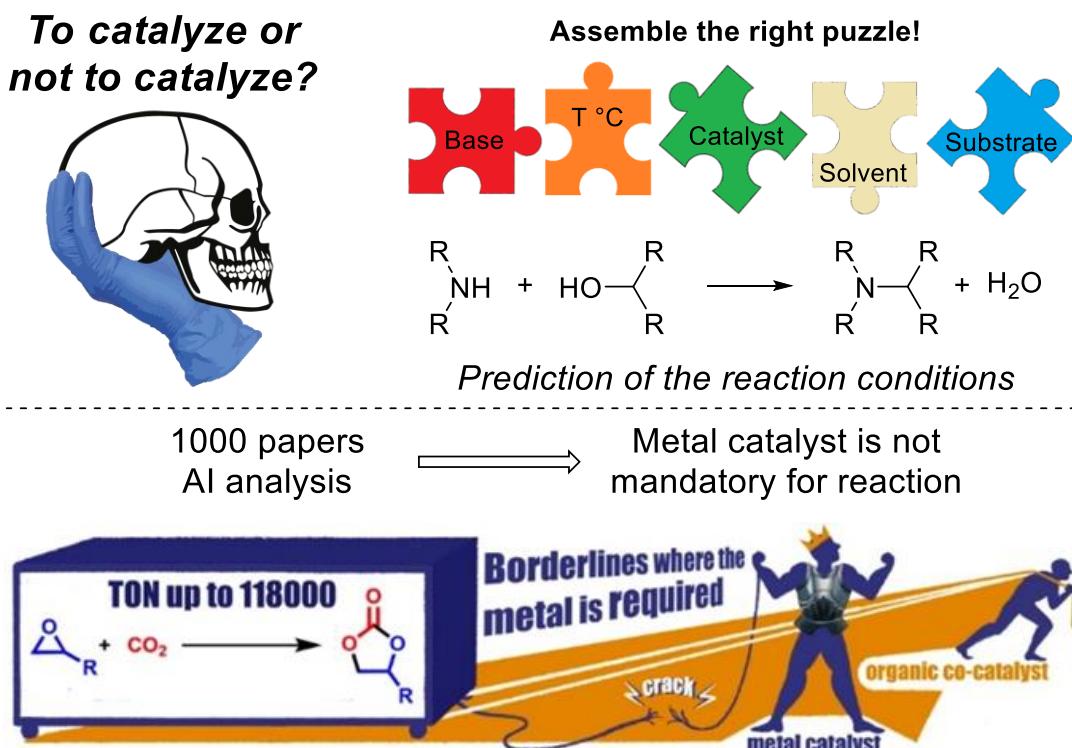
Несмотря на то, что роль цифровых методов кажется неоспоримой даже в таких человеко-ориентированных областях как объяснение химической структуры, цифровое решение более пригодной для автоматизации прикладной задачи кристаллохимии – инженерии кристаллов с заданными свойствами – существенно осложняется отсутствием пригодных для тренировки моделей наборов данных. На примере высокоэнергетических материалов будет показано, что некоторые важные с практической точки зрения депонируемые свойства не могут быть корректно «оцифрованы» в силу отсутствия стандартизации методик их измерения, экспериментальных погрешностей и, более того, отсутствия однозначного понимания физики процесса.

АНАЛИЗ ЛИТЕРАТУРНЫХ ДАННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИИ – ЧТО МОЖЕТ ПОЙТИ НЕ ТАК?

**Афанасьев О.И., Смирнов И.В., Козлов А.С.,
Бирюков К.О., Подъячева Е.С., Чусов Д.А.**

Институт Элементоорганических соединений им. А.Н. Несмиянова Российской Академии Наук, г. Москва, ул. Вавилова, 28с1

Количество экспериментальных данных, еженедельно публикуемых в научной литературе, растет экспоненциально. В случае популярных направлений нередка ситуация, когда одной и той же тематике оказываются посвящены тысячи работ, и ручной анализ такого объема данных уже становится невозможным. В данном случае на помощь приходят ИИ-алгоритмы, которые позволяют комплексно проанализировать заданную область, выявить тренды в ней и найти недоисследованные направления. Однако на пути такого анализа стоит высокая зашумленность химических данных, которая может приводить к ложным выводам. В данном докладе будут рассмотрены два примера такого анализа: реакция аминирования спиртов по механизму автопереноса водорода и реакция синтеза циклических карбонатов из эпоксидов и CO₂.



Литература

1. Podyacheva E.S., Afanasyev O. I. et al. *ACS Catal.* 2022, **12**, 7142.
2. Kozlov A. S., Afanasyev O. I., Chusov D., *J. Catal.* 2022, **413**, 1070.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-43-00096.

ХИМИЯ БЕЗ ЧЕЛОВЕКА: ОТ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ ДО ПРЕДСКАЗАНИЯ РЕАКЦИЙ

Бойко Д.А., Анаников В.П.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47*

В эпоху, когда экспериментальные химические данные накапливаются с огромной скоростью и превышают возможности классической обработки, возникает принципиально новый подход: автоматизация экспериментов, массовое накопление и аналитика с минимальным участием человека. В данной работе мы представляем обзор и перспективы преобразования химии посредством интеграции масс-спектрометрии высокого разрешения и современных методов машинного обучения. Мы обсуждаем следующие ключевые аспекты: (i) как автоматизированная масс-спектрометрия становится источником данных для моделей, (ii) каким образом алгоритмы предсказывают результативность реакции и направление трансформаций, и (iii) как концепция “химии без человека” — то есть минимального ручного вмешательства — может трансформировать процессы открытия реакций и оптимизации синтеза. В заключение рассматриваются вызовы: стандартизация данных, интерпретируемость моделей, масштабируемость высокопроизводительных экспериментов и внедрение систем-копилотов для химиков. Это направление открывает путь к автономным лабораториям, где роль человека переходит от первичного эксперимента к постановке задач и проверке гипотез.

МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПОИСКА И КЛАССИФИКАЦИИ УПОРЯДОЧЕННЫХ СТРУКТУР В САМООРГАНИЗУЮЩИХСЯ ПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМАХ

**Митьковский Д.А., Белкина К.А.,
Глаголева А.А., Лазутин А.А.,
Буглаков А.И., Василевская В.В.**

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмейнова РАН,
119991 Москва ул. Вавилова 28*

В докладе будут представлены результаты применения нами методов активного обучения и инструментария искусственного интеллекта для исследования самоорганизующихся полимерных систем, анализа их морфологических и конформационных свойств, построения диаграмм состояния.

Мы обсудим особенности самоорганизации слоев амфи菲尔ных макромолекул, привитых на сферические наночастицы, и формирующих в селективных растворителях морфологии, соответствующие минимальным полным вложенными поверхностям, отвечающим соотношениям Вейерштрасса; специфику самоорганизации амфи菲尔ных блок-сополимеров из клубкового и гребнеобразного блоков, способных формировать везикулы с радиальным и тангенциальным расположением блоков; влияние последовательности заряженных групп на конформационные свойства полiamфолитных макромолекул.

Мы представим результаты применения для анализа процессов самоорганизации различных методов активного обучения, среди которых сверточные нейронные сети, Байесовская оптимизация, вероятностные модели поиска посредством топологического анализа структур.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 19-73-20104.

ПРОГРАММА SMOKERAND ДЛЯ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ГЕНЕРАТОРОВ ПСЕВДОСЛУЧАЙНЫХ ЧИСЕЛ ДЛЯ НАУЧНЫХ И ИНЖЕНЕРНЫХ РАСЧЁТОВ

Восков А.Л.

*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова
119991, Москва, Ленинские Горы, д.1, стр. 3*

Генераторы псевдослучайных чисел (ГПСЧ) широко применяются в методе Монте-Карло, молекулярной динамике, нелинейной оптимизации, рандомизации выборок и т. п. Для контроля их качества обычно используются такие наборы статистических тестов, как TestU01¹ и PractRand², каждый из них имеет свои достоинства и недостатки. Цель работы – создание нового, более сбалансированного набора тестов.

Программа SmokeRand тестирует 32 и 64-битные ГПСЧ, написана на языке Си, поддерживает многопроцессорность. Генераторы могут подключаться как через потоки ввода/вывода, так и как компилируемые плагины. Реализованы частотные тесты, тест промежутков между днями рождения, критерии конфликтов и интервалов, тесты на ранг двоичной матрицы и линейную сложность, тест «модель Изинга» и др. Их можно группировать в наборы (батареи), по умолчанию определены наборы express, brief, default и full, использующие от 64 МиБ до 2 ТиБ данных соответственно. После их прохождения генератору автоматически ставится эвристическая оценка от 0 («очень плохо») до 4 («хорошо»).

В работе были выявлены не описанные в литературе дефекты в 64-битных и 128-битных линейных конгруэнтных генераторах (LCG), аддитивных генераторах Фибоначчи с запаздываниями. Тест «парадокс дней рождения» обнаруживает отсутствие повторов в выводе ГПСЧ на основе 64-битных счетчиков (SplitMix, Philox2x32, DES и др.). Также SmokeRand детектирует не выявляемые TestU01 артефакты в младших битах генераторов TinyMT, xoroshiro128+ и др. Примеры качественных ГПСЧ, прошедших все реализованные в программе тесты, включают нелинейные (SFC64, gjrand64) и комбинированные (KISS99, PCG, xoroshiro128++) генераторы, отдельные LCG (RANLUX++), а также ГПСЧ на основе счетчиков (AES, ChaCha12, Speck128, Philox4x64, ThreeFry4x64).

Литература

1. L'Ecuyer P., Simard R. *ACM Trans. Math. Software*, 2007, **33**, ID 22.
2. Doty-Humphrey C. PractRand Test Suite. <https://pracrand.sourceforge.net/>

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова, регистрационный номер 121031300039-1.

БИМОДАЛЬНЫЙ ТРАНСФОРМЕР ДЛЯ АВТОМАТИЧЕСКОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ СПЕКТРОВ ЯМР

**Злобин И.С.^a, Беспалов И.А.^b, Шандыбо М.А.^a
Рекут Н.А.^c, Афанасьев О.И.^c, Новиков В.В.^d**

*^aИнститут общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект 31*

*^bИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН,
119991, Москва, Ленинский пр., 47*

*^cИнститут элементоорганических соединений им. А.Н. Несмейнова РАН,
119334, Москва, ул. Вавилова 28*

^dUniversitat de Barcelona, 08007, Barcelona, Gran Via de les Corts Catalanes

Определение молекулярной структуры по одномерным ^1H - и ^{13}C -ЯМР-спектрам остаётся сложной задачей, зачастую требующей значительных экспертных усилий и дополнительных спектроскопических данных. Несмотря на то, что интерес к автоматизации интерпретации спектров ЯМР с каждым годом продолжает возрастать, инструментальные шумы, перекрытие сигналов и неполнота данных ограничивают применимость многих современных подходов машинного обучения¹. Существующие методы машинного обучения, как правило, обучаются либо на небольших наборах экспериментальных данных с ограниченным химическим разнообразием, либо на теоретически рассчитанных спектрах, недостаточно точно отражающих экспериментальную реальность².

В настоящей работе мы предлагаем архитектуру на основе трансформера, обученную на крупнейшем корпусе экспериментальных ЯМР-спектров **OdanChem**, автоматически извлечённых из научной литературы. Для обработки двух типов спектральных данных используется бимодальная архитектура трансформера, преобразующая выходные списки сигналов в SMILES-представление молекулы. Доля полных совпадений сгенерированной моделью молекулы с эталонной достигает 50 %, что значительно превосходит результаты ранее опубликованных подходов, особенно в условиях отсутствия априорной информации о молекуле (например, ограничений на размер, наличие функциональных групп или фрагментов). Кроме того, модель демонстрирует устойчивую работу для соединений с высоким молекулярным весом, множественными циклами и гетероатомами, включая фтор- и азотсодержащие структуры.

Литература

1. Liu S., Cole J. M., *J. Chem. Inf. Model.* 2025, **65**, 8435–8447
2. Hu F., Chen M. S., Rotskoff G.M., Kanan M.W., Markland T.E., *ACS Cent. Sci.* 2024, **10**, 2162–2170

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Кирсанов Д.О.

*Институт химии Санкт-Петербургского государственного университета, 198504,
Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский пр., д. 26*

Отдельные методы машинного обучения (МО) успешно применяются в аналитической химии с середины 70-х годов прошлого века и дали рождение специализированной области исследований – хемометрике. Задолго до стремительной популяризации различных приложений искусственного интеллекта, произошедшей за последние несколько лет, химики-аналитики активно использовали многие алгоритмы снижения размерности данных, методы многомерной классификации и методы многомерной регрессии в целом ряде практических задач¹. В последние годы репертуар методов МО, используемых аналитиками, стремительно расширился, выросло и число разнообразных применений таких методов.

В докладе будет приведен обзор наиболее типичных примеров использования МО в аналитической химии: извлечение количественной информации о химическом составе из сложных, зашумленных и перекрывающихся спектров; прогнозирование интегральных характеристик качества образцов (например, вкусовых) на основе отклика химических сенсоров; онлайн определение состава и классификация сложных технологических растворов, биологических проб, объектов окружающей среды; прогнозирование свойств материалов для аналитической химии на основе подходов QSPR. Будет обсуждена специфика применения МО в аналитической химии: необходимость работы с малыми выборками образцов, осмысленный выбор подходов к валидации моделей МО и др.²

Литература

1. Comprehensive Chemometrics, in 4 volumes. – Elsevier B.V., Netherlands, 2020. - Иванов И.И., Петров П.П. Электрохимия, 2006, **42**, 774.
2. Debus B., Parastar H., Harrington P., Kirsanov D., Trends in Analytical Chemistry, 2021, **145**, 116459.

КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ТЕРМОХИМИИ И КИНЕТИКИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ РЕАКЦИЙ: СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ И ИХ ОГРАНИЧЕНИЯ

**Киселев В.Г.^{a,b,*} Мельников И.Н.,^b
Муравьев Н.В.,^b Пивкина А.Н.^b**

^a*Институт химической кинетики и горения СО РАН,
630090 Новосибирск, ул. Институтская, 3*

^b*Новосибирский Государственный Университет,
630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 1*

^b*ФИЦ ХФ РАН им. Н.Н. Семенова,
119991 Москва, ул. Косыгина, 4*

Достоверные расчетные данные о термохимии (прежде всего, энталпии образования в газе и твердой фазе) и активационных барьерах элементарных реакций критически важны для прямого моделирования механизмов реакций и обучения нейросетей в различных процедурах анализа больших данных. В то же время, ввиду большой вычислительной сложности, высокоуровневые количественные *ab initio* расчеты были недоступны для большого количества важных соединений даже «среднего» размера молекул (40–50 неводородных атомов). Широко распространенные расчеты методами теории функционала плотности (DFT) зачастую не позволяют достичь универсальной «химической точности» (~1 ккал/моль).

В настоящей работе мы представляем новые теоретические данные для термохимии и кинетики разложения важных энергетических материалов (ЭМ), полученных с использованием новых локальных модификаций методов связанных кластеров (DLPNO-CCSD(T)). Это делает возможным высокоточные расчеты циклических и каркасных энергетических нитро- и нитраминных ЭМ, например, CL-20 и октанитрокубана (ONC). Для данных соединений полученные нами значения энергий связи по крайней мере на 10 ккал/моль точнее, чем известные в литературе до сих пор. Как правило, DLPNO-CCSD(T) позволяет за разумное время выполнять рутинные расчеты методом связанных кластеров с базисными наборами QZ-качества для молекул ЭМ, состоящих из ~30–40 неводородных атомов. В более общей формулировке, данный подход предлагает новый уровень точности вычислительной термохимии и кинетики для важных ЭМ.

Кроме того, мы обсудим предложенную нами новую методику определения энталпии образования ЭМ в твердом состоянии, состоящая в комбинации высокоточного газофазного расчета (W1-F12) и экспериментальной энталпии сублимации (TGA).

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 22-13-00077-П.

ОТКРЫТИЕ НОВЫХ РЕАКЦИЙ С ПОМОЩЬЮ СИСТЕМЫ ПОИСКА В БОЛЬШОМ НАБОРЕ МАСС- СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ ДАННЫХ

**Козлов К.С., Бойко Д.А., Бурыкина Ю.В.,
Ильюшенкова В.В., Костюкович А.Ю., Патиль Е.Д., Анаников В.П.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47*

Масс-спектрометрия высокого разрешения – чувствительный, активно использующийся и высокоинформационный метод исследования протекания химических реакций. Проведение масс-спектрометрических экспериментов позволяет регистрировать побочные продукты, благодаря чему, становится возможным предполагать и подтверждать механизмы реакций. Каждый день в исследовательских институтах регистрируется, сохраняется, но часто не полностью интерпретируется, большое количество масс-спектров высокого разрешения. Таким образом, разработка систем поиска ионов в масс-спектрометрических данных может помочь проинтерпретировать большой ($> 22\,000$ спектров) набор информации, и найти ранее не известные побочные продукты, которые были зарегистрированы, но не проинтерпретированы.

В нашей работе¹ мы разработали и протестировали программную систему для автоматического поиска ионов в масс-спектрах высокого разрешения по заданной молекулярной формуле и заряду. Благодаря созданию алгоритмов интерпретации удалось обнаружить ранее не опубликованные побочные продукты в реакции Хека, катализируемой комплексами палладия с N-гетероциклическими карбенами (NHC) (Рисунок 1).

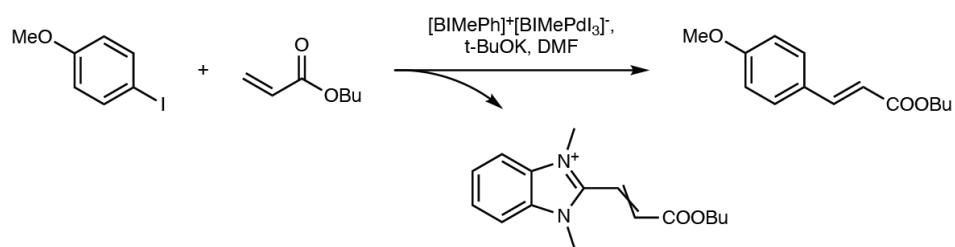


Рисунок 1. Масс-спектр продукта винил-NHC сочетания в реакции Хека, который был обнаружен с помощью системы масс-спектрометрического поиска.

Литература

Kozlov K.S., Boiko D.A., Burykina J.V., Ilyushenkova V.V., Kostyukovich A.Y., Patil E.D., Ananikov V.P. *Nat Commun*, 2025, **16**, 2587.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПРОТИВОРАКОВОЙ АКТИВНОСТИ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ НОВОЙ БАЗЫ ДАННЫХ METALCYTOTOXDB

**Краснов Л.В.,^а Маликов Д.И.,^{а,б} Киселева М.А.,^б
Ныхрикова Е.В.,^{а,б} Татарин С.В.,^б Беззубов С.И.^а**

^а*Институт общей и неорганической химии имени Н. С. Курнакова Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 31*

^б*Химический факультет, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3*

Комплексы переходных металлов представляют значительный интерес как потенциальные противоопухолевые агенты, однако их рациональный дизайн требует значительных временных и материальных затрат на экспериментальную оценку цитотоксичности.

В данной работе разработан подход для прогнозирования цитотоксичности металлокомплексов на основе новой базы данных MetalCytoToxDB, содержащий 26500 значений IC₅₀ для 7050 комплексов Ru, Ir, Rh, Re и Os против 754 клеточных линий из 1921 литературного источника¹.

Разработанные ML-модели позволяют классифицировать комплексы рутения и иридия по классу цитотоксичности с ROC-AUC = 0.81 и 0.73 соответственно. Разработанный подход позволяет существенно ускорить высокопроизводительный виртуальный скрининг новых металлокомплексов противоопухолевых агентов. MetalCytoToxDB доступна онлайн в виде веб-приложения: <https://biometaldb.streamlit.app/>.

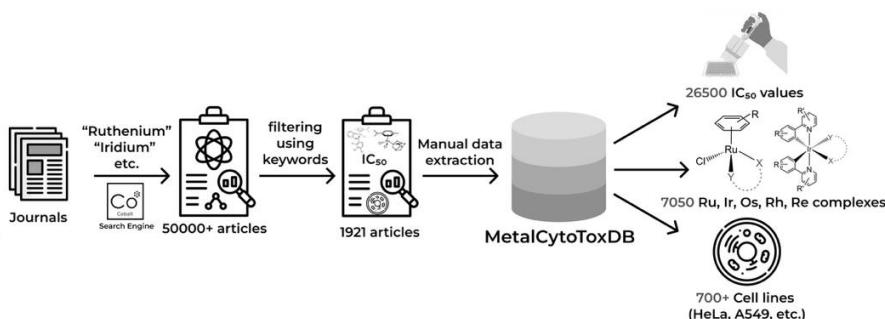


Рисунок 1. Алгоритм сбора базы MetalCytoToxDB.

Литература

1. Krasnov L. et al. Machine Learning for Anticancer Activity Prediction of Transition Metal Complexes. – 2025.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ИОНХ РАН 1021071612866-5-1.4.7.

ПРИЛОЖЕНИЯ И ПОДВОДНЫЕ КАМНИ ИИ В ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

Медведев М.Г.

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47

В настоящий момент искусственный интеллект (ИИ) уже активно используется на всех стадиях химического исследования (Рисунок 1). Однако, ограниченность данных в науке зачастую становится препятствием для создания надёжных моделей. В данном докладе мы рассмотрим особенности приложения ИИ к разным химическим задачам, его подводные камни – переобучение, data leakage и экстраполяцию –, а также шесть подходов к внедрению в модели ИИ научных знаний, которые позволяют существенно повысить надёжность модели в условиях недостатка данных.

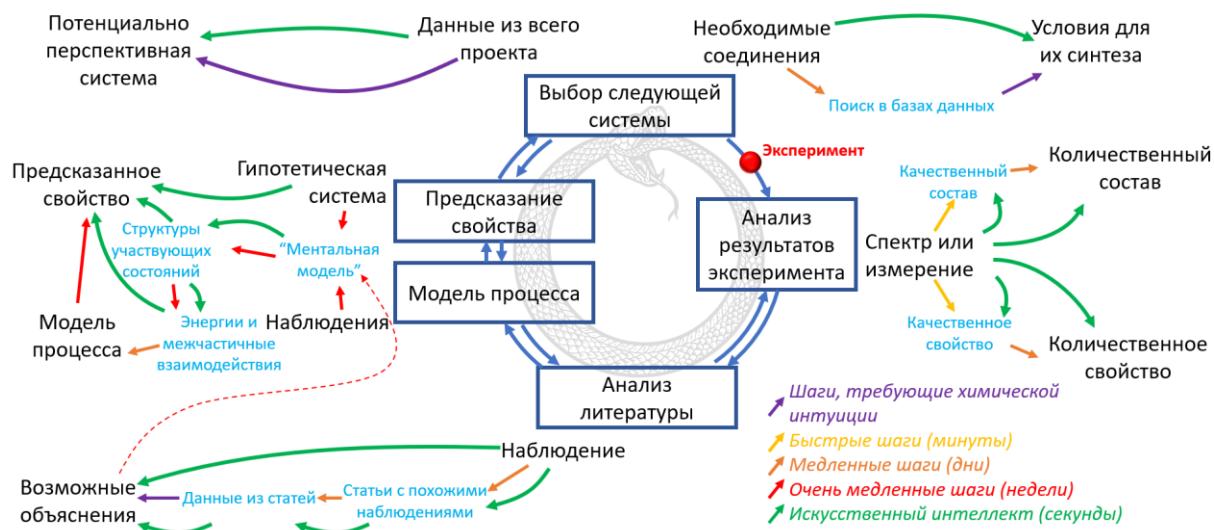


Рисунок 1. Приложения ИИ в химии

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ ДЛЯ ДИЗАЙНА НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Митрофанов А.А.^{a,б}

^a*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы 1-3*

^б*Институт Искусственного Интеллекта МГУ имени М.В. Ломоносова,
119192, Москва, Ломоносовский проспект 27к1*

Направленный дизайн с использованием инструментов искусственного интеллекта – стремительно развивающаяся область материаловедения. Разумное применение современных алгоритмов позволяет существенно сократить время и затраты на разработку новых материалов с заданными свойствами. Однако, особенности химических данных не позволяют использовать существующие методы ИИ в варианте «как есть», требуя их доработки и обучения.

В докладе будет рассмотрен полный цикл дизайна материала от сбора данных их очистки и построения предиктивных моделей, до решения оптимизационной задачи, генерации новых материалов, потенциально обладающих заданными свойствами, их синтеза и экспериментальной проверки моделей. Также будут рассматриваться особенности моделирования различных классов материалов, включая как неорганические или металлоганические кристаллические материалы, так и материалы без определенной кристаллической структуры.

Литература

1. Machine-learning-assisted search for functional materials over extended chemical space / V. Korolev, A. Mitrofanov, A. Eliseev, V. Tkachenko // *Materials Horizons*. — 2020, **7**, 2710-2718
2. Data-driven prediction of structures of metal–organic frameworks / E. I. Yakovenko, I. M. Nevolin, A. A. Chasovskikh, A.A. Mitrofanov, V.V. Korolev // *Journal of Chemical Information and Modeling*. — 2025, **65**, 4, 1718–1723.

ПРИМЕНЕНИЕ БОЛЬШИХ ЯЗЫКОВЫХ МОДЕЛЕЙ В ХИМИИ

Муравлева Е.А.

*Сколковский институт науки и технологий,
Большой бульвар 30/1, Москва, Россия*

ГЛУБОКОЕ МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ КАК ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ РУТИННОГО АНАЛИЗА ДАННЫХ МИКРОСКОПИИ

Нартова А.В.,^{a,б} Матвеев А.В,^б Окунев А.Г.^б

^a Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской Академии Наук, 630090, Новосибирск, Пр. Ак. Лаврентьева, 5

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

Нейронные сети (НС) нашли широкое применение в современной химии [1]. Интенсивно развивается направление анализа с применением НС изображений, полученных различными микроскопическими методами. Поиск и определение параметров различных объектов является рутинной задачей в самых разных областях науки и технологии. Автоматизация данного анализа – весьма актуальная проблема, одним из решений которой является платформа iOk (iok.nsu.ru), объединяющая веб-сервис ParticlesNN и Telegram-боты **DLgram** и **No Code ML** [2-5]. 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 предоставляются в виде таблиц, доступных для статистического анализа. Главным достоинством платформы является возможность самостоятельного обучения НС пользователями на своих изображениях, что делает платформу iOk универсальным инструментом рутинного анализа изображений. Сервисы находятся в свободном доступе, для их использования навыки программирования не требуются.

Литература

1. *Artificial Intelligence in Catalysis: Experimental and Computational Methodologies*, Ananikov, Polynski (Eds.), Wiley-VCH GmbH, Weinheim, Germany, 2025, ISBN: 978-3-527-35385-9.
2. Okunev A.G., Nartova A.V., Matveev A.V. *IEEE*. 2019, 0940-0943.
3. Nartova A.V., Mashukov M.Y., Astakhov R.R., Kudinov V.Y., Matveev A.V., Okunev A.G. *Catalysts*. 2022, **12(2)**, 135:1-13.
4. Nartova A.V., Matveev A.V., Mashukov M.Y., Belotserkovskii V.A., Sankova N.N., Kudinov V.Y., Okunev A.G. *Kinet. and Catal.* 2023, **64(4)**, 458–465.
5. Matveev A.V., Nartova A.V., Sankova N.N., Okunev A.G. *Microscopy Research and Technique*. 2024. **87(5)**, 991-998.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках госзадания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0032), при поддержке Программы Приоритет-2030, а также при поддержке Российского научного фонда (грант № 24-63-00037, <https://rscf.ru/project/24-63-00037/>) и ЦКП НЦИК.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ СБОРА ДАННЫХ В НАУЧНЫХ И ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ЗАДАЧАХ

Павлов А.А.^a, Злобин И.С.^{a,b}, Шандыбо М.А^{a,b},
Рекут Н.А.^c, Соловьев Ф.М.^d

*^aИнститут общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН
119071, Москва, Ленинский проспект 31*

*^bИнститут физической химии и электрохимии имени А. Н. Фрумкина РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4*

*^cИнститут элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,
119334, Москва, ул. Вавилова 28*

*^dИП Соловьев Федор Михайлович,
142204, Московская обл., Серпухов, ул. Крюкова, 6, 68*

Одно из наиболее узких мест на пути практического применения машинного обучения для решения научных и производственных химических задач состоит в недостаточности верифицированных, систематизированных и релевантных данных для обучения моделей.

В докладе будет обсуждаться новый фреймворк для автоматического извлечения из статей, патентов и справочников информации по двум направлениям: магнитные свойства комплексов РЗМ и свойства экстрагентов РЗМ. Сформированные таким образом базы данных не только обладают собственной ценностью, но и могут служить источником информации для обучения предиктивных моделей. Так, открытых и полных баз данных экстрагентов РЗМ практически не существует, что является препятствием для внедрения новых подходов к экстракции в промышленности. Что касается базы данных по магнитным свойствам комплексов РЗМ, она позволит выявить новые корреляции «структура – свойство» для мономолекулярных магнетиков и позволит избегать дорогих расчетов CASSCF во многих случаях.

Также в докладе будет обсуждаться применения машинного обучения для автоматизации химических процессов на производстве водорода и аммиака, что позволило повысить выход продукта на 5-8%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение о предоставлении гранта №075-15-2025-584).

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ СПЕКТРОВ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ БЕЛКОВ НА ОСНОВЕ ФИЗИЧЕСКИ ОБОСНОВАННЫХ ДЕСКРИПТОРОВ

Поляков И.В., Степанюк Р.А., Хренова М.Г.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3*

Флуоресцентные белки – генетически кодируемые биомаркеры¹, охватывающие почти весь видимый спектр света, самым известным представителем которых является зелёный флуоресцентный белок (GFP). Существуют семейства зеленых, синих, голубых, желтых, оранжевых и красных GFP-подобных белков, обладающих характерной структурой β -бочонка с хромофором в центре, который образуется автокаталитически из трипептида. Спираль, идущая вдоль центральной оси ствола, прерывается хромофором, который находится вблизи геометрического центра белка и образуется автокаталитически из трипептида (Ser65, Tyr66 и Gly67 в случае GFP).

В настоящий момент идёт разработка инструментов для предсказания свойств флуоресцентных белков² и даже дизайна новых вариантов с заданными характеристиками³. В данной работе мы описываем предсказание оптических спектров различных семейств мутантов GFP на основе траекторий, полученных в рамках молекулярной динамики (МД) с потенциалами комбинированного метода квантовой и молекулярной механики (КМ/ММ). Дескрипторами служат как различные геометрические характеристики, так и электростатический потенциал от окружающих хромофор остатков белка. В основе нашего подхода- предсказание⁴ распределение вариации дипольного момента (DMV), определение коэффициентов квадратичного эффекта Штарка при установлении соответствия экспериментальному спектру с помощью оптимизации метрики Вассерштейна, ставя изначальные дескрипторы в однозначное соответствие с точками экспериментального спектра, открывая возможности для создания предсказательных машинных моделей.

Литература

1. D.M. Chudakov et al. *Physiological reviews*, 2010, **90**(3), 1103–1163.
2. R. Silva et al. *Computational Biology and Chemistry*, 2019, **83**, 107089.
3. T. Hayes et al. *Science*, 2025, **387**, 850-858.
4. R.A. Stepnyuk et al. *Mendeleev Communications*, 2024, **34**(6) , 788–791.

Работа выполнена при поддержке НОШ МГУ «Мозг, когнитивные системы, искусственный интеллект» (проект №23-Ш03-04)

IN SILICO РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ: ОТ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛА К ПРОМЫШЛЕННОЙ ТЕХНОЛОГИИ СИНТЕЗА

Редьков А.В.,^а Троценко Д.И.^б

^а*Институт Проблем Машиноведения Российской Академии Наук,
199178, Санкт-Петербург, Большой пр. ВО, 61*

^б*Национальный исследовательский университет ИТМО,
197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр, 49*

Несмотря на значительные успехи вычислительного материаловедения в области предсказания новых материалов с требуемыми свойствами¹, сквозная *in silico* разработка технологии материалов – от поиска структуры до проектирования установок для синтеза – всё еще требует существенных трудозатрат, проведения дорогих натурных экспериментов и ручной оптимизации. Для полной цифровизации пока еще не хватает методов эффективной связки процессов, происходящих на масштабах от «микро», таких как формирование микроструктуры и дефектов упаковки растущей фазы, до «макро», включая неоднородности распределения вещества в реакторе, тепло- и массопереноса, газодинамики, химических реакций. Это обусловлено большой вариативностью режимов формирования новой фазы, её нелинейностью, а также огромным числом влияющих на этот процесс факторов, которые невозможно учесть аналитически.

Интеграция искусственного интеллекта (ИИ) с многомасштабным высокопроизводительным моделированием позволяет решить эту проблему. В настоящей работе приведены результаты по использованию различных методов ИИ² (от классических алгоритмов машинного обучения, до искусственных нейронных сетей, алгоритмов компьютерного зрения и генеративно-состязательных нейросетей) для построения цифровых ИИ-моделей, которые с атомистической точностью описывают процесс формирования новой фазы, исключая необходимость в дорогостоящих атомистических симуляциях. Подобные модели выступают в роли универсального переводчика между условиями синтеза в реакторе на конечно-элементом масштабе и ростом новой фазы на атомистическом масштабе, и могут стать замыкающим звеном, которое позволит проложить полностью цифровой путь от поиска кристаллической структуры нового материала до проектирования промышленного реактора.

Литература

1. Oganov A.R., Pickard C.J., Zhu Q., Needs R.J., *Nature Rev. Mater.* 4 (2019) 331–348.
2. Redkov A.V., *Acta Materialia*, 287 (2025), 120762

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ: ОТ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ К ФУНДАМЕНТАЛЬНЫМ МОДЕЛЯМ

**Рыльцев Р.Е.,^a Щелкачев Н.М.,^б Хазиева Е.О.^a,
Катков Н.Н.,^a Пикалова Н.С.^a**

^a*Институт металлургии имени академика Н.А. Ватолина Уральского отделения РАН,
6200161, Екатеринбург, ул. Амундсена 101*

^б*Объединенный институт ядерных исследований,
141980 86, ул. Жолио-Кюри, 6, г. Дубна, Московская обл., Россия*

Многокомпонентные композиционно сложные системы дают новые возможности дизайна материалов в силу сложного атомного окружения, большого разнообразия структур и высокой размерности композиционного пространства¹. Атомистическое моделирование играет ключевую роль в понимании и прогнозировании свойств этих материалов, однако высокая вычислительная стоимость расчетов в рамках теории функционала плотности (DFT) серьезно ограничивает масштаб и широту таких исследований. Этую проблему сегодня помогают преодолеть машинно-обучаемые потенциалы межатомного взаимодействия (MLIP), которые параметризуются на данных DFT для достижения точности, близкой к первым принципам, при несоизмеримо меньших вычислительных затратах².

В докладе будет представлен краткий обзор применения MLIP к многокомпонентным неупорядоченным системам, таким как высокоэнтропийные сплавы, металлические стекла и металлургические расплавы. Будут освещены их успехи в расчетах ключевых свойств, включая структурные и термодинамические свойства, механические характеристики и транспортные свойства. Также будут обсуждены основные проблемы разработки MLIP, такие как ограниченная точность DFT расчетов, сложность моделирования магнитных материалов и создание моделей для систем с большим числом компонентов. Особое внимание будет уделено новой парадигме разработки MLIP, основанной на использовании фундаментальных моделей (Foundation Models) – универсальных потенциалов, предобученных на больших массивах первоосновных данных³.

Литература

- [1] Senkov O.N., Miracle D.B., Chaput K.J., Couzinie J.-P. *Journal of Materials Research*, 2018, **33**, 3092.
- [2] Mishin Y., *Acta Materialia*, 2021, **214**, 116980.
- [3] Choi. J., Nam G., Choi J., Jung Y, *JACS Au*, 2025, **5**, 1499.

ЦИФРОВАЯ ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ НА ОСНОВЕ ИНФОРМАЦИОННО-ЭНТРОПИЙНЫХ ДЕСКРИПТОРОВ

Сабиров Д.Ш.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,
450075, Уфа, проспект Октября 141*

Информационная энтропия (h) и родственные ей дескрипторы широко используются для квантификации сложности молекул и кристаллов.^{1,2} Мы развиваем новый подход, в котором h применяется для описания молекулярных ансамблей и химических реакций.³ Его особенностью является неаддитивность информационной энтропии молекулярного ансамбля h_{ME} относительно значений h_i составляющих его молекул.³

$$h_{ME} = H_\Omega + \sum_{i=1}^m \omega_i h_i, \quad H_\Omega = - \sum_{i=1}^m \omega_i \log_2 \omega_i$$

где ω_i – доля атомов, приходящаяся на i -ую молекулу; H_Ω – кооперативная энтропия – эмерджентный параметр, который отражает увеличение сложности при «смешивании» молекул и зависит только от их размера.

Одностадийная (элементарная) химическая реакция представляется как трансформация одного молекулярного ансамбля в изомерный ему другой. Зависимость разных слагаемых в h_{ME} от размера и структуры позволяет осуществлять раздельную оценку сложности, относимой к изменению в химических реакциях размера и структуры (энтропия реорганизации, H_{reorg}) либо только размера молекул (энтропия перераспределения, $H_{redistr}$):⁴

$$\Delta h_R = H_{reorg} + H_{redistr} = \left(\sum_{i=1}^{prod} \omega_i h_i - \sum_{i=1}^{react} \omega_i h_i \right) + (H_\Omega^{prod} - H_\Omega^{react})$$

Информационная энтропия K -стадийной химической реакции $\Delta h_{R,\Sigma}$ связана с параметрами стадий ($\Delta h_{R,k}$) через доли атомов ω_k , приходящиеся на k -ую стадию в суммарном химическом уравнении:⁵

$$\Delta h_{R,\Sigma} = \sum_{k=1}^K \omega_k \Delta h_{R,k}$$

Подход апробирован на одно-^{3,4} и многостадийных^{3,5} химических реакциях органических соединений (с параллельными и последовательными стадиями, в том числе катализическими).

Литература

1. Sabirov D.Sh., Shepelevich I.S. *Entropy*, 2021, **23**, 1240.
2. Сабиров Д.Ш., Тухбатуллина А.А., Зимина А.Д., Шепелевич И.С. *Изв. АН. Сер. хим.*, 2024, **73**, 2123.
3. Банару Д.А., Аксёнов С.М. *Литосфера*, 2024, **24**(2), 240.
4. Sabirov D.Sh., Tukhbatullina A.A., Shepelevich I.S. *J. Mol. Graph. Model.*, 2022, **110**, 108052.
5. Sabirov D.Sh., Zimina A.D., Tukhbatullina A.A. *J. Math. Chem.*, 2024, **62**, 819.

МЕТРИКИ ДЛЯ ХИМИЧЕСКОГО ИНФОРМИРОВАНИЯ МОДЕЛЕЙ ПРИ ОБРАБОТКЕ НАУЧНОЙ ИНФОРМАЦИИ

Скорб Е.В.

Научно-образовательный центр инфохимии, Университет ИТМО,
191002, Санкт-Петербург, Ломоносова ул. 9

Развитие современных методов анализа в химии и материаловедении требует перехода от традиционных дескрипторов к принципиально новым метрикам, способным учитывать многомасштабную природу химических систем. Например, такие метрики, как размерность Хаусдорфа¹ или лакунарность², количественно отражают иерархическую организацию материала, что особенно важно для прогнозирования биологического поведения³, сорбции⁴ или молекулярного транспорта⁵, создания сенсоров⁶ и актуаторов⁷ и логических ворот⁸. Возможный сценарий проведения исследований, для генерации достаточного количества мультишаговых данных от атомно-силовых изображений до квантово-химических дескрипторов химического информирования фундаментальной модели, представлен на рисунке 1.

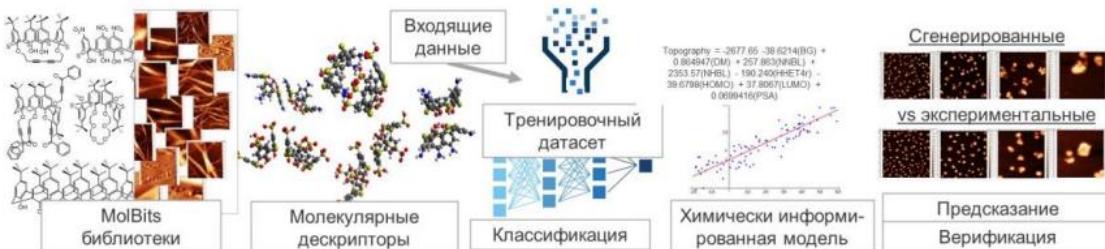


Рисунок 1. Схема проведения исследований для генерации в области создания химически информированных моделей для инфохимии

Разработанное программное обеспечение и большие языковые модели как помощники⁹ с открытым исходным кодом позволяют автоматизировать анализ больших объёмов данных, минимизируя субъективность и повышая воспроизводимость результатов.

Литература

1. Aglikov A.S. et al., Materials Horizons, 2025, DOI: 10.1039/d5mh01327e.
2. Aglikov A.S. et al., Applied Surface Science, 2024, 670, 160640.
3. Zyrianova P.I. et al., Materials & Design, 2024, 238, 112718.
4. Botnar A.A. et al, Langmuir, 2024, 40, 24634.
5. Yang K. et al., ACS Nano, 2025, DOI: 10.1021/acsnano.5c08653.
6. Volkova O. et al, Langmuir, 2025, 41, 8690.
7. Zyrianova P.I. et al., Materials & Design, 2024, 238, 112718.
8. Denikaev A. et al, ACS Applied Materials & Interfaces, 2024, 16, 7430.
9. Krotkov N.A. et al., J. Chem. Inf. Model., 2025, DOI: 10.1021/acs.jcim.5c01897

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЛАЗЕРНОЙ ТЕРМОХИМИИ

Снытников В.Н.^а, Пескова Е.Е.^б

^аИнститут катализа СО РАН,

630090, Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева 5

*^бНациональный исследовательский Мордовский государственный университет,
430005, Республика Мордовия, Саранск, Большеленинская 68*

Неокислительная конверсия метана с получением ценных углеводородов и водорода является предметом современного интенсивного изучения лазерной термохимии. Поиск приемлемых режимов по конверсии метана и по селективности продуктов в лабораторных экспериментальных установках является задачей, которая требует больших временных ресурсов и труда многих исследователей. В частности, эти ресурсы идут на создание и использование кинетической схемы процесса, которая входит неотъемлемой частью в программные комплексы численного моделирования химически активных потоков. Использование детального кинетического механизма радикальных цепных процессов в этих численных кодах обычно требует применения суперкомпьютеров. Внедрение подходов интеллектуального проектирования в численные модели кинетических схем представляется перспективным направлением развития химических технологий.

Нами рассмотрен механизм димеризации метана, когда взаимодействие двух метильных радикалов и дегидрирование метана происходят на поверхности катализатора. Остальные реакции происходят в газовой фазе. На основании квантовохимических расчетов определены стадии активации метана на частицах катализатора с образованием этана. На основе анализа данных по пиролизу метан-этановых смесей и результатах квантово-химических расчетов предложена и исследована компактная кинетическая схема конверсии метана с гетерогенно-гомогенными реакциями. Предложенный механизм реакции учитывает 20 обратимых стадий. В этой схеме константы газофазных радикальных реакций принадлежат базе NIST. Компактная кинетическая схема конверсии метана подходит для проведения 2D газодинамических расчетов реакторов лазерной безокислительной конверсии метана. Однако переход к 3D газодинамическим расчетам связан с необходимостью значительного снижения затрат на расчеты химической кинетики. Возможное решение этой проблемы лежит на путях применения машинного обучения.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ УДЕРЖИВАНИЯ В УСЛОВИЯХ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Ставрианиди А.Н.^{1,2}

¹*Химический факультет Московского государственного университета
им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3*

²*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической
химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук,
119071, Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4*

В хроматографии одним из перспективных направлений является прогнозирование параметров удерживания и разделения, таких как $\log k$, α и время удерживания (RT), с помощью методов машинного обучения. Эти параметры важны при планировании эксперимента и при проведении аннотации пиков, т.е. предварительной идентификации компонентов разделяющей смеси. Нами были использованы систем расчёта молекулярных дескрипторов в комбинации с различными методами отбора признаков и алгоритмами машинного обучения, такими как многомерная линейная регрессия, метод опорных векторов, случайный лес и его вариации. Были построены модели для прогнозирования разделения фармацевтических соединений в условиях обращенно-фазовой ВЭЖХ. Наилучшие результаты показали модели, на основе случайного леса (RF). В частности, модель ChemoPy/RF, обученная на данных набора METLIN SMRT, продемонстрировала точность выше 80% в предсказании порядка элюирования структурных аналогов и изомеров – компонентов четырех лекарственных препаратов.

Для предсказания времени удерживания в разных хроматографических условиях может быть использовано глубокое обучение и трансферное обучение. Разработанная нами одномерная сверточная нейронная сеть (1D CNN) показала высокую точность как на наборе METLIN SMRT ($MAE \approx 35$ сек), так и на пяти дополнительных наборах данных.

Таким образом, внедрение методов машинного обучения в практику хроматографического анализа позволяет повысить достоверность при идентификации неизвестных компонентов в сложных смесях, а также в перспективе позволит существенно снизить затраты на проведение экспериментов по подбору селективности и условий разделения фармацевтических субстанций и других препаратов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-00266-П), предоставленного Институту физической химии и электрохимии имени А. Н. Фрумкина Российской академии наук.

КРИСТАЛЛОМОРФНЫЙ ДИЗАЙН СОТОВЫХ МАТЕРИАЛОВ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ

Сычев М.М.^{a, 6}, Арсентьев М.Ю.⁶, Сысоев Е.И. ^{a, 6},
Балабанов С.В.^a, Долгин А.С.^a, Солдатов А.А. ^{a, 6}

^a*Институт химии силикатов им. И.В. Гребеницкого РАН,
199034, Санкт-Петербург, Макарова наб., д. 2,*

⁶*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (ТУ),
190013, Санкт-Петербург, Московский пр-т, д.24-26/49 л.А*

Сотовые материалы находят широкое применение в качестве структурных и энергопоглощающих элементов техники, фильтров, катализаторов, сорбентов, электродов, в радиотехнических изделиях. С использованием аддитивных технологий разрабатываются новые их типы с геометрией трижды периодических поверхностей минимальной энергии (ТППМЭ). В работах академика В.Я. Шевченко показано, что такие материалы обладают высокими удельными механическими характеристиками [2]. Поскольку количество ТППМЭ ограничено, представляет интерес конструирование новых ТППМЭ-подобных геометрий. В данной работе предложен и развит новый метод проектирования трижды периодических геометрий, «кристалломорфный дизайн» [2]. Подход включает импорт информации из кристаллографических баз данных, автоматизированный отбор наиболее перспективных структур, генерацию карт распределения электронных плотностей, преобразование их в 3D модели и 3D печать. Разработаны новые сотовые материалы с высокими механическими характеристиками.

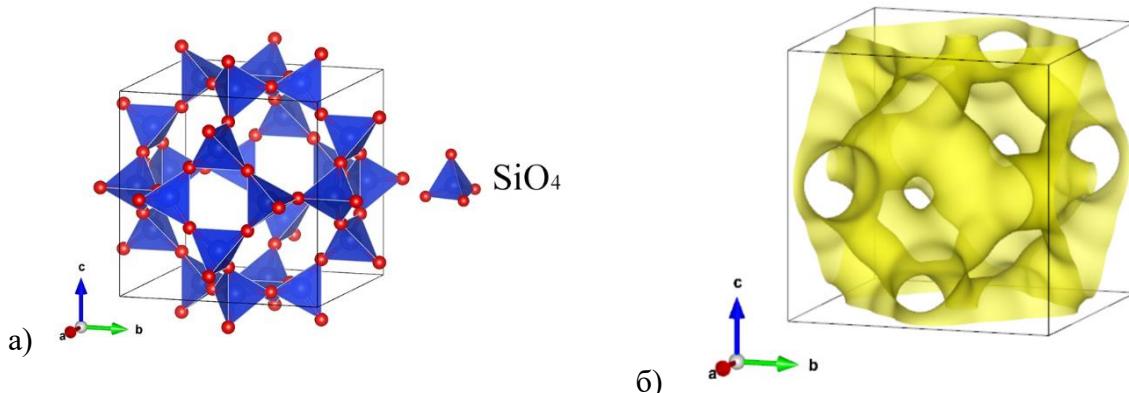


Рисунок 1. (а) цеолит SOD, (б) 3D поверхность на его основе.

Литература

1. Shevchenko V. et. al. ACS Omega. 2023, 8, 30, 26895–26905
2. Arsent'ev M. et. al. ACS Omega, 2023; 8, 28: 24865–24874

Работа выполнена в рамках ГЗ 1024030700040-3-1.4.3.

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ПЛАТФОРМА
ДЛЯ ПОИСКА ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПРОТИВОВИРУСНЫХ
СОЕДИНЕНИЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ
И ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА**

**Тарасова О.А., Карасев Д.А., Бизюкова Н.Ю.,
Рудик А.В., Дмитриев А.В., Филимонов Д.А., Поройков В.В.**

*Институт биомедицинской химии им. В. Н. Ореховича,
119121, Москва, ул. Погодинская, 10, 8*

Исследования, направленные на поиск новых противовирусных соединений, важны для уменьшения интенсивности патологических процессов, снижения вероятности персистенции инфекции и развития тяжелых осложнений.

Для поиска новых соединений с потенциальной противовирусной активностью нами разработана информационно-вычислительная платформа (ИВП) с применением методов интеграции данных, машинного обучения и искусственного интеллекта (<https://www.way2drug.com/viruses>).

ИВП содержит сведения, извлекаемые с применением оригинального метода интеграции больших данных о биологической активности потенциальных противовирусных соединений на основе интеллектуального анализа текстов. Для реализации вычислительного компонента ИВП подготовлены специализированные обучающие выборки, используемые для построения моделей машинного обучения (байесовский подход) о биологической активности противовирусных соединений. Модели машинного обучения характеризуются точностью AUC ROC свыше 0,93, рассчитанной методом перекрестной валидации с исключением по одному. Разработанная ИВП применяется для информационно-аналитической поддержки отечественных проектов, направленных на поиск и исследование активности новых препаратов с противовирусной активностью.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных научных исследований в Российской Федерации на долгосрочный период (2021-2030 годы) (№124050800018-9).

ХЕМОГЕНОМИКА И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА МУЛЬТИТАРГЕТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИПЕРАЗИНОВ

Унанян Л.С., Камарян В.С.

*Российско-Армянский (Славянский) Университет,
лаборатория структурной биоинформатики*

Разработанные химические соединения, проявляющие комбинированные действия, все чаще включаются в современную стратегию терапевтических протоколов в борьбе с разными заболеваниями человека и животных. Новейшие подходы мультитаргетности, включающие модуляцию нескольких мишней, задействованные в разных путях патологии Болезни Альцгеймера (БА), открывают новую страницу в данной терапии.

На сегодняшний день, в борьбе с БА используются препараты, модулирующие конкретные мишени в метаболических путях. Примерами могут стать холиномиметики, блокирующие АХЭ и БуХЭ, а также регуляторы NMDA рецепторов. Вместе с этим, за последние годы было показано, что производные пиперазинов, проявляющие синаптопротекторные свойства, могут играть важную роль в регулировании Ca^{2+} гомеостаза посредством воздействия на неселективные кальциевые каналы семейства TRPC¹. С другой стороны, было показано, что некоторые производные пиперазинов могут влиять на трансдукцию сигнала в головном мозге у пациентов с БА на уровне модуляции АХЭ и БуХЭ^{2,3}.

Использованные нами биоинформационные и хемоинформационные инструменты, вместе с модулями машинного обучения, дали возможность отобрать соединения, проявляющие мультитаргетные свойства в профилактике БА.

Литература

1. Zernov, N., Melenteva, D., Ghazaryan, V., Makichyan, A., Hunanyan, L., & Popugaeva, E. (2025). NN-Substituted Piperazine, Cmp2, Improves Cognitive and Motor Functions in 5xFAD Mice. *International Journal of Molecular Sciences*, 26(10), 4591.
2. Ghazaryan, V. S., & Hunanyan, L. S. (2024). Molecular docking and dynamic simulations of N'N'-disubstituted piperazines with AChE and BuChE. *Electronic Journal of Natural Sciences*, 43(2).
3. Karaytuğ M. O. et al. Piperazine derivatives with potent drug moiety as efficient acetylcholinesterase, butyrylcholinesterase, and glutathione S-transferase inhibitors //Journal of Biochemical and Molecular Toxicology. – 2023. – Т. 37. – №. 2. – С. e23259.

LAGNet — ПРЕДСКАЗАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ МОЛЕКУЛ ЧЕРЕЗ ГЛУБОКИЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ

Ушенин К.С.^{a, б}, Храбров К.^а, Цыпин А.^а,
Бер А.^а, Румянцев Е.^в, Кадурин А.^{а, г}

^aAIRI, Москва, РФ

^бУральский Федеральный Университет, Екатеринбург, РФ

^вФедеральная политехническая школа Лозанны, Лозанна, Швейцария

^гИнститут системного программирования РАН, Москва, РФ

Предложена архитектура геометрической графовой нейронной сети способной предсказывать произвольные функции вокруг молекул в трёхмерном пространстве. Электронная плотность является частным случаем такой целевой функции.

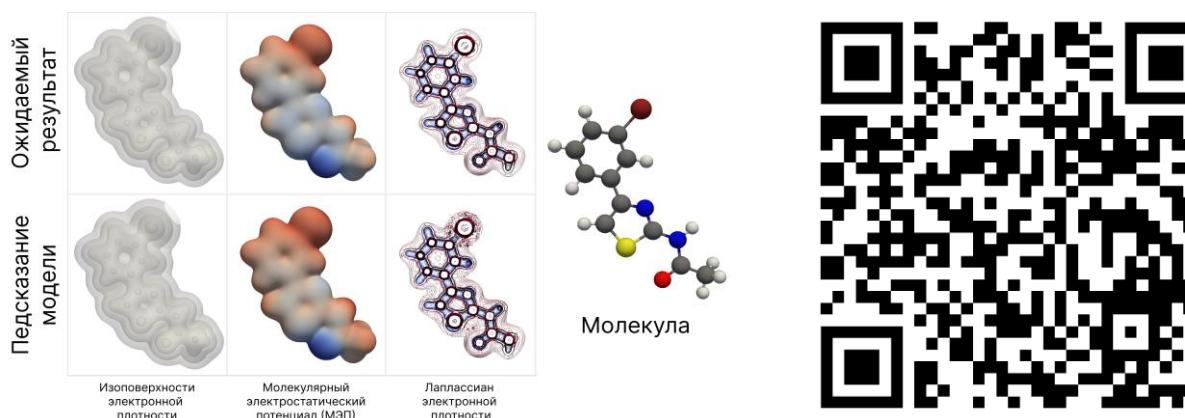


Рисунок 1. Пример работы нейронной сети и QR-код со ссылкой на полную версию статьи.

В полной версии работы приведены все технические детали¹. Мы провели сравнение с архитектурой DeepDFT² и показали в 2 раза более высокую точность нашего подхода. Исследование сделано на наборе данных $\nabla^2\text{DFT}$ ³, одном из крупнейших наборов данных лекарственно-подобных химических соединений.

Литература

1. Ushenin K. et al., Journal of Cheminformatics. – 2025. – Т. 17. – №. 1. – С. 65.
2. Jørgensen, Peter Bjørn, and Arghya Bhowmik., *npj Computational Materials* 8.1 (2022): 183.
3. Khrabrov K. et al., Advances in Neural Information Processing Systems. – 2024. – Т. 37. – С. 36869-36889.

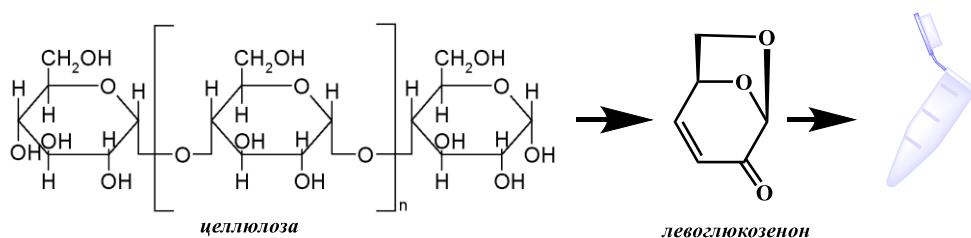
ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОН – БИОВОЗОБНОВЛЯЕМАЯ ПЛАТФОРМА В ОРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ

Файзуллина Л.Х.

Уфимский институт химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской Академии Наук, 450054, Уфа, проспект Октября, 71

1,6-Ангидро-3,4-дидезокси- β -D-глицеро-гекс-3-енопираноз-2-улоза или (1S,5R)-6,8-диоксабицикло[3.2.1]окт-2-ен-4-он (IUPAC), левоглюкозенон (тривидальное название) представляет собой хиральное гетероциклическое соединение, содержащее в своей структуре, кетогруппу, двойную связь, латентную альдегидную группу. Полученный впервые в 70-х годах прошлого века пиролизом целлюлозы, самого распространенного природного биовозобновляемого полимера, левоглюкозенон до сегодняшнего дня остается ценной молекулой, как для тонкого органического синтеза, так и для промышленности [1-4].

Уникальность левоглюкозенона состоит в его доступности и многофункциональности. Имеются более сотни научных трудов и патентов по получению левоглюкозенона из кристаллической целлюлозы из опилок, из стружек, из ваты, из бумаги. Возможность получения его из отходов деревообрабатывающей промышленности и макулатуры придают молекуле статусы «экологически» и «биовозобновляемый».



Левоглюкозенон - уникальная платформа с огромным потенциалом. В докладе будут приведены возможности использования левоглюкозенона в органическом синтезе.

Литература

1. Миахтаев М.С., Валеев Ф. А., Гайсина И. Н. *Успехи химии*, 1994, **62**, 922.
2. Sarotti A. M., Zanardi M., Spanevello R. A. *Curr. Org. Synth.*, 2012, **9**, 439.
3. Comba M. B., Tsai Y., Sarotti A. M., Mangione M. I., Suarez A. G., Spanevello R. A., *Eur. J. Org. Chem.*, 2018, 590.
4. Camp J.E., Greatrex B. *Front. Chem.*, 2022, **10**, 1.

Работа выполнена по теме государственного задания 125020601627-6.

МЕХАНИЗМЫ ФЕРМЕНТАТИВНЫХ РЕАКЦИЙ В ЭПОХУ ИИ

Хренова М.Г.

*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские Горы 1С3*

Понимание молекулярных механизмов ферментативного катализа является одним из современных направлений биохимии и энзимологии. Экспериментальные подходы, включая рентгеноструктурный анализ и кинетические исследования не дают достаточно информации для определения механизмов реакций. Их дополняют современные методы вычислительной химии, включая комбинированный метод квантовой механики / молекулярной механики. Накопление большого объема экспериментальных и расчётных данных делает возможным их использование для построения моделей искусственного интеллекта (ИИ) и машинного обучения (МО). Это приводит к существенным изменениям в парадигме науки, поскольку позволяет строить гораздо более сложные и неочевидные закономерности. В докладе будут систематизированы и проанализированы современные подходы на основе ИИ для исследования механизмов ферментативных реакций, выделены ключевые достижения, перспективы и вызовы. Также будут приведены конкретные примеры по изучению механизмов ферментативных реакций, включая определение профиля субстратной специфичности протеазы и типа механизма реакции в ферментах, разрывающих Р – О связь.

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ ПРОТИВ ЕСТЕСТВЕННОГО И ХИМИЧЕСКИХ ПЛАТФОРМ?

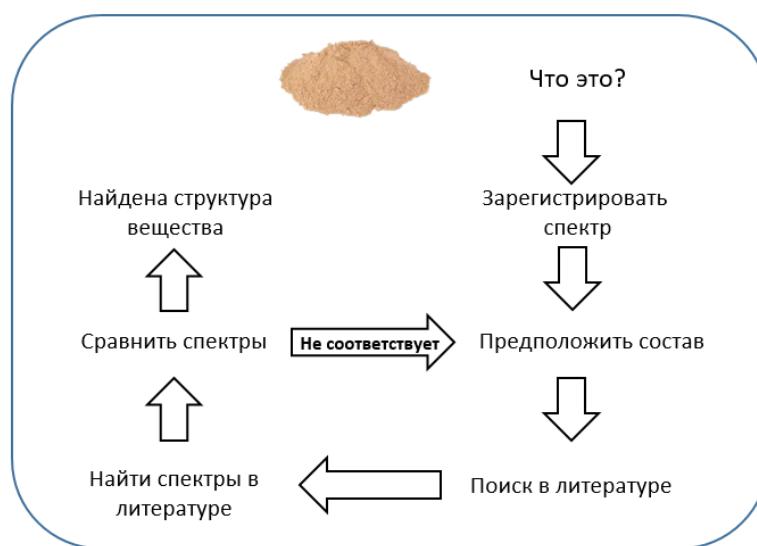
Чусов Д.А., Афанасьев О.И.

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова
Российской академии наук (ИНЭОС РАН),
119334, Россия, Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1*

В докладе будут рассмотрены аспекты влияния современных химических платформ:

- на процесс написания научных статей, диссертаций и дипломных работ;
- на выбор надежных методик синтеза целевых соединений;
- на возможность проведения реверс-инжиниринга сложных смесей.

Способен ли искусственный интеллект полностью заменить естественный в анализе данных?



КВАНТОВАЯ ХИМИЯ И ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ: ОТ МОДЕЛЕЙ К АВТОМАТИЗАЦИИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Шапеев А.В.

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

Модели квантовой химии, используемые сегодня для цифрового моделирования материалов, были разработаны более полувека назад. Однако лишь около тридцати лет назад вычислительные мощности достигли уровня, достаточного для проведения простейших квантово-химических расчетов. С тех пор вычислительные мощности неуклонно росли, но именно с появлением методов искусственного интеллекта стало возможным проводить практические расчеты широкого круга свойств материалов с высокой точностью и эффективностью.

За последнее десятилетие произошел стремительный прогресс в области машинно-обучаемых потенциалов — моделей, воспроизводящих точность квантово-химических расчетов при значительно меньших вычислительных затратах. То, что еще недавно считалось спорной концепцией, сегодня стало полноценным инструментом для предсказания структурных, термодинамических и механических свойств материалов. Ключевую роль играют методы активного обучения, позволяющие автоматически строить обучающую выборку и тем самым не только ускорять расчеты, но делать процесс построения потенциалов более автономным.

Следующий этап развития — применение искусственного интеллекта (ИИ) не только для ускорения квантово-химических расчетов, но и для планирования самих вычислительных экспериментов. Методы ИИ уже сегодня способны выбирать оптимальным образом параметры моделирования, такие как температура, давление или концентрация, если целью является, например, построение фазовой диаграммы [1], — таким образом автоматизируя то, что раньше требовало участия человека.

Развитие таких подходов ведет к созданию замкнутых вычислительных контуров, где результаты расчетов используются для постановки новых задач и уточнения моделей, формируя основу автономных систем моделирования, ускоряющих получение научных результатов.

Литература

1. Miryashkin, T., Klimanova, O., Ladygin, V., Shapeev, A. *Physical Review B*, 2023, **108**(17), 174103.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-13-00332.

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ГАЗОВОЙ ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ: ОТ ПРЕДСКАЗАНИЯ ИНДЕКСОВ УДЕРЖИВАНИЯ ДО ПОСТРОЕНИЯ СТРУКТУРЫ НЕИЗВЕСТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Шолохова А.Ю., Матюшин Д.Д.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук,
119071, Россия, Москва, Ленинский проспект, дом 31/4*

Глубокое обучение применяется к задачам нецелевого анализа с помощью газовой хромато-масс-спектрометрии (ГХ-МС) с конца 2010-ых годов. В 2019 году наша научная группа впервые применила глубокие нейронные сети к задаче предсказания газохроматографических индексов удерживания. Была использована одномерная сверточная нейронная сеть, в дальнейшем получены более точные модели с использованием мультимодального ансамбля. Глубокое обучение позволило существенно снизить ошибку предсказания по сравнению с существующими подходами [1] и использовать эти значения в качестве критерия при масс-спектральном поиске. Проведена оценка точности предсказания индексов удерживания, показано, что наличие сходной по структуре молекулы в обучающем наборе позволяет точнее выполнить предсказание.

Разработан алгоритм нецелевого анализа сложных смесей методом ГХ-МС [2] с использованием предсказанных индексов удерживания и масс-спектров. На примере продуктов трансформации несимметричного диметилгидразина (ракетного горючего) показано, что возможно достаточно надежное построение структуры низкомолекулярных органических соединений. Создано интерактивное программное обеспечение, позволяющее «в один клик» предсказать индексы удерживания и масс-спектры, создать список изомеров по брутто-формуле, провести «умный поиск» по этому списку на основе наблюдаемого масс-спектра. Программное обеспечение доступно онлайн:<https://github.com/mtshn/svekla>.

Литература

1. Matyushin D.D., Sholokhova A.Yu., Buryak A.K. *Journal of Chromatography A*, 2019, **1607**, 460395.
2. Sholokhova A.Yu, Matyushin D.D., Grinevich O.I., Borovikova S.A., Buryak A.K. *Molecules*, 2023, **28(8)**, 3409

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках госбюджетной темы № 124041900012-4.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОСТЕННЫХ НАНОТРУБОК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЙРОСЕТЕЙ И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Эварестов Р.А.^а, Бандура А.В.^а,
Лукьянов С.И.^а, Домнин А.В.^а, Кузьмин А.Ю.^б

^а Институт химии СпбГУ, 198504, Санкт-Петербург, Петергоф

^б Институт физики твёрдого тела Латвийского университета,
LV-1063, Рига, ул. Кенгарага, 8

Нанотрубки на основе дихалькогенидов металлов благодаря своей однопериодической структуре демонстрируют уникальные свойства, которые делают их перспективными материалами для использования в различных технологических областях, таких как электроника, катализ и хранение энергии. Большинство синтезированных неорганических нанотрубок являются многостенными, что практически исключает возможность их теоретического изучения с помощью неэмпирических методов квантовой химии. В работе [1] с использованием весьма трудоемкой процедуры подгонки на основе генетического алгоритма были разработаны силовые поля (SWMBLR), содержащие простые потенциалы, описывающие атом-атомные взаимодействия в нанотрубках разного состава. Однако использование и дообучение [2] нейросети CHGNet [3] позволило авторам настоящего доклада предложить существенно менее трудоёмкий и весьма эффективный способ моделирования многостенных нанотрубок. Сравнение результатов расчётов многостенных нанотрубок, выполненных на основе двух упомянутых подходов, демонстрирует хорошее совпадение полученных структурных параметров (рис. 1).

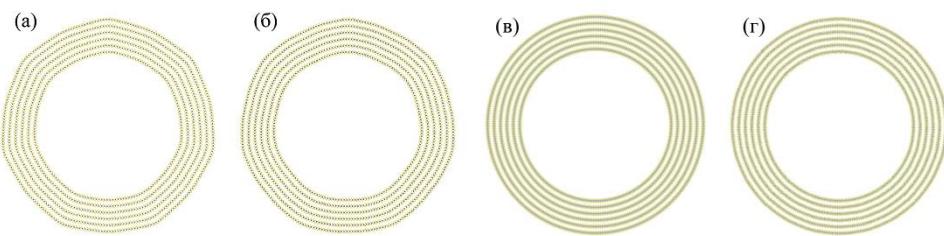


Рисунок 1. Оптимизированная структура 6-стенных нанотрубок WS₂ типа «кресло» (3654 атомов) (а,б) и типа «зигзаг» (6192 атомов) (в,г). Результаты получены силовым полем SWMBLR (а,в) и дообученной нейросетью CHGNet (б,г).

Литература

1. Lukyanov S.I., Bandura A.V., Kuruch D.D., Stanislavchuk-Abovsky D.B., Evarestov R.A., *Chem. Phys.*, 2026, **600**, 112893.
2. Žguns P., Pudza I., Kuzmin A., *J. Chem. Theory Comput.*, 2025, **21**, 8142.
3. Deng B., Zhong P., Jun K., Riebesell J., Han K., Bartel C.J., Ceder G., *Nat. Mach. Intell.*, 2023 **5**, 1031.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант 24-23-00207.

ПОИСК ПИКОВ В ВЭЖХ-МС ДАННЫХ ДЛЯ ЗАДАЧ МЕТАБОЛОМИКИ

Яньшоле В.В., Мельников А.Д.

*Международный томографический центр СО РАН,
630090, Новосибирск, ул. Институтская 3а*

Метод высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием высокого разрешения (ВЭЖХ-МС) отличается высокой чувствительностью и производительностью, поэтому широко применяется для анализа сложных смесей химических соединений. ВЭЖХ-МС особенно полезен в метаболомике – науке, исследующей малые органические молекулы биологического значения (метаболиты, <1000 Да) в живых организмах. Такие исследования позволяют получать картину текущего состояния организма, что критически важно для понимания происходящих в нем биохимических процессов.

Метаболомные ВЭЖХ-МС данные содержат десятки тысяч пиков, что сильно затрудняет ручной анализ. Поэтому чаще всего при панорамных исследованиях применяют автоматический поиск пиков с помощью специализированного программного обеспечения, например XCMS или MZmine. Однако, как недавно выяснилось, эти инструменты нередко находят множество ложноположительных пиков (20-50%).

Для решения этой проблемы нами был предложен алгоритм *peakonly*, основанный на свёрточных нейронных сетях (CNN), хорошо зарекомендовавших себя в задачах компьютерного зрения. Алгоритм включает в себя нахождение областей интереса в ВЭЖХ-МС данных (ROI) и две последовательные CNN: первая CNN исключает шумовые ROI, вторая CNN определяет границы пиков в пик-содержащих ROI. Сети были обучены на наборе данных, включающем более 6000 размеченных вручную ROI с примесью синтетических данных. Разработанный подход продемонстрировал надежную и эффективную обработку данных, достигая почти предельной точности обнаружения пиков в 97%. Примечательно, что качество алгоритма сравнимо с качеством человека-оператора.

Peakonly работает с данными от различных ВЭЖХ-МС и ГХ-МС приборов, доступен с графическим пользовательским интерфейсом и способен пакетно обрабатывать множество образцов метаболомного эксперимента, включая сопоставление пиков между различными файлами и автоматическое заполнение пропусков. Исходный код *peakonly* доступен на GitHub (<https://github.com/arseha/peakonly>).

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-14-00035.



УЧЕНЫЕ ДОКЛАДЫ

ФИЗИЧЕСКИ ОБОСНОВАННОЕ МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ ПОЛИМЕРНОЙ ИНФОРМАТИКИ: СИСТЕМАТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕСКРИПТОРОВ, МОДЕЛЕЙ И ИНТЕРПРЕТИРУЕМОСТИ

Аверочкин Г.М., Злобин И.С., Беспалов И.А., Александров Е.В.

*Центр НТИ «Цифровое Материаловедение: Новые Материалы и Вещества»,
МГТУ им. Н.Э. Баумана, 105005, Москва, 2-я Бауманская 5/1*

В последнее время машинное обучение получило широкое применение в полимерной информатике, но один из ключевых вызовов для исследователей в данной области – отсутствие инструментов для интерпретируемого представления химической структуры в виде физически обоснованных численных величин, отражающих знания, накопленные науками о материалах.¹ Нами проведен анализ существующих методов описания структуры мономеров, подходящих для этой задачи: QSPR-подходов Аскадского² и Бицерано,³ библиотеки RDKit, результатов квантово-химических расчетов и других. На основе этого анализа мы предложили новую схему расчета дескрипторов, которая объединяет сильные стороны классических подходов и совершенствует их. Полученный набор включает объемные характеристики атомных окружений, вклады функциональных групп, статистику химических связей, квантово-химические параметры и отобранные молекулярные дескрипторы RDKit. На данных из базы PolyInfo были обучены модели машинного обучения для предсказания плотности, температур стеклования, плавления и термического разложения полимеров, обеспечившие высокую точность (R^2 до 0.89), превышающую показатели моделей на основе распространённых дескрипторов. Для оценки значимости признаков использовались методы причинного анализа и SHAP, показавшие ключевую роль объёмных характеристик, ароматичности, полярности и гибкости цепей. Созданы первые открытые инструменты – Python-библиотека и веб-страница – специализированные для описания мономеров и предсказания свойств полимеров, которые позволяют решать задачи QSPR и рационального дизайна мономеров.

Литература

1. Mikulskis P., Alexander M.R., Winkler D.A. *Adv. Intell. Syst.*, 2019, **1**, 1900045.
2. Askadskii A.A. *Computational Materials Science of Polymers*, 1st ed., 2003, Cambridge.
3. Bicerano J. *Prediction of Polymer Properties*, 3rd ed., 2005, CRC Press: Boca Raton.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-73-00026.

ДАТАСЕТЫ ПО ЦИТОТОКСИЧНОСТИ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ

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

*ФГБУН Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН,
119991 Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 47*

Ионные жидкости (ИЖ) представляют собой органические соли, характеризующиеся низкой температурой плавления и широким спектром выдающихся физико-химических и биохимических свойств. Благодаря высокой термостойкости, незначительному давлению паров и низкой воспламеняемости некоторые ионные жидкости были признаны исследователями «экологически чистыми» растворителями. Еще одной привлекательной особенностью ионных жидкостей является их структурная гибкость, которая позволяет проектировать и синтезировать соединения с определенными свойствами. Однако, несмотря на то, что они называются «экологически чистыми», не все ионные жидкости безопасны для окружающей среды или здоровья человека, поскольку некоторые из этих соединений обладают значительной токсичностью [1]. Поэтому понимание токсичности ионных жидкостей имеет важное значение для их ответственного применения и разработки надежных моделей прогнозирования токсичности.

Биологическая активность ионных жидкостей частично обусловлена их способностью растворяться как в воде, так и в липидных мембранах, что зависит от структуры их алкильных боковых цепей. Поскольку экспериментальные испытания часто являются медленными и дорогостоящими, вычислительные подходы, такие как QSAR, предлагают эффективный способ прогнозирования токсичности, особенно когда экспериментальные данные ограничены. [2,3]

В данном исследовании представлен набор данных о цитотоксичности 1227 ионных жидкостей, собранный из 151 научной статьи и включающий 3837 записей. Для каждой записи предоставляется следующая информация: название вещества; эмпирическая формула; номер CAS; SMILES; молекулярная масса; значение цитотоксичности; подробные сведения об экспериментальной установке (например, время инкубации, клеточная линия и использованный тест); и ссылка на исходную публикацию. Набор данных может быть использован для вывода соотношений «структура-активность» и установления основных структурных элементов, которые определяют цитотоксическое действие ионных жидкостей на эукариотические клетки.

Цель данного исследования — создать базу данных по цитотоксичности ионные жидкости и определить молекулярные дескрипторы, отражающие влияние конкретных структурных особенностей на биологическую активность.

Литература:

1. Egorova K.S., Ananikov V.P. (2014). Toxicity of ionic liquids: eco (cyto) activity as complicated, but unavoidable parameter for task-specific optimization. *ChemSusChem*, **7**, 336-360.
2. Abramenko N., Kustov L., Metelytsia L., Kovalishyn V., Tetko I., & Peijnenburg W. (2020). A review of recent advances towards the development of QSAR models for toxicity assessment of ionic liquids. *Journal of hazardous materials*, **384**, 121429.
3. Fan, D., Xue, K., Zhang, R., Zhu, W., Zhang, H., Qi, J., ... & Cui, P. (2024). Application of interpretable machine learning models to improve the prediction performance of ionic liquids toxicity. *Science of The Total Environment*, **908**, 168168.

БАЗА МИКРОФОТОГРАФИЙ СОЛЕЙ ФОСФОНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МОЛЕКУЛЯРНОГО РАСПОЗНАВАНИЯ, ПРЕДСКАЗАНИЯ МОРФОЛОГИИ И АНАЛИЗА ИЕРАРХИЧЕСКИХ СТРУКТУР

**Архипова Д.М., Оганов А.А., Бойко Д.А.,
Гордеев Е.Г., Кашин А.С., Анаников В.П.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского
Российской академии наук, 119991 Москва, Ленинский проспект 47*

Поиск корреляции морфология–молекулярная структура является одной из фундаментальных задач в химии¹. Микрокристаллическая структура в значительной степени влияет на свойства материалов², однако визуальные данные о морфологии мало используются при анализе.

Современный подход с использованием машинного обучения предоставляет мощный инструмент для автоматизированного анализа морфологии и дает перспективы для прогнозирования молекулярной структуры. Однако, разработка подобных методов требует больших стандартизованных и размеченных баз химических данных. Данные необходимы в качестве обучающих выборок для эффективного применения алгоритмов и методов машинного обучения в области химического анализа³.

В рамках настоящего исследования была собрана и описана обширная база изображений микрокристаллической структуры 19 гомологичных солей фосфония и 10 их двойных смесей. Соединения близкой структуры формируют кристаллические пленки, значительно различающиеся друг от друга на микроуровне. Экспериментальный набор данных состоит из более 4000 изображений, полученных с помощью сканирующего электронного микроскопа и оптического микроскопа. Каждое изображение строго соотнесено с молекулярной структурой, что позволяет использовать базу данных для решения задач молекулярного распознавания, предсказания морфологии, исходя из молекулярного строения, анализа фрактало-подобных и иерархических структур.

Литература

1. Y. Ju, Sh. Li, X. Yuan, L. Cui, A. Godfrey, Y. Yan, Zh. Cheng, X. Zhong, J. Zhu. *Sci. Adv.*, 2021, 7, eabj8804.
2. Lansford, J.L., Vlachos, D.G., *Nat. Commun.*, 2020, **11**, 1513.
3. Raabe D., Mianroodi J. R., Neugebauer J., *Nat. Comput. Sci.*, 2023, **3**, 198–209.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-73-10177.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ γ -Al₂O₃ С ИГОЛЬЧАТОЙ МОРФОЛОГИЕЙ ЧАСТИЦ

**Барсуков А.Н.,^{a,б} Вдовиченко В.А.,^{a,б}
Малькович Е.Г., Воробьева Е.Е.,^a Селезнева Д.А.,^б Пархомчук Е.В.^{a,б}**

^aИнститут катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 5,

^бНовосибирский государственный университет,
630090, Новосибирск, улица Пирогова, 2

Для подбора оптимальной текстуры носителей катализаторов гидропереработки углеводородного сырья возникает необходимость в моделировании работы катализатора. Одним из подходов является моделирование гранулы оксида алюминия упаковкой шаров-кристаллитов¹, однако морфология γ -Al₂O₃ весьма разнообразна и включает все промежуточные формы – от иголок до ромбоэдрических пластинок² (рис. 1 слева).

В рамках данного исследования была разработана модель пористой структуры γ -Al₂O₃, полученного из игольчатого бемита, с использованием процессов Пуассона и Любачевского-Стилинжера (рис. 1, в центре и справа). Модель, использующая экспериментальные данные пористости, диаметра пор, истинной плотности и размеров кристаллитов, определяла удельную поверхность с использованием метода Монте-Карло с последующим машинным обучением для ускорения подбора уточняемых параметров, а также извилистость с помощью алгоритма Дейкстры, который применяли к разбиению области моделирования на многогранники Вороного. Полученная модель имела погрешность менее 6% и продемонстрировала анизотропию извилистости вдоль и поперёк направления кристаллитов, что важно для прогнозирования процесса коксования пористого пространства.

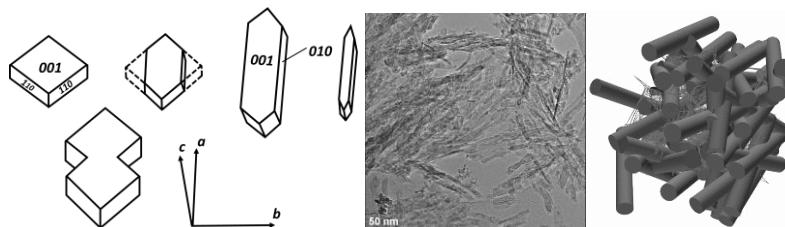


Рисунок 1. Варианты морфологии γ -Al₂O₃ (слева), снимок ПЭМ моделируемого γ -Al₂O₃ (в центре) и результат математического моделирования (справа)

Литература

1. Parkhomchuk E.V., et al. *Chemical Engineering Journal*, 2021, **405**, 126551
2. Стайлз Э.Б. Носители и нанесенные катализаторы. – М.: Химия, 1991. – 240 с.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0036)

**УЧЁТ ЗАРЯДА ПРИ ПРЕДСКАЗАНИИ ИК-СПЕКТРОВ
ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ:
XGBOOST И ГРАФОВАЯ НЕЙРОННАЯ СЕТЬ**

**Бегларян Б.Г., Закускин А.С.,
Немченко В.А., Лабутин Т.А.**

*Химический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3*

Спектроскопия ближнего и дальнего инфракрасного (ИК) диапазона позволяет идентифицировать различные органические соединения, в том числе молекулы полициклических ароматических углеводородов (ПАУ). Важной задачей является идентификация ПАУ в спектрах межзвездной среды и других астрономических объектов, поскольку эти молекулы являются неотъемлемым компонентом химической эволюции во Вселенной. Кроме того, из-за высокой токсичности и мутагенности контроль содержания ПАУ является одной из важнейших задач экологического мониторинга. Заряд даже структурно идентичных молекул ПАУ в значительной мере влияет на профиль их ИК-спектров [1]. С помощью теоретических методов, основанных на квантовохимических расчетах, таких как теория функционала плотности (DFT), уже получено достаточно большое количество спектров для молекул с различными зарядами. Однако общее количество известных молекул ПАУ существенно больше и расчет всех спектров затруднен из-за высокой ресурсоемкости и длительности квантовохимических расчетов. Поэтому мы предлагаем альтернативный высокоскоростной подход, основанный на предсказании ИК-спектров как нейтральных, так и заряженных молекул ПАУ методами машинного обучения [2].

Для решения поставленной задачи мы обучили модели на основе градиентного бустинга (XGBoost), а также графовой нейронной сети. Заряд молекулы учитывается посредством кодирования в бинарные (one-hot) или обучаемые представления. Оба подхода демонстрируют высокую предсказательную способность, впервые позволяя быстро и точно моделировать ИК-спектры ионизованных ПАУ. Модель XGBoost показывает наивысшую среднюю точность предсказания, тогда как графовая нейронная сеть обеспечивает большую точность в предсказании ключевых особенностей спектров отдельных молекул. Нейросетевой подход обладает значительным потенциалом для дальнейшего развития благодаря своим возможностям в работе с молекулярными графиками, включая возможные пути решения ограниченной точности предсказания для слабо представленных классов, таких как гетероатомные ПАУ, например, с использованием переноса обучения (transfer learning).

Литература

1. L. J. Allamandola et al., *Astrophys. J.*, **1999**, 511 (2), L115.
2. B. G. Beglaryan et al., *J. Chem. Inf. Model.*, **2025**, 65 (10), 4854-4865.

ОЦЕНКА КОРРЕЛЯЦИИ «ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ – МИКРОСТРУКТУРА – МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА» ДЛЯ ОТЛИВОК ИЗ ВЫСОКОПРОЧНОГО ЧУГУНА

Беляев С.А., Екимова Т.А.

*Петрозаводский государственный университет,
185035, Петрозаводск, пр. Ленина, 33*

В современных металлургических производствах качество отливок из высокопрочного чугуна имеет критически важное значение, так как напрямую влияет на эксплуатационные характеристики. Надежные предсказательные модели, способные прогнозировать свойства отливок необходимы для эффективного управления процессом производства. Одним из первых шагов для построения предсказательных моделей на основе искусственного интеллекта является описательный разведочный анализ, в том числе корреляционный анализ.

В работе выполнен корреляционный анализ между химическим составом, микроструктурой и механическими свойствами отливок из высокопрочного чугуна для последующего использования полученных результатов в разработке предсказательных моделей.

В ходе корреляционного анализа явных зависимостей между химическим составом и механическими свойствами отливок выявлено не было, что в свою очередь разнится с литературными данными¹. Наиболее значимым оказалось влияние содержания хрома, меди, никеля и магния (от 0,1003 до 0,3033).

Были обнаружены явные зависимости между механическими свойствами и содержанием перлита, феррита и цементита в структуре высокопрочного чугуна. Для них коэффициент корреляции составил от 0,2429 до 0,7750, что в свою очередь подтверждается литературными данными¹. Явных сильных корреляций между микроструктурой и химического состава высокопрочного чугуна не выявлено. Наиболее значимое влияние на механические свойства оказывает содержание хрома и магния с коэффициентами 0,2247 и 0,2771 соответственно.

Полученные данные об отсутствии сильных корреляционных зависимостей микроструктуры и механических свойств от химического состава отливок говорят о более сложном, комплексном влиянии химического состава, а также о необходимости учета внешних факторов, например, температуры заливки. Выявленные закономерности могут служить основной для разработки предсказательных моделей.

Литература

1. Лахтин Ю. М., Леонтьева В. А. Материаловедение. - М.: Металлургия, 1980

POGE: ФИЗИЧЕСКИ-ИНФОРМИРОВАННЫЙ ФРЕЙМВОРК ДЛЯ ДИЗАЙНА ПОЛИМЕРОВ

**Беспалов И.А., Злобин И.С., Шнайдер М.Ю.,
Аверочкин Г.М., Александров Е.В.**

Центр НТИ «Цифровое материаловедение: новые материалы и вещества»
МГТУ им. Н.Э. Баумана, 105005, Москва, 2-я Бауманская 5/1

Недавние достижения в области машинного обучения ускорили прогресс в химии, открыв новые возможности для молекулярного дизайна, прогнозирования свойств и открытия материалов. В частности, генеративные модели в перспективе могут позволить напрямую решать задачу поиска оптимальной структуры полимера с требуемыми макроскопическими свойствами¹. Однако существующие генеративные модели часто не способны создавать химически валидные полимерные структуры, что затрудняет достижение этой цели².

В данной работе представлен PoGE (Polymer Generation and Evaluation) – фреймворк, состоящий из двух взаимодополняющих компонентов: физически-информированного бенчмарка для полимеров и генеративной модели на основе трансформера, адаптированной к SMILES-представлениям полимеров. Бенчмарк адаптирует и развивает устоявшуюся в домене низкомолекулярных соединений методологию сравнения распределений дескрипторов сгенерированных и экспериментальных структур с помощью расстояния Вассерштейна³, а предложенная генеративная модель, обученная на гибридном корпусе синтетических и экспериментальных SMILES, обеспечивает высокое химическое правдоподобие гипотетических структур (Таблица 1).

Таблица 1. Расстояние Вассерштейна между распределениями дескрипторов сгенерированных структур и базой данных экспериментальных полимеров

Модель	Молярная масса	Доля ароматики	Доля вращаемых связей	Доля гетероатомов	TPSA
PI1M ¹	64	0.068	0.062	0.010	8.3
PolyTAO ²	195 ± 24	0.108 ± 0.012	0.038 ± 0.005	0.048 ± 0.004	17.5 ± 0.8
PoGE	33 ± 2	0.026 ± 0.002	0.030 ± 0.002	0.016 ± 0.001	4.6 ± 0.3

Литература

1. Ma R., Luo T., *J. Chem. Inf. Model.* 2020, **60**, 4684–4690
2. Qiu H., Sun Z., *Npj Comput. Mater.* 2024, **10**, 273
3. Polykovskiy D et al., *Front. Pharmacol.* 2020, **11**, 565644.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-73-00026.

**ПРИМЕНЕНИЕ QSPR В ПРОГНОЗИРОВАНИИ
ХАРАКТЕРИСТИК НАНОМАТЕРИАЛОВ ДЛЯ АНАЛИЗА
БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ**

Бойченко Е.С., Кирсанов Д.О.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

QSPR-моделирование (quantitative structure-property relationship) — вычислительный метод прогнозирования химических свойств соединений по их молекулярной структуре, широко применяемый в дизайне лекарств для сокращения эмпирических экспериментов. В этой области доступны большие выборки известных соединений с описанными свойствами, однако в последние годы показано, что QSPR эффективно работает и на малых выборках, например, для предсказания аналитических характеристик (чувствительности и селективности) потенциометрических сенсоров по структуре ионофоров в мембранах. [1].

Использование QSPR-моделирования снижает стоимость разработки мультисенсорных систем, требующих синтеза множества вариантов чувствительных мембран. Такие системы востребованы для экспресс-анализа биологических проб с целью диагностики и мониторинга лечения различных заболеваний [2]. Для построения регрессионной модели, связывающей молекулярную структуру материала и его свойства, структура представляется в виде набора дескрипторов: например, наличия тех или иных функциональных групп, диэлектрической проницаемости и т.д. В работе представлены результаты процедуры выбора дескрипторов для набора молекул-кандидатов (каликсаренов) для создания нанофотонной сенсорной системы для быстрого детектирования летучих органических соединений в газообразных биообразцах. В рамках этого эксперимента для различных каликсаренов с помощью DFT методов были рассчитаны величины ΔG взаимодействия с молекулами пропанола-1 и ацетона в газовой фазе, а также другие характеристики (объем полости, HOMO, LUMO). Была показана удовлетворительная корреляция для регрессионных моделей, обученной на оптимизированном наборе дескрипторов ($R^2 > 0,6$), достаточная для полукачественной оценки рассчитанных характеристик каликсаренов. Такой подход позволяет сократить время расчетов благодаря использованию структурных дескрипторов молекул.

Литература

- [1] Vladimirova N. et al. // Chemosensors. 2022. Т. 10. №. 2. С. 43.
[2] Gasparri R. et al. // Journal of Breath Research. 2022. Т. 16. №. 4. С. 046008.

ЦИФРОВОЙ УЧЕБНИК

**Бринк И.Ю., Миргородский А.И.,
Рябов Г.В., Коба В.Ю.**

*Южно-Российский Государственный политехнический университет
им. М.И. Платова
346428, г. Новочеркасск, ул. Просвещения, 132*

Учебник - книга, в которой систематически излагаются основы знаний в определённой области; учебник является основным видом учебной литературы¹.

Электронный учебник - информационная система комплексного назначения, обеспечивающая с помощью автоматизированного управления, без обращения к бумажным носителям информации, реализацию дидактических возможностей информационных и коммуникационных технологий во всех звеньях дидактического цикла процесса обучения².

Цифровой (offline/online) учебник объединяет эти два понятия – книга, имеющая цифровое расширение в интернете.

Структура цифрового учебника состоит из двух частей А - печатной и Б – электронной. Печатная часть позволяет непосредственно по тексту с помощью QR-кодов или маркеров выходить на расширение соответствующего раздела в интернете.

А. Печатное издание.

Тип печатного издания может носить профориентационный, научно-популярный, просветительский или учебный характер.

Б. Электронное издание.

Углубленная представление материала.

Связанная база данных, гиперссылки.

Визуализация материала: дополненная реальность, видео контент, мультипликация.

Интерактивный функционал: тестирование, контроль знаний, геймификация, симуляция.

5. Интеллектуальные экспертные системы: моделирование знаний и опыта экспертов, решение различных типов задач, помощь.

Цифровой учебник расширяет дидактические свойства представленного учебного материала.

Литература

1. <https://old.bigenc.ru/education/text/4703878>. Обращение 12.10.2025
2. Толковый словарь терминов понятийного аппарата информатизации образования / сост.: И. В. Роберт, Т. А. Лавина. М.: ИИО РАО, 2009. 96 с.

ГИБРИДНЫЙ ИИ/МД ПОДХОД ДЛЯ ДИЗАЙНА АНТИБИОТИКО-СВЯЗЫВАЮЩИХ ЦИКЛИЧЕСКИХ ПЕПТИДОВ

Буданов М.Я.^а, Тальдаев А.Х. ^{а,б}, Серов Н.С. ^а

^а Университет ИТМО, 197101 Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49

^б Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141701 Долгопрудный, Институтский пер., д. 9

Присутствие остаточных количеств антибиотиков в пищевых продуктах является одной из причин роста антимикробной резистентности, поэтому требуется разработка быстрых и доступных методов контроля. Лабораторные подходы на основе ВЭЖХ–МС/МС остаются эталоном, однако они дороги и малопригодны для экспресс-скрининга. Циклические пептиды рассматриваются как удобные селективные инструменты идентификации низкомолекулярных соединений благодаря повышенной стабильности по сравнению с линейными аналогами, аптамерами и белками. Они демонстрируют высокую специфичность к различным мишениям и уже применяются в клинической практике [1,2]. На этом фоне задача создания циклических пептидных рецепторов для контроля остаточных количеств антибиотиков напрямую связана с развитием портативных электрохимических сенсоров, которые обладают высокой чувствительностью и скоростью работы при умеренной стоимости [3,4]. В настоящем исследовании используется сочетание молекулярной динамики (МД) и методов искусственного интеллекта (ИИ). МД моделирование служит физической основой для оценки устойчивости комплексов пептид-антибиотик и уточнения структурно-динамических факторов связывания, а генеративные и предсказательные модели ИИ помогают отбирать и предлагать перспективные циклические последовательности под реальные условия экспресс-детекции. Такой подход ориентирован на сокращение временных и материальных затрат, формирует платформу для дальнейшей интеграции с портативной аналитикой.

Литература

1. White C.J., Yudin A.K. *Nat. Chem.* 2011, 3, 509–524.
2. Zhang H., Chen S. *RSC Chem. Biol.* 2022, 3, 18–31.
3. Gaudin V. *Biosens. Bioelectron.* 2017, 90, 363–377.
4. Yang K.K., Wu Z., Arnold F.H. *Nat. Methods* 2019, 16, 687–694.

Исследование выполнено при поддержке НИРСИИ Университета ИТМО, проект № 640100.

ПОТРЕБНОСТИ В ИИ ДЛЯ ДОВЕДЕНИЯ ДО КЛИНИКИ НОВЫХ АНАЛЬГЕТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ

Бурмистров В.В.

*Волгоградский государственный технический университет, пр. им. В.И. Ленина,
д. 28, г. Волгоград, 400005, Российская Федерация*

В последние годы, на различных моделях *in vivo* было многоократной доказано что 1,3-дизамещенные мочевины, содержащие липофильные фрагменты, являются эффективными ингибиторами растворимой эпоксидгидролазы (sEH). Терапевтический эффект таких соединений выражается в заметной анальгетической активности в отношении нейропатической боли. К настоящему моменту синтезированы молекулы способные ингибировать sEH в субнаномолярных концентрациях, как, например, наше соединение-лидер **AMHDU** ($IC_{50} = 0.4$ нмоль/л), которое недавно показало ярко-выраженный анальгетический эффект *in vivo* [1].

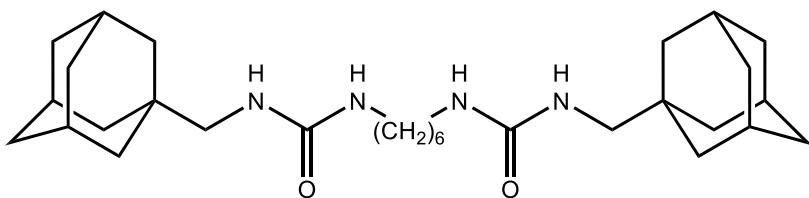


Рисунок 1. Структура ингибитора **AMHDU**

Однако профиль фармакокинетики таких соединений препятствует их выходу на клинические испытания. В связи с этим нами проводится модификация липофильного фрагмента молекул-лидеров. Предсказание ингибирующей активности в отношении sEH посредством докинга достигло впечатляющих результатов, в то время как предсказание физико-химических свойств и профиля фармакокинетики остается не до конца решенной задачей. В первую очередь именно профиль фармакокинетики является ограничением для вывода на рынок таких препаратов. В тоже время изучение профиля с помощью натурных *in vivo* (на животных) испытаний является самым дорогостоящим (не менее \$10 000) процессом.

В связи с этим требуются новые эффективные способы прогнозирования как физико-химических свойств синтезируемых соединений (температура плавления, растворимость в воде), так и относящихся к профилю фармакокинетики (адсорбцию, распределение, время полувыведения, скорость метаболизма ферментами печени, подверженность воздействию цитохромов P450).

Литература

- Babkov D., Eliseeva N., Adzhienko K., Bagmetova V., Danilov D., McReynolds C.B., Morisseau C., Hammock B.D., Burmistrov V. *Int. J. Mol. Sci.*, **2024**, 25, 8841. doi 10.3390/ijms25168841

АНАЛИЗ ГЕОМЕТРИКО-ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СВОБОДНОГО ПРОСТРАНСТВА В МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСАХ

Бухтеева Е.О.,^а Шевченко А.П.,^{а,б} Блатов В.А.^а

^а Самарский государственный технологический университет,
443100, Самара, ул. Молодогвардейская, 244,

^б Самарский филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,
443011, Самара, ул. Ново-Садовая, 221

За последние 30 лет научное сообщество достигло выдающихся успехов в изучения металл-органических каркасных структур (МОКС) – им было найдено применение в разнообразных областях химии и материаловедения, в первую очередь благодаря большому спектру свойств, которые зависят от природы и характеристик металла и лигандов, образующих соединение.

Одной из наиболее вариабельных характеристик МОКС является пористость – в зависимости от связности кристаллической структуры и геометрии связей атомов соединения с одними и теми же структурными группами могут иметь пористость до 90% и выше.

В ходе работы для 937 МОКС была рассчитана теоретическая пористость (P) методом Вороного¹, а для их упрощенных моделей проведены идентификация и анализ геометрико-топологических характеристик свободного пространства при помощи метода натурального тайлинга². Предлагаемый метод уже был успешно использован для анализа и классификации свободного пространства в цеолитах³ и аллотропах углерода⁴.

По результатам исследования были созданы электронные коллекции топологических типов лигандов (TTL) и тайлов (TTT), доступные на онлайн-платформе TopCryst (<https://topcryst.com>), в которых содержатся данные об их упрощенных и исходных моделях, информация о встречаемости. Изучено влияние топологических характеристик состава каркаса и свободного пространства в нем на пористость МОКС.

Литература

1. Blatov V.A. *Crystallography Reviews*, 2004, **10**, 249.
2. Blatov V.A., Delgado-Friedrichs O., O'Keeffe M. and Proserpio D.M. *Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography*, 2007, **63**, 418.
3. Blatova O.A., Golov A.A., Blatov V.A. *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials*, 2019, **234**, 421.
4. Blatov V.A., Yang C., Tang D., et al. *npj Computational Materials*, 2021, **7**, 15.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-13-00076.

**ДИЗАЙН ГИБРИДНЫХ ГАЛОГЕНОВИСМУТАТОВ(ІІІ) И
ГАЛОГЕНОАНТИМОНАТОВ(ІІІ) С 1D-РАЗМЕРНОЙ АНИОННОЙ
ПОДСТРУКТУРОЙ ДЛЯ ОПТОЭЛЕКТРОННЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ
МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ**

Быков А.В., Шевельков А.В.

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет,
119991, Москва, Ленинские горы 1с3*

Органо-неорганические галогенометаллаты постпереходных элементов обладают невероятным структурными разнообразием и при этом сочетают в себе превосходные полупроводниковые свойства. Простота синтеза, возможность управления структурой и составом открывают большие перспективы для тонкой настройки физико-химических характеристик этих соединений и применения их в качестве оптоэлектронных материалов, прежде всего, в фотовольтаике и люминесцентных приложениях.¹ Требования к экологичности и стабильности потенциальных материалов склонили нас к рассмотрению гибридных низкоразмерных (1D) галогеновисмутатов(ІІІ) и галогеноантимонатов(ІІІ) в данном исследовании. Проблемой осуществления направленного синтеза органо-неорганических галогенометаллатов(ІІІ), решению которой посвящена данная работа, является отсутствие установленной взаимосвязи «природа органического катиона – структура образующегося галогенометаллата(ІІІ) – свойство».

Мы представляем собственный датасет из 238 экспериментально установленных кристаллических структур галогенометаллатов(ІІІ) с анионной подструктурой типа $\alpha\text{-}\{\text{MX}_4\}^-$ ($\text{M} = \text{Bi}, \text{Sb}; \text{X} = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$). Также демонстрируем его применение для решения задачи QSPR (quantitative structure-property relationships) по предсказанию ширины запрещенной зоны (ШЗЗ) рассматриваемых соединений. На основе кристаллографических данных нами были выявлены наиболее релевантные структурные дескрипторы и определена их иерархия. Точность предсказания ШЗЗ построенными моделями составила ~0.1 эВ. Кроме того, мы провели анализ органических катионов, содержащихся в датасете, с целью установление круга органических молекул, благоприятствующих образованию аниона $\alpha\text{-}\{\text{MX}_4\}^-$. С помощью подхода кластеризации в пространстве молекулярных дескрипторов нами было показано, что важнейшую роль играет топологическое распределение электронной плотности катиона.

Литература

1. Sun J., Wu J., Tong X., Lin F., Wang Y., Wang Z.M. *Advanced Science*, 2018, **5**, 1700780.

Работа выполнена при поддержке Некоммерческого Фонда развития науки и образования "Интеллект".

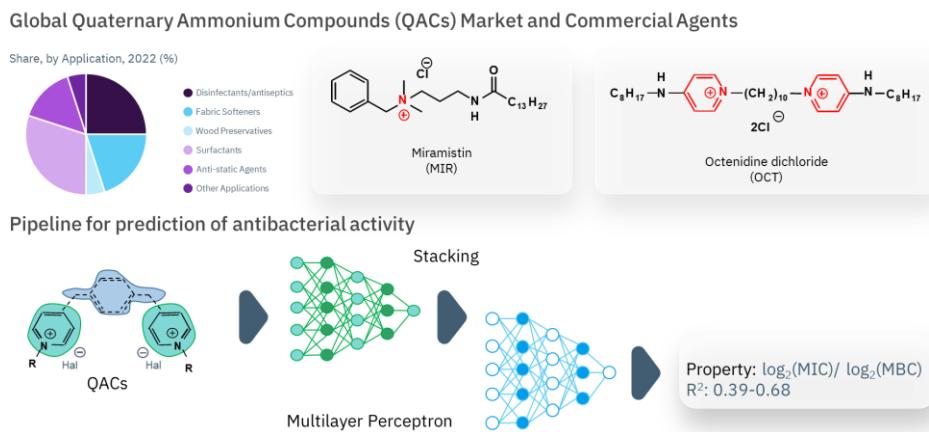
ДИЗАЙН АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ ПРЕПАРАТОВ В 21 ВЕКЕ

**Верещагин А.Н.^а, Фролов Н.А.^а, Сеферян М.А.^а,
Детушева Е.В.^{а,б}, Ильин Е.А.^а, Медведев М.Г.^а**

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

^б Государственный научный центр прикладной микробиологии и биотехнологии,
142279, Московская обл., г.о. Серпухов, п. Оболенск, 24

Устойчивость патогенных микроорганизмов к традиционным методам лечения является одной из самых острых проблем современности и рассматривается как фактор глобальной биологической и экономической угрозы. В настоящее время на Российском рынке медицинских изделий значительная часть антисептических средств сделано на основе четвертичных аммониевых соединений (ЧАС)¹⁻². В представленной работе в качестве ответа на нарастающую угрозу предложен оригинальный подход к дизайну новых типов ЧАС, превосходящих по активности известные коммерческие антисептики, а также обсуждается потенциал применения машинного обучения, как эффективного инструмента по предсказанию активности антибактериальных препаратов.



Литература

- Vereshchagin A. N. Quaternary Ammonium Compounds (QACs) and Ionic Liquids (ILs) as Biocides: From Simple Antiseptics to Tunable Antimicrobials / A. N. Vereshchagin, N. A. Frolov, K. S. Egorova, M. M. Seitkalieva, V. P. Ananikov // International Journal of Molecular Sciences. – 2021. – Vol. 22, Iss. 12. – 6793.
- Vereshchagin A. N. From Antibacterial to Antibiofilm Targeting: A Paradigm Shift in the Development of Quaternary Ammonium Compounds (QACs) / E. A. Saverina, N. A. Frolov, O. A. Kamanina, V. A. Arlyapov, A. N. Vereshchagin, V. P. Ananikov // ACS Infectious Diseases. – 2023. – Vol. 9, Iss. 3. – P. 394–422.

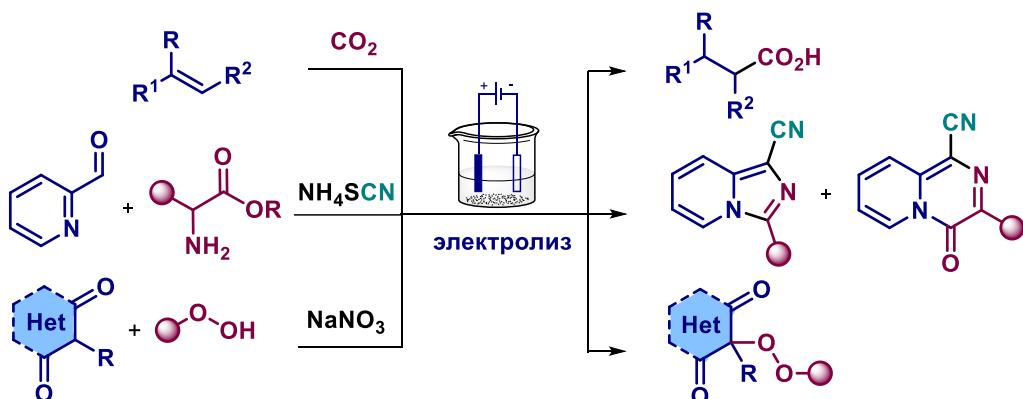
*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ
(соглашение № 075-15-2024-531)*

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОБРАЗОВАНИЯ С-С И С-О СВЯЗЕЙ

**Виль В.А., Битюков О.В., Устюжанин А.О.,
Скокова К.В., Гришин С.С., Терентьев А.О.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991,
Москва, Ленинский проспект 47*

В настоящее время электроорганический синтез рассматривается как одна из наиболее активно развивающихся областей современной органической химии. Представлены созданные методы образования связей С-С и С-О. Разработан электрохимический метод гидрокарбоксилирования производных енолов с использованием CO₂.¹



Продемонстрирована возможность применения системы NH₄SCN/электрический ток для введения цианогруппы. Разработанная концепция была применена в электрохимическом синтезе циано-замещенных гетероциклических соединений из пиридин-2-карбальдегида, α -амино-эфиров и NH₄SCN.²

Открыто электрохимическое генерирование ¹ВиОО радикала из ТВНР и разработан препаративный электросинтез органических пероксидов.³ Электрический ток позволяет проводить радикальное пероксидирование без традиционных инициаторов: переходных металлов, источников йода, высокой температуры или облучения.

Литература

1. Ustyuzhanin, A.O.; Bityukov, O.V.; Sokolovskiy, P.V.; Merkulova, V.M.; Illovaisky, A.I.; He, L.-N.; Vil', V.A.; Terent'ev, A.O. *Chem. Commun.*, **2024**, 60, 8099-8102
2. Grishin, S.S.; Ustyuzhanin, A.O.; Vil', V.A.; Terent'ev, A.O. *Chem. Eur. J.* **2025**, e202404051.
3. Bityukov, O.V.; Skokova, K.V.; Vil', V.A.; Nikishin, G.I.; Terent'ev, A.O. *Org. Lett.* **2024**, 26, 166.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-43-00111.

ИЗУЧЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ИК-ФУРЬЕ СПЕКТРОСКОПИИ В СОЧЕТАНИИ С ХЕМОМЕТРИЕЙ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВИДОВОЙ АУТЕНТИЧНОСТИ МОЛОКА

**Вобликова Т.В., Юсупова Ю.Ш.,
Басма Н.Х., Кузнецов В.А.**

Кубанский государственный технологический университет, 350072, Россия, Краснодарский край, г. Краснодар, ул. Московская, д. 2

Аутентификация молочных продуктов включает в себя некоторые аналитические методы, способные подтвердить, что молочный продукт соответствует указанным на этикетке характеристикам, которые соответствуют действующим законам и нормативным актам¹. Анализ козьего молока на фальсификацию имеет большое значение для обеспечения его качества, подлинности и защиты потребителей от мошенничества ^{1,2}. В ходе исследований разработан метод, основанный на данных анализа полученных с использованием ИК-Фурье спектроскопии и интегрированный с методом PLSR. Предложенный метод может быть применен для быстрого и недорого неразрушающего контроля видовой принадлежности исходного молочного сырья и молочных продуктов из него. Рассматриваемый метод способен гарантировать хорошее предсказание, содержания в качестве примеси в козьем молоке коровьего. Однако необходимо увеличение набора данных для классификации и объединение информации о нескольких различных образцах «чистого» молока. Создание эталонного спектра козьего и коровьего молока в качестве стандарта имеет большое значение для долгосрочного успеха моделирования, сочетающего особенности видового состава и естественных его биологических вариаций. Для использования предложенного метода в молочной промышленности необходимо создание объединенной репрезентативной базы данных для надежного, дешевого и быстрого контроля аутентичности молочного сырья и молочных продуктов перед их коммерциализацией.

Литература

1. Smaoui S, Tarapoulouzi M, Agriopoulou S, D'Amore T, Varzakas T. Current State of Milk, Dairy Products, Meat and Meat Products, Eggs, Fish and Fishery Products Authentication and Chemometrics. Foods. 2023 Nov 24;12(23):4254. doi: 10.3390/foods12234254. PMID: 38231684; PMCID: PMC10706688.
2. La Torre C, Caputo P, Cione E, Fazio A. Comparing Nutritional Values and Bioactivity of Kefir from Different Types of Animal Milk. Molecules. 2024 Jun 6;29(11):2710. DOI: 10.3390/molecules29112710. PMID: 38893583; PMCID: PMC11173642.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 24-26-00160, <https://rscf.ru/project/24-26-00160/>.

БОЛЬШИЕ ЯЗЫКОВЫЕ МОДЕЛИ (LLM) В ХИМИИ: КАК ЭТО РАБОТАЕТ И ЗАЧЕМ ЭТО НУЖНО

Ворожцов А.П., Китина П.В.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47*

Современные большие языковые модели (LLM) демонстрируют значительный потенциал за пределами обработки естественного языка, находя применение в различных научных дисциплинах, в частности, в химии. Они способны решать такие задачи, как прогнозирование свойств соединений, генерация новых молекулярных структур по текстовому описанию и анализ научной литературы. Однако фундаментальным ограничением LLM является склонность к «галлюцинациям» – генерации правдоподобной, но фактологически некорректной информации, что неприемлемо для исследовательской работы.

Для преодоления этого ограничения используется парадигма Retrieval-Augmented Generation (RAG), которая наделяет LLM доступом к внешним, актуальным данным и базам знаний. В рамках этого подхода модель извлекает релевантные документы – научные публикации, патенты или экспериментальные данные – и формулирует ответ, строго основанный на предоставленных источниках. Дальнейшее развитие заключается в создании AI-агентов, где LLM выполняет функцию интеллектуального ядра, способного к планированию и последовательному использованию специализированных инструментов, таких как химические базы данных (PubChem, Reaxys), программные пакеты для вычисления молекулярных дескрипторов (RDKit) или планировщики синтеза. Этот подход позволяет исследователям получать комплексные ответы, объединяющие информацию из разрозненных источников с результатами вычислительных моделей, что значительно ускоряет процесс исследований в области химии.

МЕТОДЫ ЦИФРОВОЙ ХИМИИ ПОМОГАЮТ ОБЪЯСНИТЬ НЕОБЫЧНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ УГЛЕВОДОВ

**Гербст А.Г., Крылов В.Б., Комарова Б.С.,
Аргунов Д.А., Яшунский Д.В., Нифантьев Н.Э.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47*

Методы цифровой химии являются полезным инструментом для изучения факторов, влияющих на протекание химических реакций. В настоящем сообщении рассмотрены два типа химических превращений углеводов, протекающих неожиданно с точки зрения базовых принципов органической химии. Это стереоконтролирующий эффект удалённых от аномерного центра ацильных защитных групп, способствующий избирательному 1,2-цис-гликозилированию, проведение которого часто представляет препартивную синтетическую проблему (Рисунок 1А), а также серия пиранозид-фуранозидных перегруппировок (Рисунок 1Б-Г), сопровождающихся сужением углеводного цикла. Исследование указанных процессов проводилось с применением квантово-химических методов функционала плотности и связанного кластера, DLPNO-CCSD(T). В итоге было найдено объяснение стереоконтроля в случае оксокарбениевых интермедиатов 1А, и была выяснена определяющая роль внутримолекулярных взаимодействий О-заместителей, делающих энергетически выгодными фуранозные формы в ходе сужения углеводного цикла.

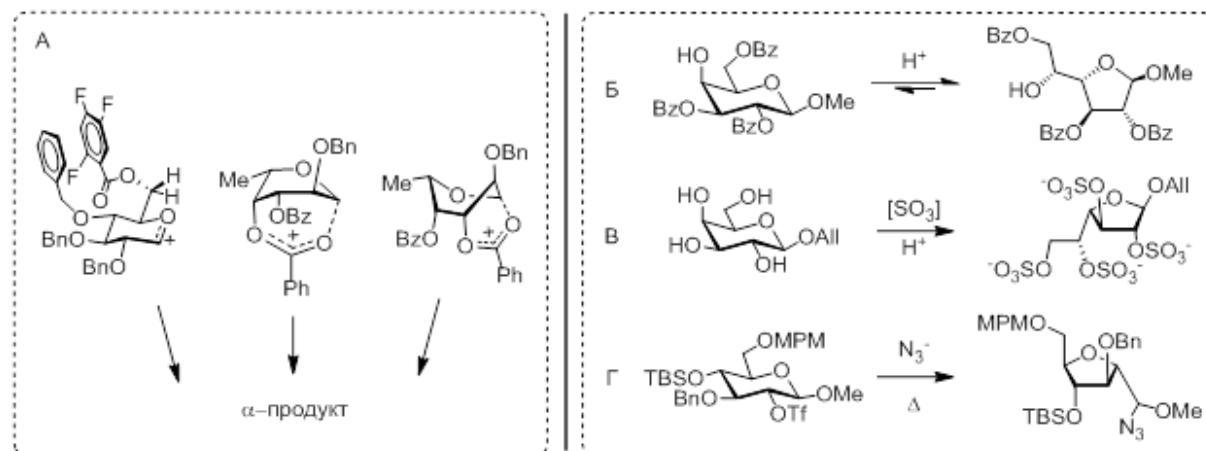


Рисунок 1. Оксокарбениевые ионы – интермедиат реакции гликозилирования (А); три типа пиранозид-фуранозидной перегруппировки (Б-Г).

Работа выполнена при финансовой поддержке МОН, проект 075-15-2024-531.

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ В ОБЛАСТИ ЭЛЕКТРОХИМИИ: ТОНКИЕ ПРОВОДЯЩИЕ МАТЫ НА ОСНОВЕ GO/rGO

Глазкова Д.А., Смирнов Е.А.

*Научный центр Инфохимии, Университет ИТМО,
197101, Санкт-Петербург, Россия*

Открытие графена — двумерного аллотропа углерода с гексагональной решёткой — инициировало масштабные исследования в нанотехнологиях вследствие его исключительных свойств¹. Производные графена, оксид графена (GO) и восстановленный оксид графена (rGO), наследуют слоистую морфологию, однако функционализированы кислородсодержащими группами (=O, -OH, -O-, -COOH), количества которых в них отличается,² что обуславливает их уникальные свойства, расширяя сферу применения материалов.³

В работе представлен новый подход к синтезу больших хлопьев GO модифицированным методом Хаммерса⁴ с последующим восстановлением до rGO с помощью NaBH₄, C₆H₇O₆Na, NH₂OH с целью подбора оптимального для последующего предсказания свойств материалов по данным относительной степени восстановления. Синтезированные материалы наносили на кремниевые подложки на интерфейс гексан–вода при помощи подъёмного столика для получения тонких проводящих плёнок для их применения в области электрохимии.



Рисунок 1. Схема создания подложек на интерфейсе

Литература

1. Pang K. et al. Highly conductive graphene film with high-temperature stability for electromagnetic interference shielding // Carbon N. Y. Elsevier Ltd, 2021. Vol. 179. P. 202–208.
2. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene PROGRESS // Nat. Mater. 2007. Vol. 6, № 3. P. 183–191.
3. Wu J. et al. Graphene oxide for photonics, electronics and optoelectronics // Nat. Rev. Chem.
4. Hummers W.S., Offeman R.E. Preparation of Graphitic Oxide // J. Am. Chem. Soc. 1958. Vol. 80, № 6. P. 1339.

CONTRASTIVE SPECTRUM–MOLECULAR PRETRAINING (CSMP): ПОСТРОЕНИЕ ПОИСКОВОГО ХИМИЧЕСКОГО ПРОСТРАНСТВА ДЛЯ СОПОСТАВЛЕНИЯ МАСС-СПЕКТРОВ И МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Голов И.В., Лукманов Р.А.

*AHO ВО Университет Иннополис,
420500, Республика Татарстан, Иннополис, ул. Университетская д. 1*

Тандемная масс-спектрометрия (MC/MC) является одним из ключевых инструментов идентификации органических соединений. Традиционные методы, основанные на библиотечном поиске (NIST, Wiley и др.), сталкиваются с ограничениями: неполнота каталогов, трудозатратность их поддержания, вариативность спектров при наличии изомеров и множественных путей фрагментации. Это обосновывает необходимость создания устойчивых и адаптивных подходов, которые будут учитывать фундаментальные химические принципы и вариативность снятия спектра при различных экспериментальных условиях.

В работе детально изучается и дорабатывается фреймворк контрастного обучения глубоких нейросетей¹⁻³, направленный на создание интерпретируемого химического пространства и системы семантического поиска для сопоставления пар MC/MC-спектр и молекулярной структуры соединения. В методе используются специализированные модели кодировщики: спектральный (MLP модель) и молекулярный (GNN модель), проецирующие объекты в общее поисковое химического пространство. InfoNCE-функция потерь с косинусной метрикой расстояния обеспечивает близость связанных пар и разделение несвязанных. За счет формирования разнообразного датасета MC/MC-данных, применение бимодального кодирования, а также внедрения процедуры поиска ближайших соседей для уточнения кандидата структуры, планируется повысить точность сопоставления и устойчивость поиска к вариативности экспериментальных условий.

Практическое применение предложенного подхода позволит быстро и эффективно аннотировать спектры, включая соединения, отсутствующие в библиотечных базах, и ускорит идентификацию наиболее вероятных кандидатов для последующей верификации.

Литература

- [1] A. Kalia, et al. arXiv. 2025, 2411.14464. 1–15.
- [2] L. Chen, et al. Chem. 2024, 96 (42), 16871–16881.
- [3] T. Xie, et al.. Chem. 2025, 97 (25), 13350–13360.

МАТЧА: ГЕНЕРАТИВНАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ БЫСТРОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА

Фролова Д.С., *^{a,b} Даулбаев Т.К., *^{a,b}

Севрюгов Е.Ю.,^{a,b} Николенко С.А.,^a Иванков Д.Н.,^{b,a}

Оседецов И.В.,^{c,b} Пак М.А.^a

^a Лиганд Про, Москва, Россия;

^b Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия;

^c Институт искусственного интеллекта AIRI, Москва, Россия.

* авторы внесли равный вклад в работу

В работе обсуждается новая генеративная нейросетевая модель для решения задачи молекулярного докинга, основанная на парадигме сопоставления потоков (flow matching) [1], под названием Матча. На вход модели подаются жёсткий белок и полугибкий лиганд с дополнительными степенями свободы, соответствующими торсионным углам. Таким образом, модель работает на Римановом многообразии, задаваемом сдвигом, поворотом и торсионными углами лиганда.

Архитектурно Матча состоит из трёх DiT-подобных трансформерных моделей [2], применяемых последовательно для уточнения позы, и отдельного трансформера для ранжирования сгенерированных поз и выбора лучшей. Дополнительно применяются быстрые физические фильтры, отбрасывающие позы с явными нарушениями структуры комплекса.

При разработке упор сделан на скорость и физическую валидность. Матча работает примерно в 25 раз быстрее AlphaFold 3 [3]. При этом на наборах данных PDBBind и Astex метод показывает лучшие результаты по доле поз, прошедших проверки PoseBusters [4] при $\text{RMSD} \leq 2\text{\AA}$.

Веса модели и код для запуска генераций находятся в открытом доступе: <https://github.com/LigandPro/Matcha>.

Литература

1. Lipman Y. et al. Flow Matching for Generative Modeling // The Eleventh International Conference on Learning Representations.
2. Peebles W., Xie S. Scalable diffusion models with transformers // Proceedings of the IEEE/CVF international conference on computer vision. – 2023. – C. 4195-4205.
3. Abramson J. et al. Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3 // Nature. – 2024. – T. 630. – №. 8016. – C. 493-500.
4. Buttenschoen M., Morris G. M., Deane C. M. PoseBusters: AI-based docking methods fail to generate physically valid poses or generalise to novel sequences // Chemical Science. – 2024. – T. 15. – №. 9. – C. 3130-3139.

ВЛИЯНИЕ D3 ПОПРАВОК НА ТОЧНОСТЬ MLIP-МОДЕЛЕЙ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ СЛОИСТЫХ КРИСТАЛЛОВ

Домнин А.В., Коваленко А.В.

Институт химии СПбГУ, 198504, Санкт-Петербург, Петергоф

Современные модели машинного обучения для межатомных потенциалов (MLIP) обеспечивают высокую вычислительную эффективность при моделировании материалов, однако часто уступают по точности традиционным квантово-химическим методам. Особую сложность представляют слоистые кристаллы, такие как дихалькогениды переходных металлов, где дисперсионные взаимодействия играют определяющую роль и традиционно учитываются с помощью эмпирических поправок или специально подогнанных расчетных схем^{1,2}.

На выборке из 14 разнородных слоистых кристаллов проведено сравнительное тестирование нескольких MLIP-моделей. Все модели продемонстрировали Среднюю Абсолютную Процентную Ошибку (САПО) в определении перпендикулярного слоям вектора трансляции с в диапазоне 9–13%. Коррекция на дисперсионные силы D3³ существенно повышает точность предсказаний MLIP, позволяет сократить это значение до ~1%, при этом, незначительно улучшая остальные структурные параметры.

Таким образом, добавление эмпирических дисперсионных поправок к MLIP-моделям представляет собой эффективный и обоснованный подход к повышению их надёжности без необходимости дорогостоящего дообучения (fine-tuning). Работа подтверждает перспективность гибридных стратегий, сочетающих данные MLIP с физически мотивированными коррекциями, для точного моделирования материалов.

Таблица 1. Сравнение относительной погрешности структурных параметров рассмотренных кристаллов. В скобках указано значение после применения D3 поправки.

Название модели	САПО (a, b), %	САПО (c), %	САПО (α, β, γ), %
GRACE-2L-OMAT-L ⁴	0.97 (0.80)	10.08 (0.65)	0.08 (0.06)
GRACE-2L-OAM-L	1.25 (0.81)	9.25 (0.82)	0.10 (0.06)

Литература

- Richard, A.; Corà, F. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2023, **127**, 10766–10776c.
- Emrem, B.; Kempt, R.; Finzel, K.; Heine, T. *Advanced Theory and Simulations*, 2022, **5**, 2200055c.
- Grimme, S.; Antony, J.; Ehrlich, S.; Krieg, H. *The Journal of Chemical Physics*, 2010, **132**, 154104
- Lysogorskiy, Y.; Bochkarev, A.; Drautz, R. *arXiv*, 2025.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ТОПЛИВНЫХ ДОБАВОК, ПОЛУЧАЕМЫХ ИЗ БИОСЫРЬЯ

Дубиняк А.М., Максимов А.Л.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

Из-за сокращения запасов ископаемых ресурсов при высоком росте энергопотребления, возникает необходимость вовлечения в переработку альтернативных источников углеводородов. Перспективным возобновляемым сырьем является лигноцеллюлозная биомасса - один из наиболее крупнотоннажных отходов лесной, деревообрабатывающей и целлюлозно-бумажной промышленности. Утилизация таких отходов предполагает их использование, главным образом, для выработки тепловой и электрической энергии, в то время как переработка компонентов биомассы открывает широкие перспективы для получения ценных продуктов нефтехимии и/или синтетических топлив.

Среди ценных соединений, получаемых из целлюлозной части биомассы можно выделить производные фурана, такие как, фурфурол, фурфуриловый спирт, 5-гидроксиметилфурфурол. Лигнинная часть, в свою очередь, является источником ароматических соединений: гвайаколов и фенолов. Одним из наиболее перспективных путей переработки перечисленных соединений являются реакции образования C-C связей (алкилование, конденсация и т.д.), в результате которых получаются C₁₀₊ оксигенаты, которые являются прекурсорами для топлив.

При гидродеоксигенации описанных соединений образуются алканы, применяемые в традиционном топливе, но более экономически выгодным является неполное гидрирование оксигенатов. В связи с этим необходимо развивать методы прогнозирования физико-химических свойств кислородсодержащих молекул для того, чтобы определять область их применения в «альтернативных» топливах.

На основе SMILES-представлений молекул были рассчитаны 2D-дескрипторы Mordred. В рамках QSPR-подхода для моделирования свойств применялись следующие алгоритмы: XGBoost (цетановое число, плотность, теплота сгорания), нейронные сети (температура плавления) и LightGBM (динамическая вязкость). Для всех моделей была проведена оптимизация гиперпараметров, а также

проведен анализ с помощью фреймворка SHAP для интерпретации механизмов функционирования моделей. В результате получены оптимальные модели машинного обучения для предсказания 5 наиболее важных свойств потенциальных топливных добавок, которые возможно получить из возобновляемых ресурсов (Рис. 1).

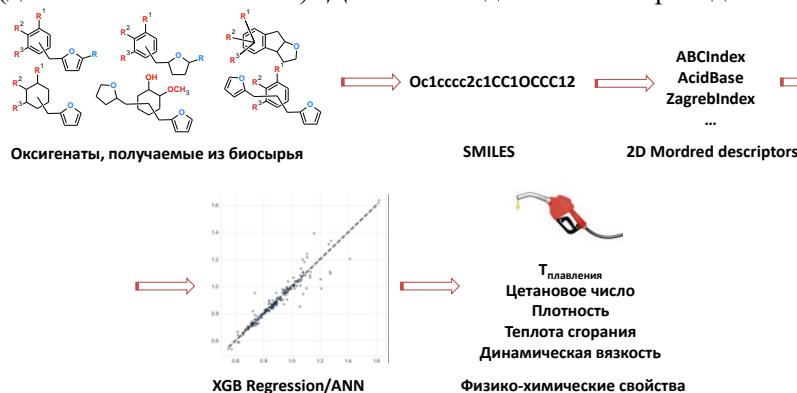


Рис. 1. Общая схема QSPR-модели

СИНЕРГИЯ LLM И GNN: НОВЫЙ ПОДХОД К ПРЕДСКАЗАНИЮ СВОЙСТВ НЕОРГАНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

Дудаков И.В.^{a,b}, Королев В.В.^a, Митрофанов А.А.^{a,b}

^a*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

Институт искусственного интеллекта, 119192, Москва, Россия

^b*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

Химический факультет, 119991, Москва, Россия

Ускорение направленного дизайна материалов с заданными свойствами критически важно для технологического прогресса в энергетике, электронике и других областях. Однако экспериментальное определение свойств или расчет структуры *ab initio* требуют существенных затрат вычислительного времени и ресурсов. Прогнозирование свойств исходя из химического состава остается сложной задачей в силу полиморфизма кристаллов. Существующие предсказательные подходы требуют наличия разрешенной кристаллической структуры, либо предполагают неявный переход от химического состава к кристаллической структуре. Целью работы является разработка альтернативного подхода, преодолевающего ограничения методов, работающих только с химическим составом.

Новый подход методологически состоит из двух этапов. На первой стадии используется большая языковая модель CrystaLLM, решающая задачу генерации CIF-файлов (содержащих предсказанную атомную структуру кристалла) исходя из стехиометрического состава. На второй стадии сгенерированные CIF-файлы используются в качестве входных данных для графовых нейронных сетей (GNN), таких как CGCNN, MEGNet или CartNet. Эти модели, эффективно работающие с представлением кристалла в виде графа, предсказывают целевое свойство на основе гипотетической структуры.

Предложенный двухступенчатый подход продемонстрировал наивысшую точность в прогнозировании всех свойств из датасета SNUMAT (4 из 4) и для 18 из 20 свойств, входящих в датасет JARVIS-DFT из бенчмарка LLM4MatBench, что доказывает его превосходство над существующими методами прямого предсказания свойств на основе химической формулы.

ОСНОВАННЫЕ НА ДАННЫХ ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ КОНФИГУРАЦИОННОГО МНОГООБРАЗИЯ НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

**Еремин Р.А.,^а Кравцов А.В.,^а
Зарипов Р.А.^{б, в}, Буденный С.А.^{а, б}**

^а*Институт искусственного интеллекта AIRI,
123317, Москва, Пресненская наб. 6/2*

^б*Сколковский институт науки и технологий,
121205, Москва, Большой бульвар, 30/1*

^в*SberAI, 121170, Москва, Кутузовский проспект, 32/3*

В своих исследованиях мы сосредоточились на эвристиках рационализированного семплрирования обучающих выборок графовых нейросетей из полных композиционно-конфигурационных пространств для направленного изучения термодинамики функциональных материалов с химическим беспорядком и/или точечными дефектами. Таблица 1 демонстрирует характерные масштабы сокращения числа необходимых для обучения DFT оптимизаций по сравнению с полными конфигурационными пространствами исследованных нами функциональных материалов.

Таблица 1. Статистика объемов композиционно-конфигурационных пространств в прогнозных исследованиях и минимальных наборах данных, необходимых для обеспечения точности прогнозов термодинамических свойств с RMSE < 10 мэВ/атом.

Семейство функциональных материалов	Сложные интерметаллиды ¹	Неорганические перовскиты ^{2,3}	Высшие бориды ⁴	Карбиды Тс ⁵	2D материалы
Полное пространство	16000 ¹	74 000	376 000	332 000	> 3x10 ⁸
Обучающий набор (доля данных)	6000 (37.5 %)	200 (0.3 %)	260 (0.07 %)	450 (0.14 %)	15 000 (< 0.005 %)

Кроме того, описываемые в докладе методики позволяют исследовать термодинамику разупорядоченных материалов с низкими вычислительными затратами и при конечных температурах. Так, мы продемонстрируем механизмы учета влияние различных микросостояний на вклад конфигурационной энтропии в свободную энергию.

Литература

1. Eremin R.A., et al. Crystal Growth & Design, 2022, **22**, 4570-4581
2. Eremin R.A., et al. Computational Materials Science, 2024, **232**, 112672.
3. Krautsou A.V., et al. Scientific Reports, 2025, **15**, 8856.
4. Matsokin, N.A., Eremin R.A., et al. npj Computational Materials, 2025, **11**, 163.
5. Zaripov R.A., Eremin R.A., et al. Acta Materialia (*submitted*).

КОМПЛЕКСЫ НАНОЧАСТИЦА–БЕЛОК КАК БИОАНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕАГЕНТЫ: ВЫБОР СПОСОБОВ ПОЛУЧЕНИЯ И ОЦЕНКА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОДУКТОВ

**Жердев А.В., Зверева Е.А., Сотников Д.В.,
Панферов В.Г., Дзантиев Б.Б.**

*Институт биохимии им. А.Н. Баха, Федеральный исследовательский центр
«Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук,
119071, Москва, Ленинский проспект 33*

Конъюгаты наночастиц и рецепторных биомолекул (антител, аптамеров и др.) – крайне востребованные реагенты, используемые в разнообразных аналитических системах. Объединение наночастиц как носителей и маркеров с селективными рецепторами позволяет осуществлять как формирование и выделение специфических комплексов с целевыми аналитами, так и генерацию регистрируемых сигналов. В этой связи важно, чтобы конъюгаты сохраняли функциональность компонентов и обеспечивали выявление минимальных концентраций анализаторов.

В сообщении представляются накопленные данные о характеристиках конъюгатов, получаемых разными способами, закономерностях изменений их параметров при варьировании состава и условий синтеза, а также об оптимальных препаратах для различных гетерогенных и гомогенных биоаналитических систем. Рассматриваются особенности сферических и разветвленных золотых наночастиц, полиметаллических наночастиц, частиц магнетита как носителей для реагентов, средств прямой и катализитически усиленной генерации оптических сигналов. Сопоставляются сорбционная, ковалентная и аффинная иммобилизация антител и аптамеров, изменения их реакционной способности при взаимодействии с разными по составу и размерам (от 5 до 100 нм) наночастицами и варьировании поверхностной плотности связанных молекул. Отмечается значительная (до 80%) инактивация биорецепторов для ряда широко используемых методик конъюгирования. Характеризуется применение наночастиц в мембранных тест-системах, гомогенных системах с модуляцией оптических свойств при детектировании антибиотиков и других низкомолекулярных соединений, поливалентных белковых и клеточных антигенов. Обсуждаются способы контроля свойств получаемых препаратов, требования к конъюгатам для эффективного использования в различных биоаналитических системах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-16-00273.

ОПТИЧЕСКАЯ КОГЕРЕНТНАЯ ТОМОГРАФИЯ КАК МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕФЕКТОВ В СТРУКТУРЕ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНОГО ВОЛОКНА И ПОЛИЭФИЭФИРКЕТОНА

Злобина И.В.^{a,b}, Алонова М.В.^a,
Егоров А.С.^b, Бекренев Н.В.^a

^a СГТУ имени Гагарина Ю.А.,
410054, Саратов, ул. Политехническая, д. 77.
^b НИЦ «Курчатовский институт»,
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1

В данной работе исследовались образцы монослоя, сформированного на 3D принтере Anisoprint Composer A4 из препрега, армированного жгутом из непрерывных углеродных волокон, пропитанного эпоксидной смолой марки ЭД-20 и покрытого полиэфирэфиркетоном. Были использованы 2 группы образцов с размерами 30x10x1,2 мм – контрольные и опытные, подвергнутые обработке в СВЧ-поле на частоте 2450 МГц. Для инструментальной реализации метода низкокогерентной рефлектометрии был использован оптический когерентный томограф OSC 1300 SS (ThorLabs, США) с длиной волны зондирующего излучения 1300 нм, максимальной глубиной зондирования 3 мм, длиной трека сканирования 5 мм с размером изображения 512 на 720 пикселей в режиме В-сканирования.

Для контрольных образцов ярко выражено наличие области скачка показателя преломления на границе «полимер-волокно», что визуально отображается как яркая горизонтальная линия. В обработанных образцах размеры области со скачком показателя преломления значительно менее протяженные. При анализе В-сканов был отмечен схожий характер ярких линий при переходе зондирующего излучения через границы «воздух-полимер» и «матрица-наполнитель», что определило целесообразность поиска объективных методов для их сравнения.

В качестве количественной оценки полученных результатов была проведена бинаризация сформированных В-сканов. Полученные изображения имеют больший контраст, выделяют области с нужными значениями величин отклика и отображают области с резкими скачками показателя преломления.

Аналитические исследования выполнены с использованием научного оборудования ЦКП «Исследовательский химико-аналитический центр НИЦ «Курчатовский институт».

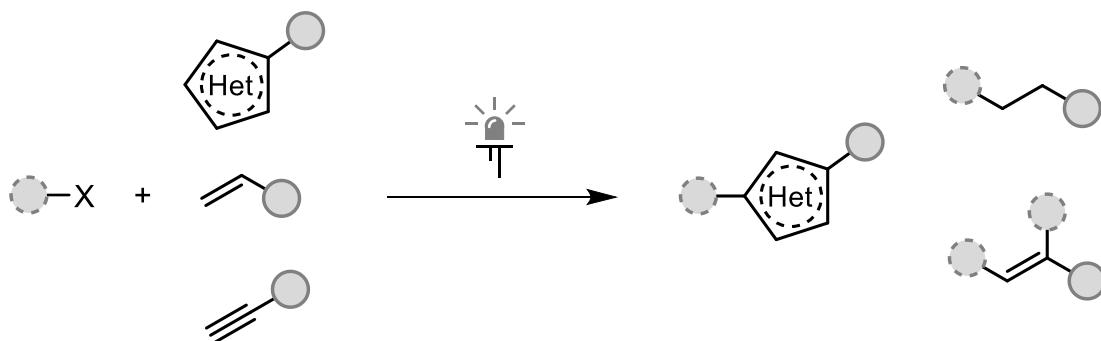
Исследования выполнены при финансовой поддержке гранта РНФ 23-79-00039.

РАЦИОНАЛЬНЫЙ ДИЗАЙН ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

**Зубков М.О., Кособоков М.Д., Трифонов А.Л.,
Панферова Л.И., Супранович В.И., Левин В.В., Дильман А.Д.**

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47

Фотокатализ в видимом свете в последнее десятилетие зарекомендовал себя как эффективный и экологичный подход к проведению химических реакций.¹ Однако задача разработки новых методов активации различных функциональных групп не имеет простого решения и зачастую требует комплексного подхода.² Квантово-химические расчеты, выполняемые в рамках метода теории функционала плотности, являются удобным и важным инструментом для оценки реакционной способности радикальных интермедиатов.³ В докладе будут обсуждены наши последние достижения в области фотокаталитических реакций ненасыщенных систем.⁴⁻⁹



Литература

1. Candish, L., Collins, K.D., Cook, G.C., Douglas, J.J., Gómez-Suárez, A., Jolit, A., Keess, S. *Chem. Rev.* 2021, **122**, 2907.
2. Tyler, J.L., Trauner, D., Glorius, F. *Chem. Soc. Rev.* 2025, **54**, 3272.
3. Bursch, M., Mewes, J.M., Hansen, A., Grimme, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, **61**, e202205735.
4. Malakhova, E.V., Kostromitin, V.S., Cheboksarov, D.Y., Levin, V.V., Dilman, A.D. *J. Org. Chem.* 2024, **89**, 12812.
5. Rubanov, Z.M., Levin, V.V., Dilman, A.D. *Chem. Rec.* 2025, **25**, e202400194.
6. Kupriyanets, L.O., Zubkov, M.O., Kosobokov, M.D., Dilman, A.D. *ChemPhotoChem* 2025, e202500138.
7. Kostromitin, V.S., Supranovich, V.I., Dilman, A.D. *Org. Lett.* 2025, **27**, 7106.
8. Rubanov, Z.M., Koltun, D.S., Levin, V.V., Dilman, A.D. *Org. Lett.* 2025, **27**, 10241.
9. Savchenko, A.G., Zubkov, M.O., Levin, V.V., Dilman, A.D. *Org. Lett.* 2025, **27**, 10831.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, соглашение № 075-15-2024-531.

**ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МЕХАНИЗМОВ АДСОРБЦИИ
КОМБИНИРОВАННЫХ СИСТЕМ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ
ВЕЩЕСТВ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА НЕФТЬ-ВОДА МЕТОДОМ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Иванова А.А., Черемисин А.Н.

*Сколковский институт науки и технологий,
121205, г. Москва, Большой бульвар, д. 30 стр.1*

Существующие подходы молекулярно-динамического (МД) моделирования свойств поверхностно-активных веществ (ПАВ) для нефтедобычи принципиально ограничены использованием упрощенных представлений о составе нефти. Моделирование на основе индивидуальных алканов игнорирует роль полярных смол и асфальтенов, критически влияющих на межфазные свойства, что приводит к некорректной оценке эффективности реагентов. Актуальность исследования заключается в разработке многокомпонентной модели нефти, адекватно описывающей механизмы действия ПАВ на молекулярном уровне и устанавливающей достоверные корреляции "структура ПАВ - состав нефти - эффективность".

В рамках данного исследования методом молекулярной динамики были изучены механизмы синергетического действия бинарных систем ПАВ на границе раздела нефть-вода. Моделирование проводилось для комбинированных систем ПАВ различных типов, включая анионные, катионные, цвиттерионные и неионогенные ПАВ в различных концентрациях и соотношениях компонентов (1:1, 1:2, 2:1).

Результаты продемонстрировали молекулярные причины различного поведения систем в зависимости от типа и концентрации ПАВ. Анализ радиальных функций распределения и профилей плотностей, а также энергий взаимодействий позволил объяснить, почему неионогенные ПАВ усиливают синергизм, приводящий к наименьшему межфазному натяжению в системе по сравнению с индивидуальными ПАВ. Кроме того, было найдено что полярные компоненты конкурируют с ПАВ за место на границе раздела фаз что приводит к замедленной кинетике адсорбции ПАВ. В результате использование модели декана приводит к завышению эффективности ПАВ на 15-25% и некорректному определению оптимальных концентраций.

Проведенное исследование доказало необходимость использования многокомпонентной модели нефти в МД-моделировании, так как это принципиально меняет механизмы адсорбции ПАВ и значения межфазного натяжения. Установленный синергизм бинарных систем ПАВ создают основу для целенаправленного проектирования композиций с заданными межфазными характеристиками для конкретных условий пласта.

ПРОГНОЗ РАСТВОРИМОСТИ В СКСО₂ С ПОМОЩЬЮ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ-ИНФОРМИРОВАННЫХ МЛ-МОДЕЛЕЙ

**Каликин Н.Н.^а, Макаров Д.М.^а, Гуриков П.А.^б,
Будков Ю.А.^{а,в}, Киселев М.Г.^а**

^а Институт Химии Растворов РАН им. Г.А. Крестова,
153045, Иваново, Академическая ул., 1,

^б Hamburg University of Technology, Germany, Hamburg, Eißendorfer Straße 38,
^в Национальный Исследовательский Университет Высшая Школа Экономики,
123458, Москва, ул. Таллинская, д. 34

Актуальность надежного прогнозирования растворимости в сверхкритическом CO₂ обусловлена необходимостью сокращения дорогостоящего экспериментального скрининга. Одним из возможных подходов к решению этой задачи является использование методов машинного обучения. В рамках данной работы собрана крупнейшая из представленных в литературе база данных по растворимости в скCO₂ (~30000 записей для более чем 1000 структур). В докладе будет отмечена важность очистки исходного набора от некачественных межлабораторных дубликатов, а также необходимость применения строгих протоколов разбиения данных при обучении моделей. Отдельно будет продемонстрировано статистически значимое улучшение предсказательной способности моделей за счет внедрения дополнительных дескрипторов, характеризующих термодинамический цикл процесса растворения: температура плавления, энталпия испарения, свободная энергия сольватации, что также способствует интерпретации моделей. Область применимости моделей подтверждена в рамках SHAP-анализа и левериджа.

В качестве практического результата разработан веб-сервис (<http://chem-predictor.icsras.ru/individual/solvscoco/>), позволяющий в реальном времени предсказывать температуру плавления, критические параметры, энталпию испарения и растворимость соединений в скCO₂.

Литература

1. Makarov D. M., Kalikin N., Budkov Y., Gurikov P., Kruchinin S. E., Jouyban A., Kiselev M. G. Improved Solubility Predictions in scCO₂ Using Thermodynamics-Informed Machine Learning Models // Journal of Chemical Information and Modeling. 2025. Vol. 65. No. 8. P. 4043–4056. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.5c00432>

Работа была выполнена при поддержке РНФ (грант № 22-13-00257-П).

СИНТЕЗ СПИРОХРОМАНПИРИМИДИНОВ НА ОСНОВЕ ПИРОГАЛЛОЛА

Карандеева А.С., Богданова Н.А.,
Макарушко Е.Н., Чиркова Ж.В.

*Ярославский государственный технический университет,
150023, Ярославль, Московский проспект, 88*

Спирогетероциклы, содержащие в своем составе кумариновый и пиримидиновый структурные фрагменты, представляют собой важный класс органических соединений и привлекают к себе пристальное внимание за счет широкого спектра их фармацевтических свойств¹⁻³.

Ранее было обнаружено, что кислотно-катализируемая конденсация стирилдигидропириимидинов с резорцином позволяет получить соответствующие спирохроман-пириимидины⁴. Доработав представленную стратегию, мы расширили линейку данного класса соединений⁵.

Целевые структуры **3/4** были получены взаимодействием субстратов **1** с пирогаллом **2** в хлороформе, с добавлением промотора – уксусной кислоты и каталитических количеств метансульфоновой кислоты. Диастереомерную смесь продуктов разделяли дробной кристаллизацией в этилацетате.

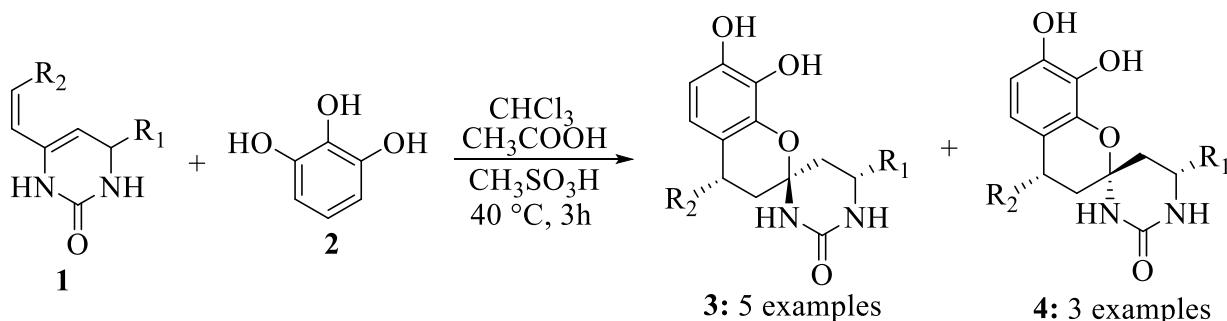


Рисунок 1. Схема синтеза замещенных спирохроман-2,4'-пириимидинов

Строение синтезированных соединений **3** и **4** установлено на основании совокупности спектральных данных, масс-спектрометрии и PCA.

Литература

1. Chitti S., Nandikolla A., Khetmalis Y. M. et al. *Chem. Biodivers.* 2022, **19**(8), e202200304.
2. Othman D. I., Hamdi A., Elhusseiny W. M. et al. *Saudi Pharm. J.* 2023, **31**(11), 101803.
3. Hiesinger K., Dar'in D., Proschak E. et al. *J. Med. Chem.* 2020, **64**(1), 150-183.
4. Karandeeva A. S., Uryadova A. M., Makarova E. S. et al. *Mendeleev Commun.* 2023, **33**(6), 779-781.
5. Karandeeva A.S., Bogdanova N.A., Kabanova M.V. et al. *Molecules* 2025, **30**, 2954.

ПОТЕРЯННЫЕ ДАННЫЕ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ: МАСШТАБЫ ПРОБЛЕМЫ И СКРЫТЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

Кашин А.С., Иванова Н.М., Анаников В.П.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект, 47*

В настоящем исследовании на примере метода электронной микроскопии оценена эффективность использования экспериментальных данных в научных публикациях и проанализированы причины появления так называемых «потерянных данных». На основе анализа массива, насчитывающего около 150 тысяч СЭМ- и ПЭМ-изображений, показано, что более 97% высококачественных микрофотографий остаются невостребованными и не публикуются в рецензируемых научных изданиях.¹ В качестве основных направлений для улучшения показателей использования данных предлагаются: создание единых стандартов хранения и публикации микрофотографий, публикация расширенных наборов данных в виде дополнительных материалов к статьям, а также применение передовых методов обработки изображений для эффективного извлечения, хранения и распространения структурной информации.

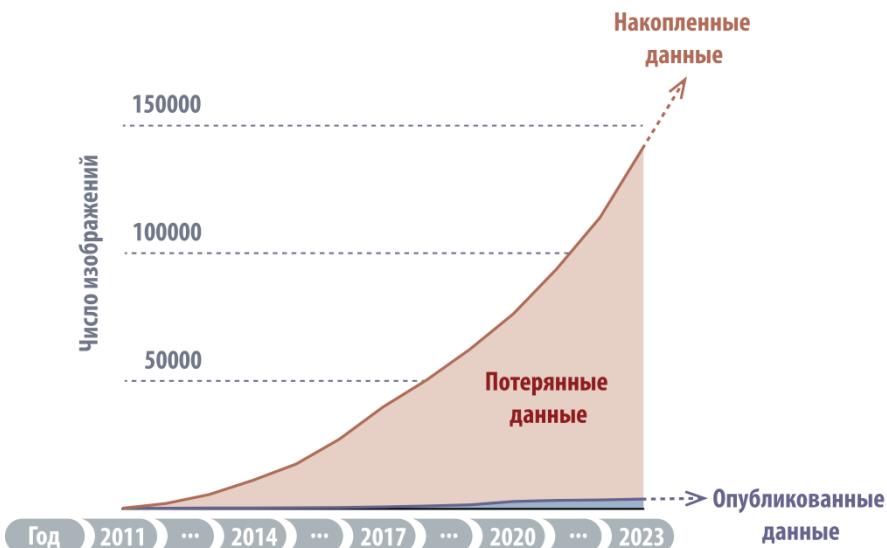


Рисунок 1. Разрыв в интенсивности накопления и публикации данных электронной микроскопии, приводящий к формированию массива «потерянных данных».¹

Литература

1. Ivanova N.M., Kashin A.S., Ananikov V.P. *Chemistry*, 2025, 7, 160.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, соглашение № 075-15-2024-531.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ И КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Квашнин А.Г.

*Сколковский институт науки и технологий,
Большой бульвар 30/1, Москва, Россия*

В цифровом материаловедении исторически было два основных метода для описания свойств материалов: методы квантовой химии, в частности теория функционала электронной плотности и метод классической молекулярной динамики/механики. Основным преимуществом первого является точно, в то время как второй подход позволяет проводить многомасштабное моделирование больших систем.

Развитие методов машинного обучения позволяют объединить преимущества обоих методов: точность квантовой химии и скорость молекулярной динамики. В настоящее время машинообучаемые потенциалы межатомного взаимодействия стали очень эффективным инструментом для предсказания структуры материалов, исследования их свойств. Кроме того, сложность исследуемых материалов также увеличилась.

В докладе будут приведены примеры использования современных методов цифрового моделирования материалов для поиска структур новых конструкционных и функциональных материалов, таких как бориды и карбиды переходных металлов [1–4], поликристаллические системы [5]. Особое внимание будет уделено методам машинного обучения, которые могут использоваться не только для атомистического моделирования, но и для предсказания свойств материалов без прямых структурных расчетов [6].

Литература

1. Kvashnin A.G. et al. New Tungsten Borides, Their Stability and Outstanding Mechanical Properties // J. Phys. Chem. Lett. 2018. Vol. 9, № 12. P. 3470–3477.
2. Kvashnin A.G. et al. Large-Scale Synthesis and Applications of Hafnium–Tantalum Carbides // Adv. Funct. Mater. 2022. Vol. 32, № 38. P. 2206289.
3. Baidyshev V.S., Tantardini C., Kvashnin A.G. Melting simulations of high-entropy carbonitrides by deep learning potentials // Sci. Rep. Nature Publishing Group, 2024. Vol. 14, № 1. P. 28678.
4. Matsokin N.A. et al. Discovery of chemically modified higher tungsten boride by means of hybrid GNN/DFT approach // Npj Comput. Mater. Nature Publishing Group, 2025. Vol. 11, № 1. P. 163.
5. Jalolov F.N. et al. Mechanical Properties of Single and Polycrystalline Solids from Machine Learning // Adv Theory Simul. 2024. Vol. 7, № 5. P. 2301171.
6. Tantardini C. et al. Material hardness descriptor derived by symbolic regression // J. Comput. Sci. 2024. T. 82. C. 102402.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ И ОСОБЕННОСТЕЙ
ОБРАЗОВАНИЯ МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СЛОЕВ В 0D/2D
ГИБРИДНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ**

Коровина А.В.^а, Байдышев В.С.^б, Квашнин Д.Г.^а

^а*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской Академии Наук,
119334, Москва, ул. Косыгина 4,*

^б*Сколковский институт науки и технологий,
121205, Большой бульвар 30, стр 1, Москва, Российская Федерация*

Стремительное развитие области двумерных материалов открывает новый путь для изготовления низкоразмерных структур с желаемыми свойствами управляемым способом. Наиболее перспективными материалами для устройств наноэлектроники в ближайшем будущем являются графен и гетероструктуры на его основе. Таким образом, для расширения области применения графена необходимо создать механизмы контролируемой модификации его электронных и магнитных свойств. Предыдущие исследования показали, что это можно сделать различными методами, например, с помощью различных подложек, механических деформаций, химической функционализации, введения различных дефектов в структуру графена, формирования гетероструктур на основе графена. Комбинируя различные двумерные и квазидвумерные материалы, можно получить слоистые структуры с ван-дер-ваальсовым межслоевым взаимодействием. В таких материалах могут не только сохраняться свойства отдельных компонентов, но и появляться новые уникальные особенности.

Здесь представлены теоретические исследования физико-химических особенностей на границе раздела гибридных структур органика/неорганика с помощью теории функционала электронной плотности, а также машинно обучаемых потенциалов [1-4]. Рассмотрены особенности атомной структуры и физико-химических свойств в паре с возможными способами перестройки локального упорядочения.

Литература

1. E.V.Sukhanova, D. G. Kvashnin, Z. I. Popov. Nanoscale, 2020, **12**, 23248.
2. E. V. Sukhanova, Z. I. Popov, D. G. Kvashnin. Jetp Lett. 2020, **111**, 627.
3. D.G. Kvashnin, V.S. Baidyshev, FlatChem, 2023, **42** 100585.
4. A.V. Korovina, D.G. Kvashnin, FlatChem, 2024, **44** 100630.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект 25-73-10250.

ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ЛАБОРАТОРНОГО СИНТЕЗА ВИРТУАЛЬНО ГЕНЕРИРОВАННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ СТРУКТУР

Книжник А.А.^{а,б}, Комаров П.В.^в, Синица А.С.^{а,б},
Ширабайкин Д.Б.^{а,б}, Трепалин С.В.^{а,б}, Потапкин Б.В.^{а,б}

^аНИЦ «Курчатовский институт»,
123182 Москва, пл. Академика Курчатова 1
^бООО Кинтех Лаб., 123298 Москва, ул. 3-я Хорошевская 12
^вИНЭОС РАН, 119991 Москва, ул. Вавилова 28

Автоматизированное проектирование новых полимерных материалов на основе различных машинно-ориентированных подходов может быть более эффективным, если сократить количество генерируемых ими химических структур для последующего анализа. Реализация этого требования может производиться посредством «фильтрации» потенциально неперспективных соединений по заданным критериям. В частности, для этих целей можно использовать индекс синтетической доступности (SAscore), который позволяет производить оценку по шкале от 1 (синтезировать очень легко) до 10 (синтез крайне тяжело реализуем). Такой подход позволяет получить более реалистичный набор химических структур с точки зрения их возможного лабораторного синтеза. Хотя оригинальный алгоритм расчета SAscore, предложенный Эртлом и Шуффенхаузром¹, подходит для этих целей, он до сих пор не был корректно реализован применительно к полимерам, как это следует из представленных нами результатов.

В докладе обсуждается разработанная нами адаптация метода расчета SAscore для случая полимерных материалов. Для его проверки мы выполнили сравнение значений SAscore, рассчитанных с использованием фрагментов химических соединений, полученных путем декомпозиции химических структур из баз данных PubChem Compounds² и Aurora Fine Chemicals³. Нам удалось показать, что в большинстве случаев различия в значениях SAscore находятся в пределах допустимой погрешности. Предлагаемый нами метод расчета индекса SAscore позволяет существенно сократить количество виртуально генерируемых структур при использовании как традиционных комбинаторных методов (базирующихся на использовании комбинаторных библиотек) и различных реализаций виртуальных реакций, так и нейросетей.

Литература

1. Ertl P., Schuffenhauer A. *J. Cheminform.*, 2009, **1**, 1.
2. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> (дата обращения: 26.08.2025).
3. <https://aurorafinechemicals.com> (дата обращения: 26.08.2025).

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМОВ ДЛЯ АНАЛИЗА МОРФОЛОГИИ И СКОРОСТИ РОСТА КРИСТАЛЛОВ ЩЕТОЧНЫХ СОПОЛИМЕРОВ

Коняхина А.Ю., Овсепьян А.

*Научно-технологический университет «Сириус»,
354340, Краснодарский край, федеральная территория «Сириус»,
Олимпийский проспект, д. 1*

Исследование кинетики кристаллизации и морфологии биоразлагаемых полимеров со щеточной архитектурой играет важную роль в дизайне функциональных биоматериалов, поскольку микроструктура материала предопределяет его механические свойства, биорезорбируемость и способность к интеграции с живыми тканями¹. Анализ изображений, полученных методом поляризационной оптической микроскопии в режиме реального времени, затруднен из-за обработки больших массивов данных, и их ручная обработка может приводить к искажению результатов. Автоматизированный анализ изображений с применением алгоритмов компьютерного зрения не только стандартизирует количественный анализ объектов, но и открывает новые возможности для материаловедения, позволяя получать недоступные ранее сведения о механизмах конкурентного роста кристаллов².

Работа посвящена изучению процесса кристаллизации щеточных сополимеров, содержащих звенья полилактида (PLA), которые при кристаллизации в тонких и ультратонких пленках образуют разнообразные морфологии, включая дендриты, сферолиты и другие структуры. Основной целью является разработка универсальных алгоритмов для кинетического и морфологического анализа микроскопических изображений, обеспечивающих эффективную сегментацию кристаллической фазы по всему массиву данных и её количественный анализ. В ходе исследования получены статистически значимые количественные данные и охарактеризована кинетика изотермической кристаллизации и влияние степени переохлаждения, толщины пленки и гидрофобности поверхности на морфологию кристаллов. В результате исследования разработаны алгоритмы сегментации кристаллов, которые позволили получить количественные характеристики морфологии, включая плотность ветвлений, динамику прироста числа ветвлений, фрактальную размерность структуры, а также оценить площадь кристалла и диффузионно-обедненного слоя вокруг него и вычислить скорость роста ламелл.

Литература

1. Nikitina E.A., Dashtimoghadam E., Sheiko S.S., Ivanov D.A. *Polymers (Basel)*, 2024, **16**(2), 296.
2. Hughes T., Robinson A. J., McFadden S. *Journal of Crystal Growth*, 2022, **599**, 126893.

ПРЕДСКАЗАНИЕ ПАРАМЕТРОВ СПЕКТРОВ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ МОЛЕКУЛ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРАФОВЫХ НЕЙРОСЕТЕЙ

Коровин А.Н., Потапов Д.О.

*AHO «Институт искусственного интеллекта»,
123112, Москва, Пресненская набережная, д. 6, стр. 2, 4 этаж*

Молекулярные оптические свойства играют ключевую роль в дизайне материалов для органических красителей, солнечных элементов и оптоэлектронных устройств. Для сложных электронных структур с π -сопряженными системами, содержащих атомы металла сложность расчетов из первых принципов слишком высока для скрининга молекул из широкого набора кандидатов. Использование методов машинного обучения потенциально являются более быстрыми, но их точность в разных диапазонах энергий пока уступает квантово-механическим методам, особенно в пространствах с небольшим количеством данных.

Для сравнения точности подходов мы создали объединенную базу данных из открытых публикаций, содержащую информацию о поглощении, флуоресценции и квантового выхода для органических флуоресцентных молекул в различных средах. Моделирование из первых принципов провели с помощью TD-DFT с использованием B3LYP/def2-TZVPP с учетом и без учета растворителя с помощью CPCM¹. В качестве сети использовали модификацию 2D графовой нейросетевой модели ChemProp², в которой модифицировали выход для одновременного предсказания трех параметров, и учета влияния растворителя.

Обучение модели на тренировочной выборке, отобранный для максимизации различия скваффолов показало, что использованием информации о растворителе достигнута ошибка MAPE предсказаний 6,3% на тестовом наборе (отсортированном по несходству Танимото и сходству скелета), что в то время, как для подхода из первых принципов 12,3%. Это продемонстрировало перспективность модели для предсказания оптических свойств.

Литература

1. Weigend, F., Ahlrichs, R.: Balanced basis sets of split valence, triple zeta valence and quadruple zeta valence quality for h to rn: Design and assessment of accuracy. *Physical Chemistry Chemical Physics* 7(18), 3297–3305 (2005)
2. Greenman, K.P., Green, W.H., G'omez-Bombarelli, R.: Multi-fidelity prediction of molecular optical peaks with deep learning. *Chemical science* 13(4), 1152–1162 (2022)

ЭКСПЕРТНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ИК СПЕКТРОВ НА ОСНОВЕ СВЁРТОЧНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ С МУЛЬТИКЛАССОВОЙ КЛАССИФИКАЦИЕЙ В ТЕЛЕГРАММ-БОТЕ

Кошелев Д.С.

*Химический факультет, Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова,
119234 Москва, Ленинские горы 1/3*

Инфракрасная спектроскопия с преобразованием Фурье (FTIR) - широко распространенный спектроскопический метод рутинного анализа веществ и соединений. При этом результаты ИК спектроскопии являются высокоинформативными, но трудно интерпретируемыми, что приводит к, зачастую, слабой интерпретации данных в рутинных анализах. 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 обычных колебаний связей в ИК спектрах. Обучение проводилось на 14361 ИК спектров органических молекул из спектральной базы данных NIST. Протестированы 9 различных архитектур моделей на основе ResNet-архитектуры. На основе методов Shap и GradCAM разработаны инструменты визуализации областей проявления полос поглощения, и было показано совпадение областей внимания моделей и эмпирического опыта. 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. Для облегчения доступа к моделям и возможности их полезного использования был реализован телеграмм-бот @FTIR_rec_bot, нацеленный на помочь учёным в подготовке данных к публикациям статей.

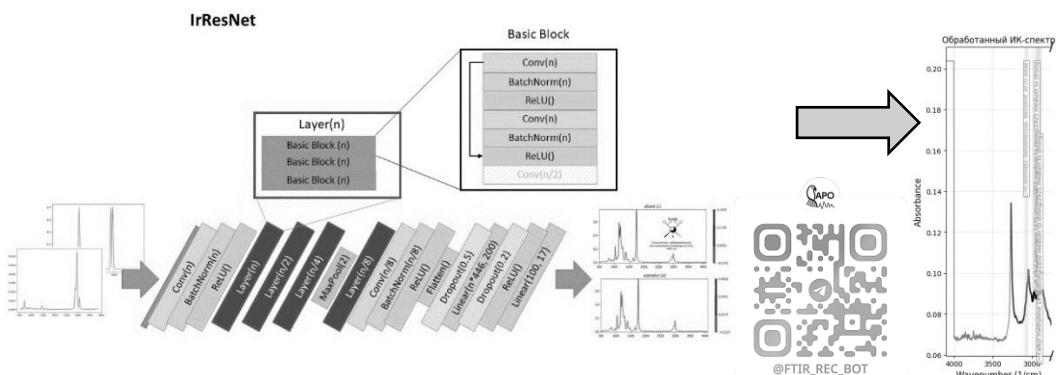


Рисунок. 1. Архитектура IrResNEt и реализация применения в телеграмм-боте АРО.

Литература

1. Koshelev D. S. *Appl. Spectrosc.* 2024. **78**. №4. 387–397.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда «Интеллект».

ТЕНЗОРНЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ СПЕКТРОВ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ПРИРОДНЫХ ВОД: ПРОБЛЕМЫ И РЕШЕНИЯ

Крылов И.Н.^а, Дроздова А.Н.^б Лабутин Т.А.^а

^а*МГУ им. М. В. Ломоносова, Химический факультет,
119234, Москва, Ленинские горы, 1с3*

^б*Институт океанологии им. П.П. Ширшова Российской академии наук,
117997, Москва, Нахимовский проспект, 36*

Флуоресценция возбуждения-испускания (ФВИ) является дешёвым и чувствительным методом анализа, что обеспечивает его популярность при решении задач мониторинга органического вещества, растворённого в природных водах. Структура получаемых данных соответствует модели параллельного факторного анализа (PARAFAC), что позволяет применять тензорное разложение для нахождения спектров групп флуорофоров и их относительных вкладов в сигнал каждого образца.

Для получения корректного решения PARAFAC необходимо решить ряд подзадач. Спектры флуоресценции содержат сигнал рассеяния, который необходимо интерполировать¹, либо включить в модель. Количество компонентов разложения заранее не известно и требует аккуратного подбора методом деления на половины², либо путём поиска разреженного решения с подбором коэффициента регуляризации³.

Представлено реализованное на языке программирования R решение, позволяющее выполнить необходимые шаги, и рассмотрены полученные с его помощью результаты для растворённого органического вещества океанических и речных вод.

Литература

1. Krylov I.N., Labutin T.A. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2023, **293**, 122441.
2. Krylov I.N., Drozdova A.N., Labutin T.A. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2020, **207**, 104176.
3. Крылов И.Н., Ерина О.Н., Дроздова А.Н., Селиверстова И.В., Лабутин Т.А.. Журнал Прикладной Спектроскопии, 2024, **91**, 733–740.

DeepFit: ФИЗИЧЕСКИ И ХИМИЧЕСКИ ИНФОРМИРОВАННЫЙ АНАЛИЗ XAS-СПЕКТРОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ

**Кулаев К.Д.¹, Проценко Б.О.¹, Лифарь М.С.¹,
Асатуров Г.О.¹, Куприяnenko D.I.¹, Чубков Н.С.¹, Kochiev G.D.¹,
Гуда A.A.¹, Гуда C.A.^{1,2}, Солдатов M.A.¹, Солдатов A.B.¹**

¹ Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов Южного федерального университета, 344090 Ростов-на-Дону, Сладкова, 178/242

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

Мы представляем DeepFit — подход глубокого обучения для физически и химически обусловленного определения атомной структуры по спектрам рентгеновского поглощения (XANES). Метод решает обратную задачу структурного анализа XANES [1], объединяя E(3)-эквивариантную нейронную сеть, обученную на базе tmXAS (67 000 теоретических спектров К-края 3d- и 4d-металлов), с квантово-химическими ограничениями. Нейросеть предсказывает спектры в форме $k2\chi(k)$ по атомным координатам, а фреймворк оптимизации на основе аналитических градиентов позволяет проводить уточнение структуры, минимизируя отклонение от экспериментального спектра при сохранении химической релевантности структуры (через учет энергии системы). Валидация на комплексах 3d- (Cu, Co, Zn, Ni) и 4d- металлов (Rh) с известной рентгеноструктурной моделью демонстрирует количественное согласие. ROC-анализ (AUC=0.73) подтверждает способность DeepFit надежно дискриминировать правильные структуры среди химически правдоподобных альтернатив. Сочетание вычислительной эффективности, физической информированности и автоматизации делает DeepFit универсальным методом для количественного XANES-анализа, представляющим значительный шаг к созданию самоуправляемых аналитических систем в материаловедении и катализе.

Литература

1. Martini, A.; Guda, S.A.; Guda, A.A.; Smolentsev, G.; Algasov, A.; Usoltsev, O.; Soldatov, M.A.; Bugaev, A.; Rusalev, Yu.; Lamberti, C.; et al. PyFitit: The Software for Quantitative Analysis of XANES Spectra Using Machine-Learning Algorithms. Computer Physics Communications 2020, 250, 107064, doi:10.1016/j.cpc.2019.107064.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства Науки и Высшего образования РФ, соглашение № 075-15-2025-509 от 30.05.2025 г.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДА ХЮККЕЛЯ И DFT РАСЧЕТА СОСТОЯНИЙ УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР.

Куприянова Г.С., Смирнов М.Л., Савин В.В.

БФУ им. И.Канта, г.Калининград

Одной из центральных задач современного материаловедения является установление количественных корреляций между атомной структурой и электронными свойствами материалов, что позволяет целенаправленно проектировать системы с заданными функциональными характеристиками. В контексте двумерных углеродных материалов ключевую роль играет π -электронная система, определяющая как электронные, так и топологические свойства. Метод Хюккеля, несмотря на свою простоту, эффективно описывает π -электронную структуру плоских углеродных систем благодаря ортогональности σ - и π -орбиталей. Он качественно воспроизводит краевые состояния, правила ароматичности и топологические особенности. В то же время методы теории функционала плотности (DFT) обеспечивают значительно более точное описание электронной структуры. Однако их вычислительная сложность ограничивает применимость к большим системам. В данной работе проведён систематический сравнительный анализ результатов, полученных с использованием метода Хюккеля и DFT (в рамках функционалов PBE и HSE06), для ряда модельных углеродных структур — от графеновых нанолент до дефектных нанотрубок. Целью является построение параметризованной версии полуэмпирического метода Хюккеля, калиброванной по данным DFT, что позволит использовать его для быстрого предсказания электронных и топологических свойств новых углеродных материалов. Для автоматизации анализа, генерации кода численных решений и выявления скрытых корреляций между π -электронной плотностью, химическими сдвигами ^{13}C ЯМР и топологическими инвариантами были применены современные ИИ-системы: QwQ-32B, DeepThink и GigaChat. В работе обсуждаются достоинства и недостатки ИИ при их использовании.

Работа выполнена в рамках гранта Российского научного фонда № 25-7231032

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ИМПУЛЬСНОГО ЭЛЕКТРОЛИЗА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРО- И КАТАЛИТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ

**Куриганова А.Б.,^а Леонтьев И.Н.,^б
Смирнова Н.В.^а**

^а*Южно-Российский государственный политехнический университет имени М.И. Платова,
346428, Новочеркасск, ул. Просвещения 132,*

^б*Южный федеральный университет, 344006, Ростов-на-Дону, ул. Зорге 5*

Электрохимические подходы в синтетической химии благодаря своей экологической устойчивости, селективности и энергоэффективности по сравнению с традиционными методами химического синтеза имеют разнообразные области применения. В частности, это синтез органических соединений, электролиз воды для получения водорода, осаждение наноструктур на подложках. Однако, намного реже электрохимический синтез рассматривается, как подход к получению дисперсных металлов, оксидов и гидроксидов металлов, представляющих интерес в (электро)катализе (Pt, Pd, Rh, Ag, Sn и др.).

Проведение электролиза в импульсном режиме является эффективным подходом к получению электро- и каталитически активных дисперсных материалов на основе целого ряда металлов и/или оксидов металлов, углеродных материалов.^{1,2}

На основе анализа известных эффектов, возникающих в условиях импульсного электролиза в водных электролитах, и собственных экспериментальных данных о поведении некоторых металлов и углеродных материалов в таких условиях, предложена концептуальная модель процесса получения дисперсных (электро)катализически активных материалов¹. Данная модель описывает взаимное влияние электрических, температурных и концентрационных эффектов и может быть положена в основу разработки новых технологий получения (электро)катализически активных материалов и методологии предсказания поведения того или иного материала под действием импульсных электрических полей.

Литература

1. Kuriganova A.B., Brink I.Yu., Smirnova N.V. *Nano Materials Science*, 2025, *In Press* <https://doi.org/10.1016/j.nanoms.2024.09.007>.
2. Kuriganova A.B., Leontyev I.N, Stavenchuk E.A., Gubanova A.A., Faddeev N.A., Yatsenko A.V., Gorshenkov M.V., Smirnova N.V. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 2025, 996, 119419

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-23-00192.

USPEX: НОВАЯ ПЛАТФОРМА ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ СТРУКТУРЫ С ИНТЕГРАЦИЕЙ ИИ-КОМПОНЕНТОВ

**Лепешкин С.В.,^{a,b} Рыбковский Д.В.,^a
Баканов С.В.,^a Оганов А.Р.^a**

^a*Сколковский институт науки и технологий,
121205, Москва, Большой бульвар, д. 30, стр. 1*

^b*Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,
119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д. 53*

Предсказание структуры остаётся одной из ключевых задач, от которой зависит скорость открытия новых веществ и разработки функциональных материалов. Мы представляем новую версию программы USPEX — теперь это не просто эволюционный алгоритм,¹ а гибкая платформа для глобальной оптимизации структур. Её архитектура организует этот процесс как последовательность этапов: генерации, релаксации, оценки и отбора, с чёткими интерфейсами для подключения внешних инструментов и моделей. На базе этой архитектуры реализованы новые возможности, существенно расширяющие функциональность платформы.

Во-первых, реализована поддержка ML-потенциалов для ускоренной релаксации и предварительного отбора структур. Возможна работа как с готовыми моделями (например, MatterSim²), так и с пользовательскими потенциалами.

Во-вторых, новая архитектура USPEX поддерживает интеграцию внешних генераторов структур — например, диффузионных моделей, таких как MatterGen.³ Это расширяет стандартный набор операторов (пермутация, мутация по мягкой моде, скрещивание и др.) и обеспечивает возможность явного учёта физических ограничений, таких как стехиометрия, симметрия и минимальные межатомные расстояния.

В-третьих, предусмотрена возможность реализации активного обучения потенциалов. Такая схема может включать оценку неопределённости модели, запуск DFT-расчётов для «информационных» структур и их использование для дообучения — без прерывания глобальной оптимизации.

Описанные возможности позволяют значительно ускорить предсказание атомных структур без потери точности. Публичный релиз новой версии USPEX ожидается в 2025 году.

Литература

1. Oganov A.R., Glass C.W. *J. Chem. Phys.*, 2006, **124**, 244704.
2. Yang H., Hu C., Zhou Y., et al. *arXiv*, 2024, 2405.04967.
3. Zeni C., Pinsler R., Zügner D., et al. *Nature*, 2025, **639**, 624.

ИГРА ПОРТАЛОВ: КАВИТАНДЫ КАК СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ

Лобова Н.А.,^{a,b} Александрова Н.А.,^a

Александрова А.В.,^a Медянцев Е.С.,^a Кондратенко А.Д.,^a Иванов А.А.,^a

Вацадзе С.З.,^c Громов С.П.^a

^aНИЦ «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники,
Отделение Центр фотохимии, 119421, Москва, ул. Новаторов, д.7-а, кор.1,

^bМФТИ (НИУ), 141701, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., д.9

^cИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991, Ленинский проспект, д.47

Кавитанды являются условно жёсткими молекулами и обладают внутренней полостью, позволяющей образовывать с молекулами-«гостями» инклузионные и эксклюзионные комплексы различной стехиометрии^{1,2}.

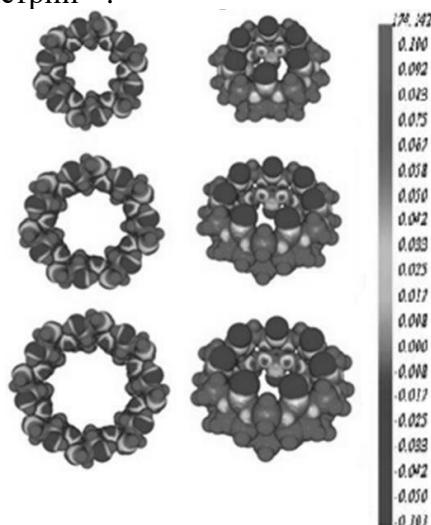


Рисунок 1. Распределение электронной плотности в молекулах α, β, γ -циклоцистринов и кукурубит[6,7,8]урилов³.

Применение кавитандов того или иного типа позволяет управлять как свойствами систем (растворимость, оптическая устойчивость), так и результатами реакций, протекающих с участием порталов и полости кавитанда.

Литература

1. Barrow S.J., Kasera S., Rowland M.J., del Barrio J., Scherman O.A. *Chem. Rev.*, 2015, **115**, 22, 12320.
2. Poulson B.G., Alsulami Q.A., Sharafaldin A., El Agammy E.F., Mouffouk F., Emwas A.H., Jaremko L., Jaremko M. *Polysaccharides* 2022, **3**, 1.
3. Pinjari R.V., Khedkar J.K., Gejji S.P., *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.*, 2010, **66**, 371.

МНОГОУРОВНЕВЫЙ СКРИНИНГ АБСОРБЕНТОВ CO₂ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Макаров Д.М., Колкер А.М.

*Институт химии растворов Российской академии наук,
153045, Иваново, ул. Академическая, д. 1*

Эффективное управление выбросами CO₂ играет ключевую роль в развитии устойчивых технологий. Современные методы улавливания CO₂ используют различные типы растворителей, реализуя процессы как физической, так и химической абсорбции, которые в большинстве не характеризуются высокой эффективностью.

Ионные жидкости активно исследуются как потенциальные растворители для улавливания CO₂, но их сложное производство и очистка делают их дорогими. В качестве более доступной альтернативы в последние годы внимание исследователей привлекли растворители с глубокой эвтектикой – смеси акцепторов и доноров водородной связи, формирующие эвтектическую точку.

Целью проведенного исследования было применение виртуального скрининга для поиска новых комбинаций соединений, способных эффективно поглощать CO₂. Для этого были разработаны модели машинного обучения, предсказывающие поглощение CO₂ в смесях. Для расширения химического разнообразия обучающих данных в выборку были включены данные о растворимости CO₂ в ионных жидкостях. Кроме того, были созданы регрессионные модели для прогнозирования вязкости смеси и параметров уравнений Редлиха-Кистера для расчета температуры плавления новых комбинаций. Полученные предсказательные инструменты были использованы для многоступенчатого скрининга потенциальных сорбентов.

Дополнительно была разработана модель для абсорбентов, где в качестве одного из компонентов смеси используется 1,5-диазабицикло(4.3.0) non-5-ен. В данной модели были использованы физически обоснованные дескрипторы, отражающие ключевые характеристики процесса абсорбции CO₂: константа Генри, коэффициент распределения октанол–вода, показатель кислотности и вязкость.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 23-13-00118

БЕСКОНТАКТНАЯ ПИКОСЕКУНДНАЯ ТЕРМОМЕТРИЯ КРЕМНИЯ НА ОСНОВЕ ШИРОКОПОЛОСНОГО СУПЕРКОНТИНУУМА И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

**Мареев Е.И.^a, Обыденнов Н.Н.^{a, b}, Ашарчук Н.М.^a,
Павлов А.И.^a, Юсупов В.И.^a, Зотов К.В.^b, Минаев Н.В.^a**

^aИнститут фотонных технологий, Курчатовский Комплекс Кристаллографии и Фотоники,
НИЦ «Курчатовский Институт», 142190, Москва, Троицк, Пионерская 2.

^bФизический Факультет МГУ им. М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы 1, стр 62.

^bНПО «Солитон», 142190, Москва, Троицк, Нагорная 6

Представлен метод бесконтактной пикосекундной термометрии кремния, основанный на комбинации широкополосной спектроскопии поглощения с использование пикосекундного суперконтинуума и машинного обучения. Данный подход позволяет восстанавливать температуру по спектрам поглощения с точностью лучше 1°C и субнаносекундным временным разрешением. Оптимизированная архитектура нейронной сети с начальным сверточным слоем пятью полно связанными слоями продемонстрировала существенное превосходство над традиционными методами, сохраняя точность при различных типах нагрева, включая лазерное воздействие. Продемонстрировано, что нейронная сеть использует физически значимые спектральные особенности вблизи края поглощения кремния. Пикосекундная длительность импульсов суперконтинуума позволяет при синхронизации с лазерными системами напрямую измерять мгновенную температуру в зоне лазерного воздействия, что решает ключевую проблему в исследованиях взаимодействия лазерного излучения с веществом, а сама методика может быть распространена на другие полупроводниковые материалы.

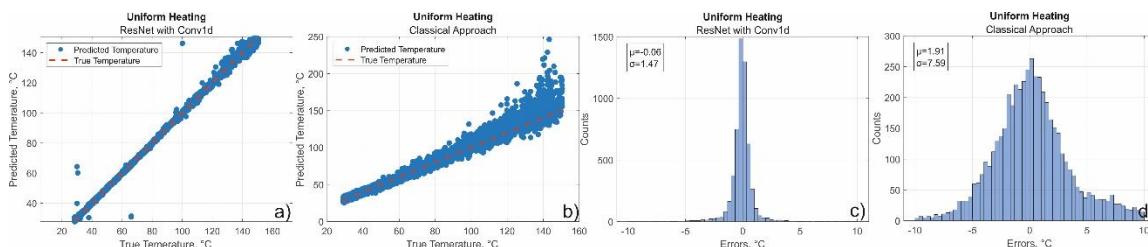


Рисунок 1. (a-b) Зависимость предсказанной температуры (полученной из спектров поглощения) от истинной температуры (измеренной LWIR-камерой). На гистограммах (c-d) отображено распределение разностей между предсказанный и истинной температурами; средняя ошибка (μ) и стандартное отклонение (σ) указаны на рисунках. Соответствующие методы: (a, c) ResNet со слоем Conv1d и (b, d) классический подход на основе экспоненциальной аппроксимации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-73-00039.

ЛАЗЕРНЫЙ СИНТЕЗ И ФОТОТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТНЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ TiN ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ ПАРА

**Мартынов И.В.,^а Позов Б.Е.,^а Ефременко В.Г.,^б
Целиков Д.И.,^в Арсенин А.В.,^а Сюй А.В.^а**

^а *Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный,
Институтский переулок, д.9*

^б *Дальневосточный государственный университет путей сообщения.
г.Хабаровск, ул. Серышева, 47*

^в *Институт инженерной физики для биомедицины (ИФИБ), НИЯУ МИФИ,
г. Москва, Каширское шоссе, 31*

Растущие потребности в устойчивой энергетике и чистых водных ресурсах стимулируют поиск новых материалов для эффективного преобразования солнечной энергии. В данной работе предложен «чистый» лазерный метод синтеза фототермических мембран на основе наночастиц нитрида титана (TiN), обеспечивающих высокоэффективную генерацию пара под действием солнечного света.

Установлено, что фемтосекундная лазерная абляция позволяет формировать наночастицы с оптимальными плазмонными свойствами, обеспечивающими широкополосное поглощение света. Локализация этихnano-нагревателей в тонком поверхностном слое мембранны минимизирует тепловые потери в объем воды, концентрируя всю энергию на границе раздела фаз для интенсивного парообразования. В результате фототермическая эффективность мембран позволила достичь скорости испарения свыше 2 кг/(м²·ч) при равновесной температуре 51 °C в солевых растворах, имитирующих морскую воду (3.5% масс.).

Важно отметить, что установленные корреляции между удельной массой наночастиц, нормальным отражением мембранны и скоростью испарения создают предсказуемую систему «структура-свойство». Это позволяет целенаправленно проектировать материалы с заранее заданными характеристиками, обходясь без исключительно эмпирического подбора.

Таким образом, работа демонстрирует, что прямое лазерное конструирование наноматериалов является эффективной стратегией для разработки нового поколения фототермических систем, решающих задачи в области солнечной энергетики и орошения воды.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 25-79-10108

СТРУКТУРА И АДСОРБИОННЫЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ Cu-Au В РЕАКТИВНЫХ СРЕДАХ

**Михайлова А.А.,^а Мальцев А.П.,^а Мендес П.К.Д.,^б
Самудио Ф.Б.,^б Оганов А.Р.,^а Козлов С.М.^б**

^а*Сколковский институт науки и технологий,*

121205, Москва, Большой бульвар 30с1,

^б*Национальный университет Сингапура,*

119260, Сингапур, Инженерный проезд, 4

Каталитическая активность наночастиц определяется их поверхностным составом, который существенно изменяется в зависимости от температуры, давления и степени покрытия адсорбатами. В настоящей работе исследованы наночастицы состава Au₇₉, Cu₁₉Au₆₀, Cu₃₉Au₄₀, Cu₆₀Au₁₉ и Cu₇₉ с использованием межатомного потенциала машинного обучения (MTP), методов функционала плотности (DFT) и эволюционного алгоритма USPEX. Разработанный MTP воспроизводит точность DFT при значительно меньших вычислительных затратах, что позволило исследовать широкий спектр структур — как чистых, так и покрытых молекулами CO_n и атомами O_n ($n = 0 - 75$).

Построенные фазовые диаграммы демонстрируют устойчивость различных конфигураций наночастиц в широком диапазоне рабочих температур и парциальных давлений O₂ и CO. Предпочтение адсорбции определяется локальной координацией: CO связывается преимущественно на низкокоординированных центрах, тогда как O на многокоординированных участках. С увеличением содержания золота наблюдается ослабление адсорбции и снижение структурных перестроек, тогда как медьсодержащие частицы претерпевают выраженную оксидацию и реконструкции с увеличением количества адсорбатов. Медь играет роль кислородного резервуара. Такое умеренное окисление способствует усилинию каталитической активности. Анализ зарядов по Бейдеру подтверждает, что заряд на Cu определяется числом кислородных соседей и достигает значений, характерных для Cu₂O и CuO (в среднем около +0.9 e). Кроме того, получен статистический ансамбль конфигураций наночастиц во всём диапазоне рабочих температур, причём значительный вклад в каталитическую активность могут вносить даже менее вероятные состояния, обладающие повышенной реакционной способностью.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 19-72-30043.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ В ДИЗАЙНЕ КАТАЛИЗАТОРОВ

Мотаев К.А.^{1,2}, Молокеев М.С.¹, Сибаа М.¹,
Загоруйко А.Н.^{1,2}, Елышев А.В.¹

¹ Тюменский государственный университет, 625003. Тюмень, Россия

² Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

В данном исследовании продемонстрирована оптимизация никелевых катализаторов для гидрогенолиза парафинов с помощью машинного обучения (МО). На основе данных из 419 экспериментов модель случайного леса предсказала скорость реакции ($MAE=0,37$, $R^2=0,76$).

Были сгенерированы более 1 миллиона экспериментов в определенном интервале каждого из входных параметров и предсказана их скорость реакции с помощью полученной модели. Два наилучших катализатора были синтезированы Ni/Al_2O_3 и Ni/TiO_2 , которые показали экспериментально подтверждённую активность¹, превышающую известные аналоги рис 1.

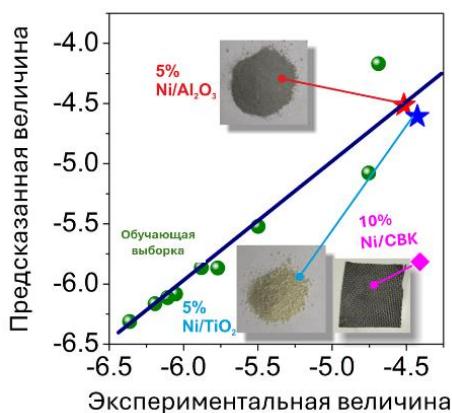


Рисунок 1. Сравнение предсказанных и истинных значений логарифма скорости реакции гидрогенолиза парафинов на никелевых катализаторах

Однако катализатор Ni/CBK на стекловолокнистом носителе², не входивший в обучающую выборку и кардинально отличающийся по свойствам, де-факто проявил значительно более высокую активность, чем была предсказана. Это показывает, что МО эффективно для интерполяции знаний в пределах известных данных и ускорения обработки известной информации, но не способны к прорывным открытиям за границами существующих знаний, которые остаются прерогативой человека.

Литературы:

- 1.Sebaa M. , Motaev K. , Molokeev M. , Azarapin N. , Petrishena A. , Matigorov A. , Zagoruiko A. , Elyshev A. *Catalysis Science and Technology*, 2025, **15**, 3226-3237.
2. Сибаа М. , Харитонцев В.Б. , Азарапин Н.О. , Лу Б. , Загоруйко А.Н. , Елышев А.В. *Катализ в промышленности*. 2024. Т.24. №5. С.14-24.

Благодарность: Исследование выполнено при поддержке НИР Г3 (FEWZ-2024-0015).

РАЗРАБОТКА ИИ-АССИСТЕНТА ДЛЯ АНАЛИЗА ПАТЕНТНОЙ ИНФОРМАЦИИ В ОБЛАСТИ ОБОГАЩЕНИЯ И ПЕРЕРАБОТКИ МИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ

Набиев И.М., Зиновеев Д.В., Конюхов Ю.В.

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
119049, Москва, Ленинский проспект, 4*

Эффективный анализ патентной информации является критически важным для управления интеллектуальной собственностью. Существующие поисковые системы часто неспособны удовлетворительно решать сложные семантические запросы, что приводит к неполным и низкорелевантным результатам, например, в области черной металлургии.

В работе представлена RAG-система (Retrieval-Augmented Generation) для анализа патентов в области обогащения и переработки минерального сырья. Система реализована с использованием платформ n8n и QuadrantVDB в контейнерах Docker, с интерфейсами TelegramAPI и GeminiAPI. Модель обучена на патентах в области переработки железорудного сырья и способна отвечать на вопросы по технологическим и конструкционным особенностям этих процессов. Архитектура разработанного решения представлена на рисунке 1.

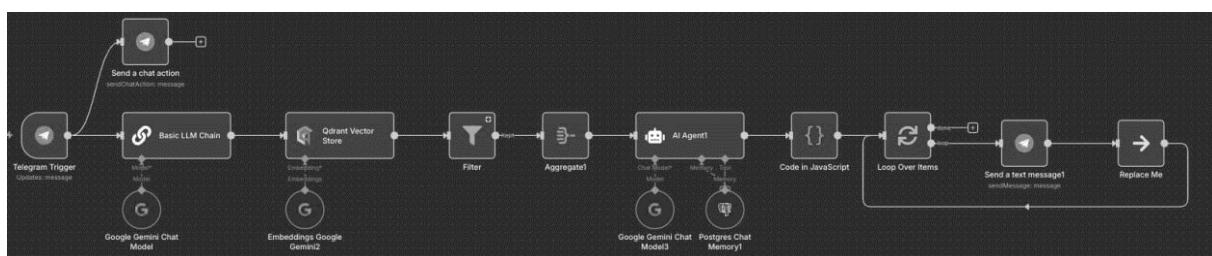


Рисунок 1. Архитектура решения

В ходе экспериментов была усовершенствована архитектура системы: финальная конфигурация включает дополнительный «Thinking модуль» на основе модели Gemini Flash 2.0, который осуществляет предварительный анализ и переформулировку пользовательского запроса. Данное решение продемонстрировало значительное улучшение релевантности извлекаемой информации и качества итогового ответа, преодолевая ограничения стандартных языковых моделей. Точность модели (Precision) на тестовой выборке составила 0.65 для базовой RAG и 0.89 для RAG с «Thinking» модулем. Answer Relevance (Релевантность ответа) также повысилась.

RAG-система подтвердила высокую эффективность в предметной области переработки железорудного сырья. Система готова к локальному запуску и адаптирована для работы как с облачными API, так и с локальными open-source моделями.

ФОРМИРОВАНИЕ СИНТЕТИЧЕСКИХ НАБОРОВ ДАННЫХ ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ, ТЕСТИРОВАНИЯ И ВАЛИДАЦИИ МОДЕЛЕЙ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Никитин Н.Ю., **Степашкин А.А.¹**

¹*НИТУ МИСИС, 119049 Москва, Ленинский проспект, д. 4, стр.1*

²*МГТУ “СТАНКИН”, 127055, Москва, Вадковский пер., 1*

Построение моделей машинного обучения требует наличие большого количества экспериментальных данных, что не всегда возможно из экономических соображений. Для решения этой задачи использовалась теорема Склара, а определение маргинального распределения на основе экспериментальных данных осуществлялась с использованием метода ядра. Оценка корреляций осуществлялась по Спирману. Весь алгоритм формирования синтетического набора данных свелся к следующим шагам:

1. Упорядочим наблюдения $X_{i(1)} \leq X_{i(2)} \leq \dots \leq X_{i(n)}$ и вычисляем ранги данных.
2. Преобразуем полученные ранги данных к равномерному распределению.
3. Применить теорему Склара и вычисление копулы для равномерных данных.
4. Оценить коэффициенты корреляции Спирмана через коппулы.
5. Зная вектор центральности графа корреляции скорректировать полученную матрицу корреляции экспериментальных данных. Получив модифицированную матрицу корреляции, генерируется синтетического набора данных по следующему алгоритму:
 - Генерируем многомерные данные распределенные по нормальному закону распределения.
 - Преобразуем к равномерному распределению и применяем обратное преобразование.
 - Вычисляем текущую матрицу корреляции синтетического набора данных;
 - Вычисляем матрицу поправок к корреляционной матрице и применяем поправки к синтетическим данным:

$Y_i^{new} = Y_i^{old} + \lambda \sum_{j=1}^p \Delta_{ij} v_i v_j \cdot norm(Y_j)$	(1)
--	-----

Апробация данного алгоритма на механических свойствах композиционных материалов и материалов, полученных методом селективного лазерного плавления, позволила получить синтетические данные с максимальной средней квадратической ошибкой равно 69,564 МПа для модуля Юнга.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда Российской Научного Фонда (грант 23-73-00131).

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА
ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ РАДИАЦИОННОЙ СТОЙКОСТИ
ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ – ОТ СБОРА ИНФОРМАЦИИ
К ПОСТРОЕНИЮ МОДЕЛЕЙ**

**Никиторов Д.Н., Смирнова А.А.,
Королёв В.В., Митрофанов А.А.**

*Институт перспективных исследований проблем искусственного интеллекта и
интеллектуальных систем МГУ имени М.В. Ломоносова,
119192, Москва, Ломоносовский проспект, д.27, корп. 1*

Одним из ключевых требований к соединениям, применяемым в радиохимических технологиях, является радиационная стойкость — устойчивость вещества к действию ионизирующего излучения. Это свойство особенно важно при переработке ядерного топлива, где используются органические растворители, лиганды и ионообменные смолы. Не менее значима радиационная стойкость в ядерной медицине, где радиолиз ограничивает срок службы и стабильность радиофармпрепаратов.

Экспериментальное определение радиационной стойкости остаётся трудоёмким и дорогостоящим процессом, сопряжённым с радиационными рисками. В качестве альтернативы рассматривается прогнозирование данного свойства с применением методов искусственного интеллекта (ИИ), позволяющее ускорить исследования и снизить затраты. Однако развитие таких моделей затруднено в связи с отсутствием открытых баз данных радиационной стойкости.

В работе реализован подход, сочетающий автоматизированный поиск, извлечение и анализ данных. Алгоритм выполняет поиск публикаций, содержащих сведения о радиационной стойкости соединений. Для распознавания PDF-документов использована модель Mistral-OCR, для извлечения и структурирования информации — Mistral Large. На основе полученных данных сформирована база радиационной стойкости органических соединений.

Заключительный этап включает обучение предсказательной модели на основе современных архитектур — MolFormer, SELFormer и Mamba-подобных моделей. Эти подходы позволяют оценивать константы радиолиза по наборам данных, включающим SMILES соединения, его концентрацию, SMILES растворителя и мощность дозы источника излучения.

Таким образом, представленная работа демонстрирует полный цикл разработки — от поиска и извлечения данных до построения предсказательных моделей, открывая путь к ускоренному дизайну радиационно-устойчивых соединений.

**ПРЕДСКАЗАНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ
РАСТВОРИМОСТИ ВЕЩЕСТВ МОЛЕКУЛЯРНОГО СТРОЕНИЯ В
БИНАРНЫХ СМЕСЯХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ ОТ ИХ ОБЪЕМНОГО
СООТНОШЕНИЯ**

Новицкий Г.О.,^{a,b} Лобова Н.А.^a

^a*НИЦ «Курчатовский институт», КККиФ, центр фотохимии
119421, Москва, Новаторов, 7A,*

^b*АНО ВО «Центральный университет»,
123056, Москва, улица Гашека, 7*

Растворимость веществ в смесях растворителей является важной характеристикой, используемой в различных прикладных химических задачах, для предсказания растворимости используются термодинамические^{1,3} и основанные на данных² модели.

В нашей работе продемонстрирован подход, основанный на использовании ML-моделей для уточнения функциональной зависимости растворимости вещества от соотношения смешивающихся растворителей.

Для обучения моделей использовались термодинамические параметры веществ и растворителей из открытых баз данных и молекулярные дескрипторы, извлекаемые из SMILES.

Полученные модели предсказывают уточненный коэффициент распределения вещества (зависящий от соотношения растворителей), на основании которого выстраивается функциональная зависимость. Для предсказания модель использует SMILES и термодинамические параметры вещества и растворителей.

Подход, продемонстрированный в работе, значительно уточняет модель растворимости веществ в смесях двух идеально смешивающихся растворителей¹; использует только легко доступные термодинамические параметры, что позволяет использовать его для малоизученных веществ; предсказывает не абсолютные значения растворимости, а функциональную зависимость, что позволяет получить низкие значения относительных ошибок.

Литература

1. An Li, Samuel H. Yalkowsky, *Journal of Pharmaceutical Sciences* 1994, v. 83, n. 12, 1735-1740.
2. Francesca Cenci, Samir Diab, a.o., *International Journal of Pharmaceutics*, 2024, v. 660.
3. Lemmer, H.J.R., Liebenberg, W., *Crystal Growth and Chirality - Technologies and Applications*, 2023.

MATERIALS ANALYZER: ONLINE СЕРВИС ОЦЕНКИ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

**Осипов В.Т., Морхова Е.А., Смольков М.И.,
Кабанов А.А., Блатов В.А.**

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

Поиск новых перспективных кристаллических высокопроводящих материалов для таких электрохимических устройств, как твердооксидные топливные элементы и полностью твердотельные металл-ионные аккумуляторы, является одной из актуальных задач современного электрохимического материаловедения. Они являются основными системами генерации и хранения электроэнергии, которые имеют схожее устройство, а именно состоят из трех основных кристаллических проводящих материалов: твердый электролит, размещенный между двумя электродными материалами. Проводимость твердого электролита должна быть обусловлена исключительно ионной составляющей, а электронная составляющая проводимости должна отсутствовать. В этом случае ширина запрещенной зоны (E_g) должна быть условно выше 3 эВ. В то время как, электродные материалы должны обладать и ионной, и электронной составляющими проводимости, соответственно значения E_g должны варьироваться в диапазоне от 0 до 3 эВ. Подбор таких материалов и оценка их проводящих свойств является сложной задачей, которая в последнее время решается методами компьютерного моделирования. Однако такие методы не подходят для крупномасштабного скрининга баз данных соединений, по причине высоких вычислительных затрат.

Разработанный нами сервис Materials Analyzer (<https://www.materials-analyzer.info/>) с высокой точностью предсказывает значения E_g , тем самым определяя принадлежность возможного проводящего материала в указанных электрохимических устройствах. Модель машинного обучения (МО) для быстрой оценки E_g , была обученная методом взвешенного ансамбля на сведениях из баз данных The MaterialsProject, AFLOW и OQMD по структурам состава $A_nB_nO_n$ (О – кислород, A и B – металлы, n – любое целое число). В обучении было использовано более 12000 соединений, тестовая выборка составляла более 1300 соединений. Модель МО для регрессии характеризуется следующими показателями: $R^2 = 0.90$, RMSE = 0.38 и MSE = 0.15.

Работа выполнена при поддержке Фонда Содействия Инновациям (конкурс СТАРТ-ВЗЛЕТ (очередь II), договор № 5290ГС1/101640).

РАЗРАБОТКА ОПТИМАЛЬНОГО МЕТОДА ПОЛУЧЕНИЯ ВЕКТОРНЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ХИМИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Остарков С.Н. ^{a, б}, **Беспалов И.А.** ^{a, б}, **Медведев М.Г.** ^a

^a*Институт Органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*

^б*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

Многие задачи, возникающие в современных химических исследованиях, характеризуются ограниченным объемом экспериментальных данных, недостаточным для эффективного обучения глубоких нейросетевых моделей. Поэтому в таких задачах используются классические алгоритмы машинного обучения, использующие векторные представления химических структур (эмбеддинги).

Существующие модели, предназначенные для создания эмбеддингов, представляют собой большие языковые модели, оперирующие со структурами в формате текстовых кодировок (например, SMILES)¹. Другой возможный подход подразумевает использование графовых нейронных сетей (ГНС), напрямую оперирующих со структурой молекул.

Мы поставили цель сравнить эти два подхода к задаче построения векторных представлений. Для этого на датасете PubChem нами был обучен ряд языковых и графовых моделей. В качестве метода оценки качества эмбеддингов, мы обучали модель градиентного бустинга на различных датасетах и сравнивали точность предсказаний.

Показано, что ГНС демонстрируют лучшее качество, чем языковые модели на большинстве задач. В части случаев, ГНС показала лучшее качество, чем языковая модель ChemBERTA-2 (см. таблицы 1, 2), содержащая в 84 раза больше параметров

Таблица 1. R² на задачах регрессии

Датасет/задача	QM9/ $\Delta_{\text{atom}}H^\circ_{298}$	FreeSolv/ $\Delta_{\text{hydr}}G^\circ_{298}$	QM9/ZPVE
ГНС (1М)	0.86	0.44	0.87
Языковая модель (1М)	0.53	0.35	0.58
ChemBERTA-2 (84 М)	0.74	0.56	0.81

Таблица 2. ROC-AUC на задачах классификации

Датасет	BACE	ClinTox	HIV
ГНС (1М)	0.83	0.81	0.69
Языковая модель (1М)	0.82	0.81	0.77
ChemBERTA-2 (84 М)	0.83	0.88	0.77

Литература

1. Ahmad W. et al. Chemberta-2: //arXiv preprint arXiv:2209.01712. – 2022.
2. Shukla M. //Proceedings of the IEEE/CVF Winter Conference on Applications of Computer Vision. – 2022. – С. 2367-2376.

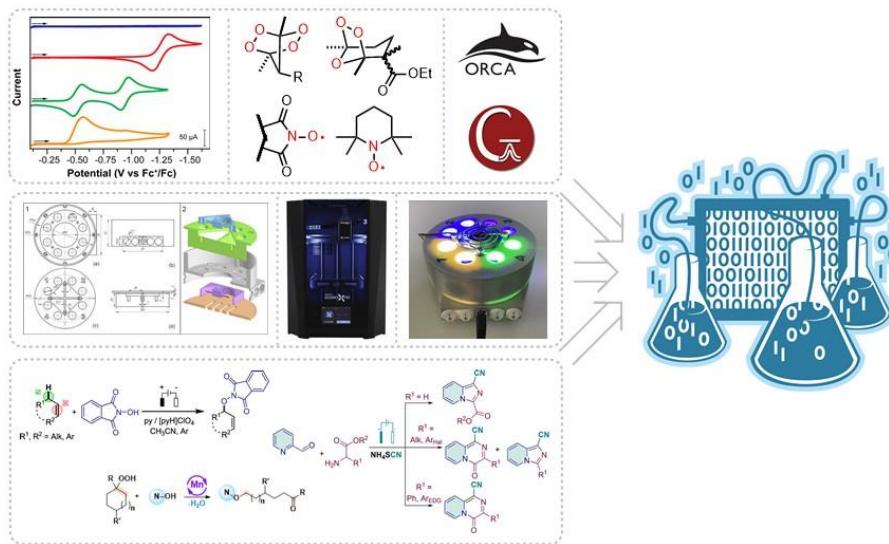
ЦИФРОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ОРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ: ПЕРЕДОВЫЕ ПОДХОДЫ И НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ

**Павельев С.А., Виль В.А., Крылов И.Б.,
Яременко И.А., Радулов П.С., Битюков О.В., Сегида О.О., Терентьев А.О.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского
Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47*

Использование цифровых подходов к обработке данных и планированию химических экспериментов в настоящее время является перспективным направлением в органической химии. В докладе представлены результаты нашей научной группы по следующим направлениям:

1. Создание атом-экономичных синтетических подходов и получение массива экспериментальных данных для предсказания реакционной способности различных классов органических соединений.^{1,2}
2. Применение аддитивных технологий для дизайна и конструирования фотопрессоров, позволяющих проводить глубокое изучение фотохимических процессов и сбор различных экспериментальных данных.
3. Использование электрохимических подходов и методов квантово-химического моделирования для изучения и предсказания реакционной способности редокс-активных органических соединений.



Литература

1. Paveliev S.A., Segida O.O., Dvoretskiy A., Terent'ev A.O., *ACS Omega*, 2024, **9**, 50, 49825–49831
2. Grishin S.S., Ustyuzhanin A.O., Vil' V.A., Terent'ev A.O., *Chem. Eur. J.*, 2025, **31**, e202404051

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта МОН № 075-15-2024-531.

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ДЛЯ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ТЕРМОХИМИИ

Пескова Е.Е.,^a Снытников В.Н.^б

^a*Национальный исследовательский Мордовский государственный университет,
430005, Республика Мордовия, Саранск, Большевистская 68*

^б*Институт катализа СО РАН,
630090, Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева 5*

Оптимизация режимов малотоннажных производств ценных углеводородов и водорода из природного газа является задачей, зависящей от большого числа параметров. Для быстрого поиска оптимальных режимов перспективно использование машинного обучения.

На данном этапе нами разработаны вычислительный алгоритм и программный комплекс для изучения химически активных дозвуковых потоков двухфазных смесей в трубчатых реакторах. Двухфазная среда представляет собой смесь вязкого теплопроводного газа и катализических наночастиц с гомогенными и гетерогенными химическими реакциями, включая радикальные, в газовой фазе и на катализических поверхностях. Реализована возможность подвода энергии к реакционному дозвуковому потоку от стенок реактора и посредством излучения, поглощаемого наночастицами и компонентами смеси. Для верификации и валидации разработанного программного комплекса использовались вычислительные эксперименты. В результате было получено хорошее соответствие с известными аналитическими решениями и экспериментальными данными, в частности, для процесса пиролиза этана.

Изучена лазерная каталитическая конверсия природного газа в этилен, водород и другие ценные продукты с высокими, выше 50%, конверсиями метана. Определено влияние различных параметров (интенсивность лазерного излучения, температура стенок реактора, концентрация и диаметр наночастиц, расход газовой смеси, диаметр трубы, энергия активации метана на наночастицах) на выходы целевых продуктов реакции¹.

Полученные таблицы данных могут служить основой для разработки моделей ИИ для перехода от медленного поиска востребованных решений к целенаправленному, быстрому и экономически эффективному созданию оптимальных технологий нового поколения для синтеза востребованных продуктов.

Литература

1. Пескова Е.Е. Математическое моделирование процессов лазерной термохимии: дис. ... д-ра физ.-мат. наук : 1.2.2. – Москва, 2025. – 219 с.

ГЛУБОКОЕ ОБУЧЕНИЕ В ЛЮМИНЕСЦЕНТНОЙ ТЕРМОМЕТРИИ

Поликовский Т.А.^{1,2}, Гончаренко В.Е.^{1,3}, Тайдаков И.В.^{1,3}

¹*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия
119991, Россия, г. Москва Ленинский пр-т, д. 53*

²*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

³*Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики», Москва, Россия
101000, Россия, г. Москва, ул. Мясницкая, д. 20*

Одной из проблем люминесцентной термометрии является задание калибровочной кривой, наиболее точно описывающей экспериментальные данные. Для этого используется полуэмпирическая модель Мотта-Зейтца¹, основанная на распределении Больцмана. Точность такой модели невелика, однако ее можно повысить, используя методы машинного и глубокого обучения, которые строят альтернативную калибровочную кривую.

Сравнительный анализ алгоритмов, в том числе многомерной линейной и изотонической регрессий, полносвязной и сверточной нейронных сетей — показал, что часто используемые методы² некорректно описывают сложные нелинейные зависимости между спектральными характеристиками и температурой, демонстрируя ошибку в 2–4 раза выше, чем модель Мотта–Зейтца. В то же время использование нейронных сетей позволило значительно повысить точность предсказания температуры: сверточная нейронная сеть обеспечила минимальную ошибку RMSE = 0.36, что в 7 раз выше точности аналитического подхода.

Данный подход был экспериментально проверен на новых смешаннометаллических координационных соединениях трехвалентных ионов европия и тербия с β -дикетонатными лигандами состава $[Eu_xTb_{1-x}(L)_3(H_2O)]_n$, где HL - 1-(1,5-диметил-1Н-пиразол-4-ил)-4,4-трифторм-1,3-бутандион. Полученные соединения проявляют яркую температурно-зависимую люминесценцию в диапазоне 77–320 К, сопровождающуюся перераспределением интенсивностей полос эмиссии Eu^{3+} и Tb^{+3} .

Таким образом, глубокое обучение, особенно сверточные архитектуры, демонстрирует высокую эффективность в задачах люминесцентной термометрии, позволяя значительно повысить точность измерений.

Литература

1. Dramićanin M. D. *Journal of Applied Physics*, **2020**, 128, 040902.
2. Brites C. D., Marin R., Suta M., Carneiro Neto A. N., Ximendes E., Jaque D., Carlos L. D. *Advanced Materials*, **2023**, 2302749.

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ВОДОРОДА

Попов З.И., Суханова Е.В., Орешонков А.С.

*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской Академии Наук,
119334, Москва, ул. Косыгина, д. 4*

Прямое преобразование солнечной энергии в водородное топливо при разложении воды требует использования материалов-катализаторов, сочетающих в себе такие характеристики, как способность поглощать в диапазоне солнечного спектра и высоким показателем времени рекомбинации носителей заряда. Поиск новых эффективных материалов-катализаторов, обладающих таким сочетанием характеристик, возможен среди низкоразмерных структур, в частности двумерных материалов^{1,2}. Высокая удельная площадь поверхности, проявление размерных эффектов, возможность модификации свойств двумерных материалов и возможность формирования гетероструктур делают их перспективной формой для катализатора как для получения водорода из воды, так и для многих других реакций. В представленной работе проведен вычислительный скрининг обширного набора двумерных структур с целью выявления потенциально подходящих материалов для реализации S- и Z-схем расщепления воды. Для отобранных монослоёв произведено моделирование спектров комбинационного рассеяния света, полученные данные могут быть использованы для экспериментальной верификации структуры обсуждаемых катализаторов. Предложена новая динамически стабильная двумерная модификация состава In-Si-S-Se для проведения реакции фотокаталитического разложения воды.

Литература

1. Sukhanova E.V., Sagatov N., Oreshonkov A.S., Gavryushkin P.N., Popov Z.I. International Journal of Hydrogen Energy, 2023, **48**, 14226.
2. Sukhanova E.V., Sagatov N., Oreshonkov A.S., Gavryushkin P.N., Popov Z.I. Nanomaterials 2023, **13**(2), 368.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-73-20094.

АНАЛИЗ ВЗАИМОСВЯЗЕЙ СТРУКТУРА-СЕНСОРНЫЙ ОТКЛИК В ОБНАРУЖЕНИИ ФОСФАТ- И АРСЕНАТ-АНИОНОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ МЕТАЛЛ- ОРГАНИЧЕСКИХ КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ

**Потапов А.С.,^а Поленников В.А.,^б
Змановская Д.Д.,^в Дудко Е.Р.^а**

^аИнститут неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук, 630090, Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 3,

^бНовосибирский национальный исследовательский государственный университет,
630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

^вСпециализированный учебно-научный центр НГУ,
630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 4

Благодаря настраиваемым структуре и фотофизическими свойствам, люминесцентные металл-органические координационные полимеры (МОКП) могут служить высокочувствительными и селективными сенсорами вредных и опасных веществ за счет заметного изменения их люминесценции. Направлением наших исследований является синтез и исследование сенсорных свойств МОКП с лигандами – производными 2,1,3-бензохалькогенадиазолов, содержащими 3(4)-карбоксиразольные заместители (рисунок 1). Нами был синтезирован ряд МОКП европия(III) и цинка(II) различной размерности и топологии, проявляющих люминесцентный сенсорный отклик на ряд анионов (H_2PO_4^- , HPO_4^{2-} , H_2AsO_4^- , HAsO_4^{2-}), определены пределы их обнаружения и селективность отклика в парах арсенат/фосфат. В докладе приводится анализ взаимосвязи сенсорных свойств МОКП с особенностями их строения (природа металла, лиганда, размерность).

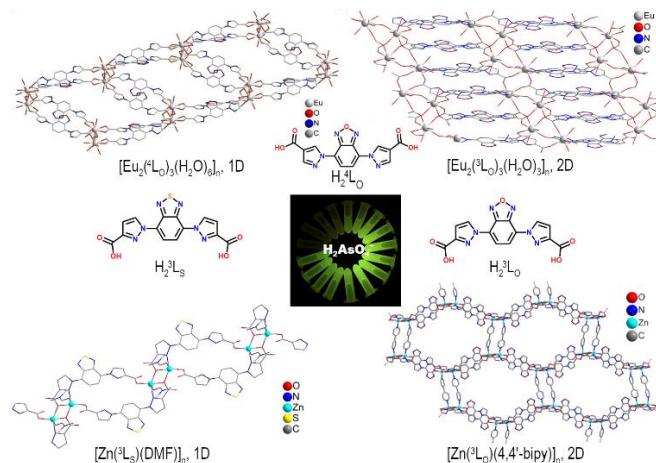


Рисунок 1. Лиганды – производные 2,1,3-бензохалькогенадиазолов и структуры синтезированных МОКП

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-13-00395.

АГЕНТЫ НА ОСНОВЕ БОЛЬШИХ ЯЗЫКОВЫХ МОДЕЛЕЙ И БИБЛИОТЕКИ СПЕКТРОВ ДЛЯ АНАЛИЗА ДАННЫХ СПЕКТРОСКОПИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

Проценко Б.О.^а, Лилярь М.С.^а, Асатуров Г.О.^а,
Куприяnenko D.I.^а, Чубков H.C.^а, Кулаев K.D.^а, Kochiev G.D.^а,
Гуда A.A.^а, Гуда C.A.^{а,б}, Алпатов A.A.^б, Солдатов A.B.^а

^а Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов Южного федерального университета,
344090 Ростов-на-Дону, Сладкова, 178/242,

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

Рентгеновская спектроскопия поглощения (XAS) — ключевой метод исследования локальной атомной и электронной структуры материалов в условиях *in situ* и *operando*. Однако её количественный анализ остаётся сложной обратной задачей, требующей привлечения эталонных спектров и экспертных знаний. Мы представляем новый подход к автоматизированному анализу XAS-данных на основе агентов с большими языковыми моделями (LLM), объединяющий валидированные экспериментальные и теоретические базы спектров с инструментами машинного обучения.

Разработанный ИИ-агент интегрирует накопленные знания из научной литературы (в том числе посредством RAG по сотням статей и учебников по тематике), несколько тысяч экспериментальных эталонных спектров (включая расширенную базу MDR и собственные данные) и 67 тысяч теоретических спектров, а также программные инструменты для работы со спектроскопией рентгеновского поглощения с акцентом на машинное обучение (PyFitIt). Созданные базы данных содержат спектры с аннотацией ключевых дескрипторов структуры (координационное число, заряд металла, тип окружения и др). Агент реализован в виде Telegram-бота. Представлены результаты тестирования агента на реальных задачах, а также бенчмарк для этих целей.

Литература

1. Martini, A.; Guda, S.A.; Guda, A.A.; Smolentsev, G.; Algasov, A.; Usoltsev, O.; Soldatov, M.A.; Bugaev, A.; Rusalev, Yu.; Lamberti, C.; et al. PyFitit: The Software for Quantitative Analysis of XANES Spectra Using Machine-Learning Algorithms. Computer Physics Communications 2020, 250, 107064, doi:10.1016/j.cpc.2019.107064.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства Науки и Высшего образования РФ, соглашение № 075-15-2025-509 от 30.05.2025 г.

РАЗРАБОТКА И ВНЕДРЕНИЕ RAG-СИСТЕМЫ ДЛЯ ИИ-АССИСТЕНТА ПО ЭЛЕКТРОННОМУ ЛАБОРАТОРНОМУ ЖУРНАЛУ

**Фёдоров О.В., Байрамкулов Д.Д.,
Пустовалова Т.В., Филиппенко П.С.**

117246 Москва, Научный проезд, 18, НИИ СБМ Роспотребнадзора

В научных лабораториях быстрый доступ к отчетам, регламентам и архивам экспериментов является критически важным. Мы разработали вопросно-ответную систему на основе архитектуры RAG (Retrieval-Augmented Generation), что позволяет получать точные ответы на запросы, используя в качестве базы знаний проиндексированный архив институтской документации из Obsidian (Markdown, PDF, Excel).

Проект реализован как многослойное асинхронное приложение на Python. Уровень представления — Telegram-бот (aiogram), уровень бизнес-логики (BotHandler) координирует процесс от приема запроса до постобработки ответа, уровень ML инкапсулирует работу с моделями. Ядро системы — RAG-пайплайн на базе библиотеки llama-index. Для векторизации текста используется модель all-MiniLM-L6-v2. Для работы с сенситивными данными предусмотрена возможность полной локализации системы (включая инференс моделей), без использования API внешних сервисов.

Для достижения максимальной точности ответов мы провели байесовскую оптимизацию гиперпараметров RAG-системы: в частности, размера фрагментов (chunk_size), перекрытия (chunk_overlap) и количества извлекаемых нод (top_k). В качестве целевой метрики была выбрана F1-мера, как гармоническое среднее между точностью и полнотой ответа. Наилучшие результаты демонстрирует гибридный ретривер сочетающий лексический поиск (BM25) и векторный поиск по индексу FAISS с семантическим разделением текста. В результате была создана эффективная RAG-система для быстрого доступа к базе знаний через удобный интерфейс Telegram-бота.

Литература

1. Lewis, P., et al. Retrieval-Augmented Generation for Knowledge-Intensive NLP Tasks. *Adv.in Neur. Inf. Proc. Sys.*, 2020, 33, 9459-9474.
2. Perez, E., et al. RAG vs. Fine-tuning: Pipelines, Tradeoffs, and a Case Study on Agriculture. *arXiv preprint arXiv:2401.08406*, 2024.

Работа выполнена с привлечением финансирования из государственного задания «Энзиматический синтезатор» номер 125041005130-8.

PLANT ANALYZER: ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦИИ АГРОХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ НА ОСНОВЕ МОДЕЛЕЙ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ

**Радулов А.С., Битюков О.В., Радулов П.С.,
Виль В.А., Терентьев А.О.**

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН,
119991 Москва, Ленинский проспект, д. 47*

Искусственный интеллект активно трансформирует научные исследования, обеспечивая автоматизацию рутинных процессов — от сбора и анализа до обработки экспериментальных данных¹. Plant Analyzer — это разрабатываемое в ИОХ РАН программное решение на базе собственной модели глубокого обучения, для точного и быстрого анализа изображений сельскохозяйственных культур. Система выполняет измерение морфологических параметров растений и снижает риск ошибок, связанных с человеческим фактором при сборе и оформлении экспериментальных данных. Программа обеспечивает формирование таблиц, графиков и отчётов в реальном времени, а её дальнейшее обучение позволит адаптировать модель к новым видам растений и типам экспериментов. Такой подход открывает возможность внедрения высокопроизводительного скрининга синтетических веществ на биологическую активность и подтверждает практическую ценность глубокого обучения для решения задач прикладной химии в аграрном секторе.



Литература

1. Ananikov V. P. Top 20 influential AI-based technologies in chemistry //Artificial Intelligence Chemistry. – 2024. – Т. 2. – №. 2. – С. 100075.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2024-531).

ПОИСК МАТРИЦ ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ, СОДЕРЖАЩИХ ЭВТЕКТИКИ ГАЛОГЕНИДОВ, С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

**Рубцов И.Д., Королев В.В.,
Митрофанов А.А., Петров В.Г.**

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

По общему согласию всех стран, использующих атомную энергию, наиболее эффективным и безопасным подходом к обращению с ядерными отходами является долгосрочное глубокое захоронение в специальных матрицах. Однако универсального подхода к выбору материала для матриц не существует, так как состав отходов может варьироваться в зависимости от вида реактора и вида переработки¹. Методы машинного обучения могут значительно ускорить поиск новых функциональных материалов, особенно в задачах, в которых ограничено применение конвенциональных материалов².

Таблица 1. Метрики регрессионных моделей

Свойства	R ²	MAE
E _{f,DFT} , эВ/атом	0.93	0.17
T _m , К	0.94	116
K _{VRH} , ГПа	0.95	12.61
G _{VRH} , ГПа	0.95	6.44

Для прогнозирования механических и термодинамических свойств материалов были обучены модели нейросетевой архитектуры CrabNet³ и большие языковые модели (Таблица 1). На основе обученных моделей и химических критериев отбора выявлены перспективные составы матриц для иммобилизации ионов Cs и Li. Были получены соединения CsLiMg₂F₆ и NaMgF₃ (минерал нейборит) твердофазным синтезом в муфельной печи. Для NaMgF₃ предел прочности на сжатие, удовлетворяет требованиям нормативных правил ($\sigma_{\text{пп}} \geq 41$ МПа).

Литература

1. Kulikova S. A. et al. Perspective compounds for immobilization of spent electrolyte from pyrochemical processing of spent nuclear fuel //Applied Sciences. – 2021. – Т. 11. – №. 23. – С. 11180.
2. Noh J. et al. Machine-enabled inverse design of inorganic solid materials: promises and challenges // Chem Sci. 2020. Vol. 11, № 19. P. 4871–4881.
3. Wang A.Y.-T. et al. Compositionally restricted attention-based network for materials property predictions // NPJ Comput Mater. 2021. Vol. 7, № 1. P. 77.

НЕЙРОСЕТЕВАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОСТАВА И ПАРАМЕТРОВ ПЛАЗМЫ ПО СПЕКТРАЛЬНЫМ ДАННЫМ

Рылов А.В., Лабутин Т.А.

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

Изучение лабораторных, промышленных, а также космических плазменных источников излучения представляет большой практический интерес. Низкая точность определения состава только по спектральным данным обусловлена отклонением экспериментальных данных от теоретических модельных представлений, что препятствует их повсеместному использованию. При этом, как отмечается в техническом отчёте IUPAC, прогресс в этой области возможен и исключительно полезны любые шаги, направленные на снижение зависимости от использования образцов сравнения для устранения матричных эффектов. Наиболее известный подход к определению состава плазмы без использования образцов сравнения требует априорный выбор эмиссионных линий без самопоглощения, при этом всё равно требуется большое количество ручного труда, а большое число параметров не позволяет легко получать точные результаты. Разумно подойти к решению этой задачи с использованием методов машинного обучения. Экспериментальные спектры во многом зависят от используемого прибора и конкретных условий измерения, например, положения и ширины исследуемых спектральных диапазонов, произвольного масштабирования спектров, аппаратной функции и др., которые тяжело перенести в обучающий набор. Соответственно, целью данной работы являлось создание подхода, способного пренебрегать различиями в эмиссионных спектрах, полученных разными приборами, и определять состав и температуру/электронную плотность излучающей плазмы.

Для изучения возможности быстрой оценки параметров плазмы по калиброванным спектрам был создан обучающий набор из 100000 спектров 15 элементов в диапазоне длин волн 250 - 750 нм с помощью разработанного в лаборатории алгоритма моделирования спектров однородного источника в состоянии локального термодинамического равновесия с варьированием аппаратной функции и спектрального разрешения. На вход нейросетевой модели подавался спектр, приведённый к одному размеру с использованием интерполяции, отсутствующие значения обнулялись, каждой длине волны приписывался обуляемый вектор состояния. Эти векторы умножались на интенсивность сигнала и складывались, после чего вектор суммы нормировался. Предсказания осуществлялись с использованием полно связной модели на основании суммарного вектора состояния.

ОЦЕНКА НАДЁЖНОСТИ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ МОЛЕКУЛ НА ПРИМЕРЕ KRAS

Рябченко Д.А.^{1,2}, Гуревич П.Е.^{1,2}, Кадыров Ш.Д.^{1,2}, Тиньков О.В.^{1,2},
Николенко С.А.^{1,2}, Фролова Д.С.^{1,2},
Пак М.А.^{1,2}, Шапеев А.В.^{1,2}

¹*Ligand Pro, 121205, Москва, Инновационный центр Сколково,
Большой бульвар 42 ст.1,*

²*Сколковский институт науки и технологий, 121205,
Москва, Большой бул., 30, ст. 1*

Популярные системы оценки генераторов молекул (GuacaMol¹, MOSES²), сосредоточены на метриках, анализирующих распределение молекул (的独特性, FCD). Такие оценки дают узкое представление об их применимости для практических задач медицинской химии.

Мы предлагаем прикладную систему фильтрации и оценки генеративных моделей, включающую: (1) *физикохимические дескрипторы*: удаление химически плохих структур и оценка соотношения новизны и сложности; (2) *структурные фильтры*: удаление молекул с токсичными фрагментами; (3) *синтезируемость*: подсчет показателей оценки возможности и сложности синтеза, подбор пути синтеза из коммерчески доступных прекурсоров, используя AiZynthFinder⁴; (4) *докинг в карман KRAS G12D switch-II pocket*: в качестве первого приближения связывания с мишенью проводится молекулярный докинг с использованием gnina и оценка связывания с помощью Boltz-2; (5) *формализованный экспертный анализ*: опыт медицинских химиков в качестве финального фильтра.

Мы отобрали 18 моделей для генерации молекул: безусловных и с условием на лиганды или белок. Для условных генераторов была выбрана мишень KRAS G12D. Каждая модель генерирует 10,000 молекул (всего 210,000 молекул для 21 конфигурации моделей); 969 молекул (менее 1%) прошли все этапы фильтрации, и пригодны для дальнейшей работы. Предложенный нами способ фильтрации обеспечивает разностороннюю оценку, дополняя классически метрики для оценки практической значимости модели. Код доступен по ссылке: <https://github.com/LigandPro>.

Литература

1. Brown et al., 2019. GuacaMol: benchmarking models for de novo molecular design. *Journal of chemical information and modeling*, 59(3), 1096-1108.
2. Polykovskiy et al., 2020. Molecular sets (MOSES): a benchmarking platform for molecular generation models. *Frontiers in pharmacology*, 11, 565644.
3. Ivanenkov et al., 2021. Chemistry42: An AI-based platform for de novo molecular design. *arXiv preprint arXiv:2101.09050*.
4. Genheden et al., 2020. AiZynthFinder: a fast, robust and flexible open-source software for retrosynthetic planning. *Journal of cheminformatics*, 12(1), 70.

ДАННЫЕ ВР ЭПР СПЕКТРОСКОПИИ КАК ФАКТОР ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ТОЧНОСТИ МОДЕЛЕЙ ОПТИМИЗАЦИИ СТРУКТУРЫ Д-А МОЛЕКУЛ

Самсоненко А.А.^{a,б}, Курганский И.В.^{a,б},
Федин М.В.^{a,б}, Чжао Ц.^в

^aМеждународный томографический центр СО РАН, г. Новосибирск, 630090, Россия

^бНовосибирский государственный университет,

ул. Пирогова, д.2, 630090, г. Новосибирск, Российская Федерация

^вДаляньский технологический университет, г. Далянь, 116024, КНР

Молекулы типа донор-акцептор электрона (Д-А) перспективны для разработки новых материалов для фотокатализа, фотодинамической терапии, органических светодиодов. Во всех этих приложениях важную роль играет взаимодействие состояния с переносом заряда (СПЗ) и возбуждённого, локализованного на одной из составных частей молекулы, триплетного состояния ($^3\text{ЛВС}$). Параметры этого взаимодействия требуют тонкой настройки. Современный подход к оптимизации структуры молекул с тонкой настройкой свойств включает применение моделей машинного обучения. Однако их качество напрямую зависит от полноты и информативности исходных данных. В существующих работах такие модели обучаются на данных квантовохимических расчётов и оптических методов, однако первые нуждаются в верификации, а вторые дают лишь часть характеристик.

ВР ЭПР-спектроскопия — мощный инструмент, чувствительный к динамике на нано-микросекундных масштабах, позволяющий определять локализацию, происхождение и каналы обмена СПЗ и $^3\text{ЛВС}$. Экспериментальные параметры, определённые с её помощью, могут значительно улучшить качество моделей для поиска новых структур Д-А-молекул.

В данном докладе представлены результаты экспериментов ВР ЭПР, проведённых для определения ключевых параметров СПЗ и $^3\text{ЛВС}$ в Д-А молекулах^{1,2}. Показана возможность выделения параметров, недоступных для других экспериментальных методов, и обсуждаются подходы к их интеграции в процесс оптимизации структур.

Литература

1. Xiao, X.; Kurganskii, I.; Zhao, J.; Fedin, M. et al., *Chem. Sci.* 2022, **13** (45), 13426–13441.
2. Chen, X.; Kurganskii, I. V.; Zhao, J.; Fedin, M. V. et al. *Angew Chem Int Ed* 2025, **64** (26), e202500718.

Работа выполняется при финансовой поддержке РНФ, проект 25-23-00545.

ИИ-АГЕНТ НА ОСНОВЕ LLM ДЛЯ КОРРЕЛЯЦИОННОГО АНАЛИЗА СВОЙСТВ В ГОМОЛОГИЧЕСКИХ РЯДАХ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ

Свердлов Ю.В., Анаников В.П.

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47*

Автоматизация исследовательского процесса с помощью ИИ-агентов является одним из перспективных направлений для применения технологий ИИ в химии¹. В литературе описаны ИИ-агенты для планирования синтеза и решения иных задач органической химии^{2,3}, однако их архитектура предполагает использование в интеллектуальном ядре агента проприетарных LLM. Создание доступных инструментов ИИ на базе open source технологий является актуальной задачей.

Разработан ИИ-агент с набором специализированных инструментов, способный анализировать корреляции между молекулярной массой и химическими свойствами среди гомологов заданного соединения, принимая на вход запрос пользователя на естественном языке. Агент реализован в рамках парадигмы CodeACT⁴ на базе программных библиотек Smolagents и RDKit, и предоставляет LLM набор инструментов для решения пользовательской задачи. Агент способен самостоятельно планировать решение задачи, собирать и анализировать данные.

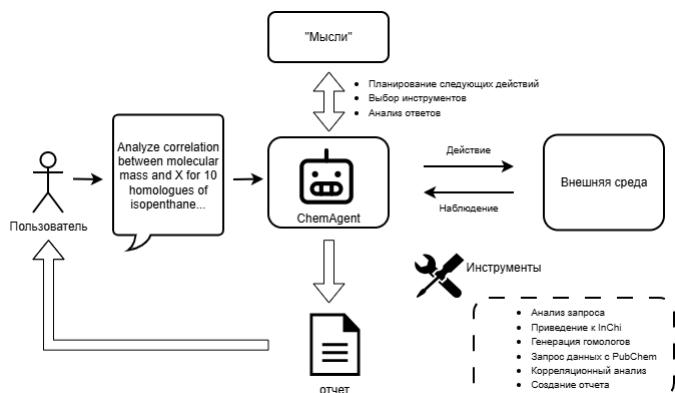


Рисунок 1. Принципиальная схема ИИ-агента

В качестве интеллектуального ядра ИИ-агента были протестированы LLM с открытым исходным кодом и количеством параметров от 3 до 670 млрд (семейства Qwen, Gemma, Mistral, Deepseek, Llama).

Литература

1. Ramos M.C., Collison C.J., White A.D. *Chemical Science*, 2025, **16**, 2514.
2. Boiko, D.A., MacKnight, R., Kline, B. et al. *Nature*, 2023 **624**, 570
3. M. Bran, A., Cox, S., Schilter, O. et al. *Nature Machine intelligence*, 2024, **6**, 525
4. Wang X., Chen Y., Yuan L. et al. Arxiv.org, 2024. <https://arxiv.org/abs/2402.01030>

СТАТИСТИЧЕСКОЕ НЕЙРОСЕТЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АКТИВНОЙ ОБЛАСТИ ЛИГАНДА

**Свитанько И.В.,^а Кумсков М.И.,^б
Медведев М.Г.,^а Лебедь И.С.^б**

^а Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47,

^б Механико-математический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, МГУ, д.1

Обучены нейросети для создания вероятностной модели, предсказывающей участки связывания белка и лиганда по 3D-структуре белка на основе анализа комплексов лиганд–белок, содержащихся в базах данных.

Суть работы:

- сбор доступных структур комплексов одной и той же мишени (белка в данном случае) и различных лигандов;
- совмещение структур комплексов так, чтобы молекулярные электростатические поля (МЭП) лигандов перекрывались в максимальной степени;
- определение плотности вероятности нахождения лигандов вокруг данной мишени;
- пространство МЭП с высокой плотностью совмещения МЭП лигандов (например, выше 75%) является вероятностной моделью свойства;
- валидация модели с помощью контрольной выборки лигандов.

Таблица 1. Примененные модели машинного обучения и качество их работы

	ROC AUC*
Байесовский классификатор	0.561
Логистическая регрессия	0.579
Решающее дерево	0.683
k ближайших соседей	0.567
Случайный лес	0.851
Метод опорных векторов	0.610
Градиентный бустинг	0.865

*Ансамблирование моделей показывает значения 0.860–0.868.

Вероятностная модель (в сравнении с классическим докингом) ингибитора первичной протеазы SARS-CoV-19 валидирована экспериментально, ингибитор показал высокую активность в тестах.

Литература

1. Svitanko I. V., Novikov F. N., Medvedev M. G. *XXII Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry*, 2024, Federal Territory “Sirius”, Russia, Vol 5 2024.
2. Stroylov V.S., Svitanko I.V., *Mendeleev Commun.*, 2020, **30**, 419; DOI: 10.1016/j.mencom.2020.07.004.

ПРОГРАММНО-АППАРАТНАЯ ПЛАТФОРМА ДЛЯ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО РОБОТА-ХИМИКА

**Серов Н.Ю.,^{a,б} Адыгамов М.Ш.,^{a,б} Голубь А.О.,^б
Сайфуллин Э.Р.,^{a,б} Савельев Г.Н.,^б Афонина В.А.,^б Гимадиев Т.Р.^{a,б}**

^aФедеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук», 420111, Казань, ул. Лобачевского, 2/31

^бКазанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова,
420008, Казань, ул. Кремлевская 18

В современных реалиях выходом из проблемы все возрастающих объемов данных и числа проводимых экспериментов являются автономные лаборатории (англ. self-driving labs¹), которые объединяют химические базы данных, методы машинного обучения (МО) и искусственного интеллекта (ИИ), а также аппаратные платформы по выполнению экспериментов.

Настоящая работа посвящена созданию аппаратно-программной платформы для робота-химика с целью последующей интеграции с ИИ. В качестве основы системы использована установка LifeBot для ПЦР-тестов от компании «Эвотэк-Мирай Геномикс», которая была модифицирована под проведение химических синтезов: создан подогреваемый смеситель, добавлены насосы для работы с растворителями, расширены хранилища реагентов и пипеток. Для проведения анализа продуктов реакции произведена интеграция с ВЭЖХ-системой.

Важной частью работы стало создание собственной библиотеки «ChemBot» для управления отдельными устройствами роботизированной установки, а также веб-сервера для управления всей системой.

Разработанная программно-аппаратная платформа может осуществлять синтезы в автономном режиме, начиная с приготовления реакционных смесей (включая пересчет требуемых количеств веществ), продолжая поддержанием температуры с перемешиванием в течение определенного времени и заканчивая отбором проб с разбавлением, переносом в хроматограф, запуском анализа и последующей обработкой полученных данных. Работа всей системы была проверена экспериментально на выполнении некоторых реакций пептидного синтеза и альдольной конденсации с варьированием реагентов, катализатора и условий процесса.

Литература

1. Tom G., Schmid S.P., Baird S.G., Cao Y., Darvish K., Hao H., Lo S., Pablo-García S., Rajaonson E.M., Skreta M., Yoshikawa N., Corapi S., Akkoc G.D., Strieth-Kalthoff F., Seifrid M., and Aspuru-Guzik A. *Chemical Reviews*, 2024, 124, 9633.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН.

НЕЙРОСЕТЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕДОКС-ПОТЕНЦИАЛОВ МАЛЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ С УЧЕТОМ РАСТВОРИТЕЛЯ

Смирнов М.В.,^а Митрофанов А.А.^{а, б}

^аМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, с. 3

^бМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Институт искусственного интеллекта,
119992, Москва, Ломоносовский просп. 27, корп. 1

Малые органические молекулы являются эффективными редокс-агентами в проточных батареях и органических светодиодах. Показана их применимость для переработки отработавшего ядерного топлива¹.

Был создан алгоритм, который предсказывает редокс-потенциал органических молекул в выбранном растворителе, на основе модели, состоящей из графовой сверточной нейронной сети², использующей представление редокс-активных молекул в виде графов, и полносвязной нейронной сети, использующей представление растворителя в виде вектора его физико-химических параметров.

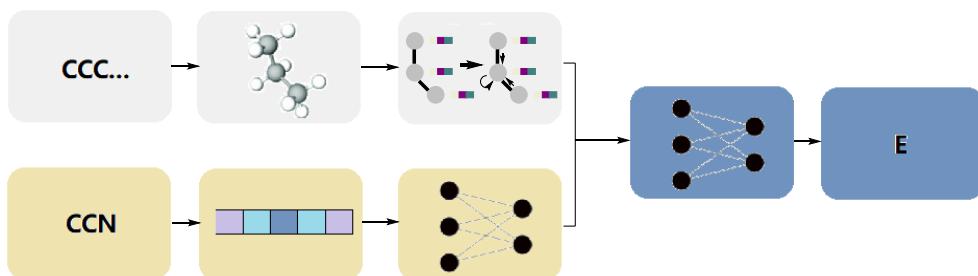


Рисунок 1. Архитектура нейронной сети.

Модель была обучена на наборе данных, состоящем из 1104 молекул и их экспериментальных редокс-потенциалов. Пересчет значений потенциалов молекул в разных растворителях осуществлялся при помощи квантовохимических расчетов. Теоретически рассчитанные и экспериментальные редокс-потенциалы молекул рассматривались в ходе обучения модели как данные низкой (low-fidelity) и высокой (high-fidelity) степени достоверности соответственно (подход multi-fidelity learning).

Полученная модель способна предсказывать редокс-потенциал молекулы в 12 различных растворителях с СКО 0.17 В, коэффициент детерминации модели (R^2) на тестовом наборе данных составил 0.97.

Литература

1. Marchenko V. I., Dvoeglazov K. N., Volk, V. I. *Radiochemistry*, 2009, **51**, 329.
2. Korolev V., Mitrofanov A., Korotcov A., Tkachenko V. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2020, **60**, 22.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В As₂S₃ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ СВЕТОМ ИК И УФ ДИАПАЗОНОВ

**Смирнов С.А., Орехов Н.Д.,
Мазитов А.Б., Круглов И.А.**

*МФТИ, Физтех,
141701, Московская область, Институтский переулок 9*

При облучении As₂S₃ происходит два вида фотохимических превращений, которые можно разделить по энергии облучения: при облучении с длиной волны 408 нм наблюдается фоторасслоение; при облучении же с длиной волны 785 нм наблюдается эффект гигантского фоторасширения¹.

При облучении УФ-излучением возникает фотон-экситонное взаимодействие – ширина запрещённой зоны для As₂S₃ составляет 2.6 эВ. Это приводит к тому, что образуемый экситон локализуется в межслойном пространстве, вызывая перераспределение заряда. Как показывает анализ по Bader, слои приобретают попарно одинаковый заряд, что вызывает межслоевое отталкивание, значительно превышающее энергию ван-дер-ваальсового взаимодействия. Из-за отталкивания возникает послоеевое испарение материала, что подтверждается топографией наночастиц по ACM. Расчёт выполнен в программном пакете VASP с использованием метода PBE-G0W0@BSE, с энергией обрезки 400 эВ, k-сеткой 10×4×4 и 512 состояниями (440 виртуальных) для стадии G0W0, а также 24 валентными и 24 состояниями зоны проводимости для стадии расчёта BSE².

При облучении с длиной волны 785 нм имеет место двухфотонный процесс, приводящий к разрушению с образованием точечных дефектов¹. Эти точечные дефекты интеркалируются в межслоевое пространство, вызывая расширение кристалла на 5% по данным молекулярной динамики и на 3% по экспериментальным данным ACM¹. Моделирование проведено в программном пакете LAMMPS³ с использованием универсального высокопроизводительного потенциала молекулярной динамики PETMAD⁴.

Литература

1. Minnekhanov A. A. et al. *preprint Research Square*, 2025.
2. Kresse G., Furthmüller J. *Physical review B.*, 1996, **54**, 11169.
3. Thompson A. P. et al. *Computer physics communications*, 2022, **271**, 108171.
4. Mazitov A. et al. *arXiv preprint arXiv:2503.14118*, 2025.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-73-10055.

ВЫЯВЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ОШИБОК МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ЗАДАЧАХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ХИМИИ

Смирнова А.А.,^a Митрофанов А.А.^{a,b}

^a*Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова
119991, Ленинские горы, 1с3*

^b*ООО НИИЦ «Синтез», 117571, Москва, проспект Вернадского, 86*

Методы, основанные на машинном обучении, широко используются сегодня в химических задачах, особенно при разработке лекарственных препаратов. Графовые сверточные нейронные сети (GCNN) конкурируют друг с другом в прогнозировании химических свойств, добиваясь меньших ошибок, чем при экспериментальных измерениях. Однако растущая сложность структур ввода данных и тенденция к использованию трехмерной молекулярной геометрии редко основываются на тщательном поиске точных конформаций для ввода.

Насколько нам известно, это первое исследование, связанное с вредоносным машинным обучением в молекулярной химии, направленное на выявление уязвимостей в моделях на основе искусственного интеллекта, которые предсказывают свойства молекул. Мы изучили стабильность архитектуры GCNN для разработки лекарств и выявили уязвимые места, связанные со структурными особенностями соединений. Мы сравнили поведение GCNN для предсказания ряда параметров (HOMO-LUMO Gap, энергия системы и дипольный момент) с методами классического машинного обучения (QSPR), а также с работой модели на основе архитектуры трансформеров.

Мы продемонстрировали, что высокое сходство между новыми молекулами и обучающим набором данных, измеренное с помощью индексов Танимото, не привело к качественному прогнозированию модели. Напротив, более непохожие структуры требуют добавления меньшего количества информации в обучающий набор для успешной процедуры активного обучения.

СПОСОБЫ МОДЕРНИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИИ ОКИСЛЕНИЯ ЦИКЛОГЕКСАНА

**Смуррова А.А., Косицьна А.В.,
Фролов А.С., Курганова Е.А.**

*Ярославский государственный технический университет,
150023, Ярославль, Московский проспект, 88*

Циклогексанон (ЦГ-он) и циклогексанол (ЦГ-ол) применяются, главным образом, в производстве адипиновой кислоты, капролактама и полiamидов. Их получают из циклогексана либо прямым окислением, либо в две стадии – через его гидропероксид, который затем разлагают в целевые продукты. В некоторых случаях ЦГ-ол подвергают дегидрированию в более ценный ЦГ-он. В основе существующей технологии лежат методы и технические решения прошлого века, поэтому существует необходимость в их модернизации.

В этой связи поиск и разработка путей усовершенствования имеющейся технологии получения ЦГ-ола и ЦГ-она, которые позволили бы устранить описанные выше недостатки является актуальной задачей.

Первым путем усовершенствования предлагается способ одностадийного окисления циклогексана до циклогексанола и циклогексанона с использованием каталитической системы *N*-гидроксифталимид (*N*-ГФИ)/ацетат Со (II), что позволяет получить ЦГ-ол и ЦГ-он с содержанием 5,5 и 4,1 % масс. соответственно при селективности их образования - 95 %.

Другим путем усовершенствования может стать использование гидропероксида циклогексила в реакции эпоксидирования с циклогексеном с целью получения не только ЦГ-ола и ЦГ-она, но и нового коммерчески важного продукта – эпоксида циклогексана. При температуре 90 °C, времени реакции 90 мин, концентрации катализатора (парамолибдата аммония) 0.00013 г/атом Мо на 1 г гидропероксида удалось получить эпоксид циклогексана с выходом 82,0 %, ЦГ-ол и ЦГ-он с выходом 99,5 %.

Третий путь заключается в замене промышленного высокотемпературного дегидрирования ЦГ-ола в ЦГ-он на процесс окисления. Такой метод позволяет достичь конверсии ЦГ-ола 40-53 % масс. при селективности образования ЦГ-она 97-99 %. Процесс не требует столь высоких температур и протекает при 100 °C.

Полученные экспериментальные результаты подтверждают, что предложенные в данной работе способы усовершенствования технологии получения ЦГ-ола и ЦГ-она могут представлять интерес для практического использования.

ТЕХНОЛОГИИ ИИ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАМИ ПРИ ДИАГНОСТИКЕ МАТЕРИАЛОВ И ПРОЦЕССОВ НА ИСТОЧНИКАХ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**Солдатов А.В., Гуда А.А., Проценко Б.О.,
Солдатов М.А., Гуда С.А.**

*Южный федеральный университет,
344090, Ростов-на-Дону, Андрея Сладкова 178/24*

Неразрушающая прецизионная диагностика основных параметров локальной атомной, электронной и магнитной структур материалов, в том числе в ходе технологически значимых процессов (например, химических реакций) является важнейшей частью процесса разработки новых материалов. В последнее десятилетие все большее число наиболее прецизионных методик диагностики разрабатывается с использованием исследовательской инфраструктуры мега-класса (синхротроны, рентгеновские лазеры на свободных электронах, нейтронные центры). Высокая яркость этих источников позволяют перейти к исследованиям с высочайшим временным и пространственным разрешением и с использованием минимального количества исследуемого материала.

Однако, крайне большой объем получаемых на таких установках данных не позволяет их анализировать непосредственно в ходе экспериментов и анализ обычными стандартными методами затягивается на месяцы и даже годы. Существенный прогресс в развитии технологий искусственного интеллекта (особенно в области машинного обучения) создал фундамент для разработки подходов, позволяющих с использованием обученных заранее нейронных сетей проводить анализ больших экспериментальных данных непосредственно в ходе эксперимента в режиме реального времени.

В ЮФУ разработан подход использование технологий искусственного интеллекта (глубокого машинного обучения), который позволяет решать задачу анализа больших данных для трех частей спектра рентгеновского поглощения (области предкрая, области XANES и области EXAFS) в режиме реального времени и успешно контролировать качество данных непосредственно в ходе комплексных экспериментов на источниках синхротронного излучения. Эта методика рентгеноспектральной нанометрологии крайне важна для решения задач создания и диагностики практически важных перспективных материалов с требуемыми уникальными свойствами, в том числе нанокатализаторов для получения «зеленого» водорода.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-43-00215.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ НА ОСНОВЕ САМОСОГЛАСОВАННОГО ЭКСТРЕМАЛЬНОГО КЛАССИФИКАТОРА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ШИРОКОГО КРУГА QSAR/QSAR ЗАДАЧ

Столбов Л.А., Тарасова О.А., Поройков В.В.

*Институт биомедицинской химии им. В. Н. Ореховича,
119121, Москва, ул. Погодинская, 10*

Разработка точных и интерпретируемых классификационных и количественных моделей структура-свойство/активность осложняется несбалансированностью данных, избыточностью дескрипторов и необходимостью отбора значимых признаков. Для решения этих задач предложен Самосогласованный Экстремальный Классификатор (SCEC), основанный на статистической регуляризации и самосогласованной регрессии. Метод итеративно отбирает релевантные дескрипторы, строя компактные и устойчивые модели, учитывает дисбаланс классов с помощью весов объектов и предотвращает переобучение. Используемая экстремальная функция потерь на распределении Гумбеля делает SCEC эффективным для бинарной и многоклассовой классификации.

Эффективность метода показана на трёх задачах.

1. QSAR-классификация ингибиторов ВИЧ-1. Для трёх мишней (протеаза, интеграза, обратная транскриптаза) на наборах >4000 соединений SCEC показал¹ точность, превышающую сопоставимую с методами SVM и нейросетевыми подходами, при этом использовали в 3–4 раза меньше дескрипторов, обеспечивая лучшую обобщающую способность.

2. Классификация резистентности ВИЧ. На данных Stanford HIV Drug Resistance Database по 19 ингибиторам проведена трехклассовая классификация последовательностей (чувствительные, умеренно и высоко резистентные). Подход дал следующие результаты: чувствительность 0,913, специфичность 0,894, AUC-ROC 0,953. Модели успешно прошли проспективную валидацию и реализованы в веб-приложении².

3. Прогноз цитотоксичности ионных жидкостей. Для выборки из более чем 3000 соединений с использованием SCEC удалось выявить ключевые структурные факторы токсичности: длину алкильного заместителя и природу аниона, что может позволить отбирать ионные жидкости с низкой токсичностью, потенциально пригодные для исследований.

Литература

1. L. A. Stolbov, D. A. Filimonov, and V. V. Poroikov. *SAR QSAR Environ. Res.*, 2022, **33**, 793-804.
2. <https://www.way2drug.com/viruses/resistance/>

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований в Российской Федерации на долгосрочный период (2021 - 2030 годы) (№ 122030100170-5)

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА АМИНОВ И АММОНИЙНЫХ СОЛЕЙ, СОДЕРЖАЩИХ ЦИКЛОАЦЕТАЛЬНЫЙ И ГЕМ- ДИХЛОРЦИКЛОСОЛЕЙ

**Султанова Р.М., Борисова Ю.Г.,
Раскильдина Г.З., Злотский С.С.**

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,
450064, Уфа, Космонавтов 1*

В нефтепромысловой химии находят широкое применение четвертичные аммониевые соли (ЧАС), способные ингибировать кислотную и сероводородную коррозию, обладающие поверхностно-активными свойствами и широким спектром биологической активности (антибактериальной, противомикробной и др.). Известно, что введение в органические соединения циклоацетального и гем-дихлорциклогексанового фрагментов, как правило, улучшает их растворимость в водно-органических системах, что повышает эффективность их ингибирующего действия.

В докладе представлены результаты систематического изучения различных вариантов синтеза вторичных, третичных аминов и солей на их основе, используя в качестве *N*-алкилирующих агентов галоидметил-1,3-диоксациклоалканы и гем-дихлорциклогексаны, полученные на базе продуктов нефтехимии.

Под действием 4-хлорметил-1,3-диоксоланов и хлорметил-гем-дихлорциклогексанов первичные амины (алкил-, арил-, алканоламины и этилен-, пропилендиамины) с количественным выходом были переведены в соответствующие вторичные амины. Реакцией последних с *CN*-кислотами и параформом (конденсация Манниха) были получены третичные амины. Для получения ЧАС, содержащих 1,3-диоксациклоалкановый и / или гем-дихлорциклогексановый фрагмент, использовали реакцию взаимодействия третичных аминов с бромметил-гем-дихлорциклогексанами и бромметил-ацеталями.

В докладе обсуждаются результаты исследования биологической активности полученных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования науки Российской Федерации (Государственное задание «Разработка и создание малотоннажных продуктов и реагентов (ингибиторы коррозии и солеотложения, антиоксиданты, биоциды, присадки и др.) для процессов нефтегазохимии и очистки водных сред от загрязнений, замещающих импортные вещества и материалы. Теоретические и экспериментальные подходы. (FEUR-2023-0006)».

ЦНС АКТИВНЫЕ МОЛЕКУЛЫ С ЛИПОФИЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ

**Суслов Е.В.¹, Можайцев Е.С.¹, Мункуев А.А.,
Пономарев К.Ю.¹, Рогозин П.Е.¹, Филиппова А.Ю.¹, Питухин М.П.¹,
Мешкова Ю.В.¹, Александрова Ю.Р.², Неганова М.Е.², Павлова А.В.¹,
Драгоманова С.³, Танчева Л.³, Рейниссон Й.⁴, Сорокина И.В.¹,
Волчо К.П.¹, Толстикова Т.Г.¹, Салахутдинов Н.Ф.¹**

¹ НИОХ СО РАН, просп. Ак. Лаврентьева, д.9, Новосибирск, 630090, Россия,

² ИНЭОС РАН, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1, Москва, 119334, Россия

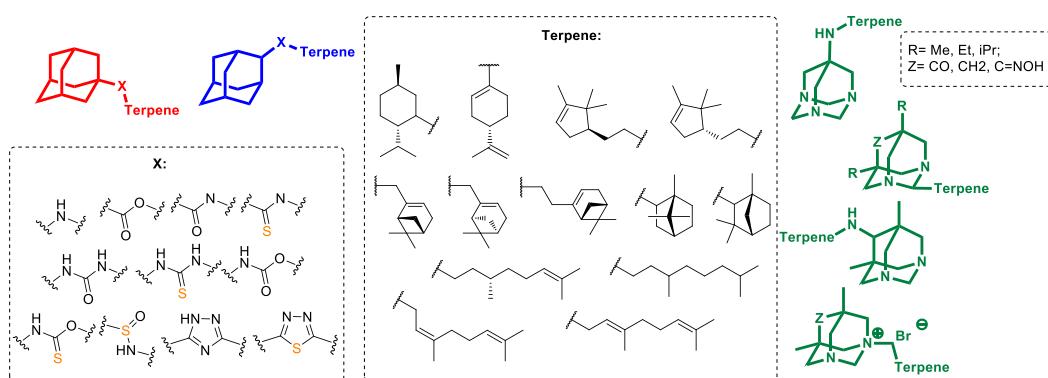
³ Институт нейробиологии Болгарской академии наук,
ул. акад. Г. Бончева, кв. 23, София, 1113, Болгария

⁴ Факультет фармацевтики и биоинженерии, Кильский университет, здание Hornbeam,
Страффордшир ST5 5BG, Великобритания

Одним из классов природных соединений, обладающих широким набором биологической активности, являются монотерпеноиды, в настоящее время их химическая трансформация применяется для разработки новых лекарственных препаратов [1]. Помимо структурных модификаций природных соединений в медицинской химии для получения новых лекарственных агент используется введение в структуру веществ известных фармакофорных групп, например, такой как адамантановый фрагмент [2] и др.

Основным направлением нашей работы является разработка подходов и методов синтеза биологически активных конъюгатов, сочетающих адамантановый или азаадамантановый и монотерпеноидный фрагменты, соединенных через различные промежуточные группы.

Мы синтезировали широкие библиотеки соединений подобного типа, при этом в качестве линкерной нами применялись как линейные группы, так и различные гетероциклы.



Синтезированные вещества показали анальгетическую активность. На различных биологических моделях болезни Альцгеймера и рассеянного склероза было показано, что некоторые из синтезированных нами соединений проявляют выраженную биологическую активность в отношении патологических процессов протекающих при этих заболеваниях.

Литература

1. Newman D.J. et al. Nat. Prod., 2012.
2. Wanka L. et al. Chem. Rev., 2013.

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ 3D-ПЕЧАТНЫХ ФИЛЬТРАЦИОННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Сысоев Е.И.,^{a,б} Долгин А.С.,^{a, б} Сычев М.М.^{a, б}, Солдатов А.А. ^{a, б}

^a*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (ТУ),*

190013, Санкт-Петербург, Московский пр-т, д. 24-26/49 л. А,

^б*НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей»,*

Санкт-Петербург, Шпалерная ул., д. 49

На данный момент в металлургии применяются керамические фильтры (рис. 1а), обладающие стохастической структурой пор и развитой поверхностью. Однако, нерегулярная структура пор губки приводит к неравномерному распределению потока, что повышает перепад давления и снижает эффективность фильтрации. Развитие аддитивных технологий открывает возможности в создании материалов со сложной регулярной структурой, обеспечивающих оптимальное сочетание гидродинамических характеристик и высокую степень улавливания механических примесей.

Проведена разработка и исследование 3D-печатных керамических фильтров на основе α - Al_2O_3 , изготовленных по технологии стереолитографии (SLA). По данным численного моделирования различных геометрий выявлена перспективная структура (рис. 1б), обеспечивающая высокий коэффициент качества фильтрации по сравнению с традиционным керамическим фильтром. Экспериментальные образцы, напечатанные на 3D-принтере, показали снижение гидравлического сопротивления и улучшение качества фильтрации. Полученные результаты демонстрируют перспективность применения 3D-печати для создания высокоэффективных керамических носителей катализаторов.

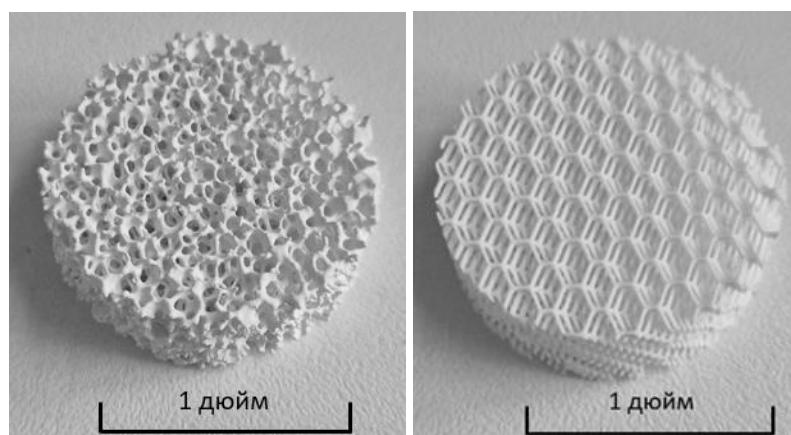


Рисунок 1. Внешний вид образца (а) керамической губки и (б) разработанного фильтра.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 21-73-30019.

ЦИФРОВАЯ МАГНЕТОХИМИЯ

Третьяков Е.В.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, г. Москва, Ленинский проспект 47*

Интенсивное развитие информационных технологий обуславливает всеобъемлющую цифровизацию социально-экономических процессов. Данный тренд сопровождается экспоненциальным ростом объёмов данных, требующих обработки, хранения и передачи.

Современные информационные технологии, базирующиеся на управлении зарядом электрона, приближаются к фундаментальным физическим ограничениям. В этой связи особую актуальность приобретает поиск альтернативных парадигм обработки информации. Одним из перспективных направлений выступает спинtronика, эксплуатирующая спин электрона в качестве носителя информации.

Ключевой задачей спинtronики является управляемое манипулирование спиновыми состояниями, что предполагает решение комплекса научно-технических проблем: дизайн обменно-связанных спиновых кластеров; конструирование квантовых логических вентилей на основе спиновых систем; интеграция спиновых элементов в масштабируемые устройства для хранения и обработки квантовой информации.¹

С применением цифровых технологий нами осуществлён дизайн органических двух- и многоспиновых систем, при этом применены оригинальные комбинации спиновых носителей: нитронилнитроксил–ванадил, бензотриазинил–ванадил, нитрен–нитронилнитроксил. Предложенные системы обеспечивают существенную разницу *g*-факторов между компонентами системы и возможность реализации двухкубитных квантовых вентилей.^{2–4}

Литература

1. Tretyakov E.V. *Preparation and characterization of magnetic and magnetophotonic materials based on organic free radicals*. In *Organic Radicals* / Eds. C. Wang, A. Labidi, E. Lichtfouse. – Elsevier, 2024. – P. 61–181.
2. Shmakov A.S., Shurikov M.K., Korchagin D.V., Votkina D.E., Postnikov P.S., Akimov A.V., Petunin P.V., Tretyakov E.V. *J. Phys. Chem. A*, 2025, **129**, 1808.
3. Gulyaev D., Serykh A., Gorbunov D., Gritsan N., Akyeva A., Syroeshkin M., Romanenko G., Tretyakov E. *Cryst. Growth Des.*, 2024, **24**, 5764.
4. Zayakin I.A., Romanenko G.V., Korlyukov A.A., Tretyakov E.V. *Organometallics*, 2025, **44**, 892–898.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2024-531).

СИСТЕМАТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КЛАСТЕРОВ НА ОСНОВЕ БОРА: СТРУКТУРЫ, УСТОЙЧИВОСТЬ И ПЕРСПЕКТИВЫ В КАЧЕСТВЕ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Федяева М.А.,^{a,б} **Лепешкин С.В.**,^{a,в} **Оганов А.Р.**^а

^aСколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, Большой бульвар д. 30, стр. 1

^бИнститут геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук, 119991 ГСП-1 Москва, г. Москва, ул. Косыгина, д.19

^вФизический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, 119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д. 53

Наноструктуры на основе бора — бор-нитридные и бор-углеродные объекты (наномолекулы, нанопроволоки, нанотрубки, тонкие плёнки и т.п.) — в последние годы активно изучаются благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам. Они находят применение в самых разных областях: электронные устройства, материалы для накопления водорода, наносветодиоды, волокна повышенной прочности, сенсоры и др. Одним из наиболее перспективных классов объектов являются нанокластеры. В настоящей работе мы исследуем свойства таких систем.

Представлено теоретическое исследование бор-углеродных B_nC_m ($0 \leq n, m \leq 12$) и бор-азотных B_nN_m ($0 \leq n, m \leq 10$) нанокластеров для широкого диапазона стехиометрий с использованием эволюционного алгоритма USPEX^{1,2} и первопринципных расчётов. Мы обнаружили разнообразие структурных мотивов, зависящих от размера кластера и соотношения B/C или B/N. По ряду критериев (величина второй производной энергии по составу, энергия фрагментации и ширина HOMO–LUMO щели) были выделены наиболее устойчивые («магические») молекулы, которые могут служить строительными блоками и промежуточными продуктами в синтезе и росте B–C и B–N наноструктур. Дополнительно наш анализ выделил ряд азот-обогащенных соединений (BN_3 , BN_9 , B_3N_5 , B_4N_6 и B_6N_9), которые одновременно являются «магическими» и выделяют значительное количество энергии при разложении, что указывает на их потенциальное применение в качестве высокоэнергетических материалов (HEDMs).

Литература

1. Oganov A.R., Glass C.W. *J. Chem. Phys.*, 2006, **124**, 244704.
2. S. V. Lepeshkin, V. S. Baturin, Y. A. Uspenskii and A. R. Oganov, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2019, 10, 102–106.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ В ГЦК МЕТАЛЛАХ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Фомин Е.В.,^{a,b} Брюханов И.А.^a

^aНаучно-исследовательский институт механики МГУ имени М.В. Ломоносова,
119192 Москва, Мичуринский проспект, 1

^bЧелябинский государственный университет,
454001, Челябинск, Братьев Кашириных, 129

Микроструктура металлов и сплавов, а именно распределение границ зерен и средний размер зерен, в значительной степени определяет прочность и механические свойства материалов. Процессы динамической рекристаллизации в металлах возникают при высокотемпературной обработке, например, ковка, экструзия и прокатка¹. Учет рекристаллизации важен, так как эти процессы влияют и на микроструктуру, и упругопластический отклик материала².

Данная работа посвящена теоретическому исследованию процессов деформации и эволюции микроструктуры ГЦК металлов при повышенных температурах, где вещества описывается в рамках аппарата механики сплошных сред, уравнение состояния – с помощью методов машинного обучения, микроструктура – методом клеточных автоматов. Уравнения состояния ГЦК металлов – нейронные сети прямого распространения, обученные на данных атомистического моделирования.

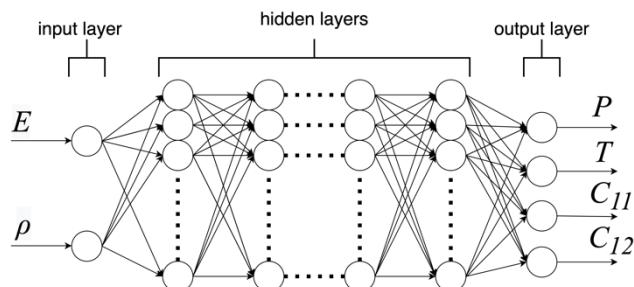


Рисунок 1. Схема уравнения состояния чистого алюминия
в виде нейронной сети прямого распространения.

Литература

1. Figueiredo R.B., Figueiredo R.B., Kawasaki M., Langdon T.G. *Progress in Materials Science*, 2023, **237**, 101131.
2. Guan X.J., Shi F., Ji H.M., Li X.W. *Scripta Materialia*, 2020, **187**, 216-220.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, 24-71-00078.

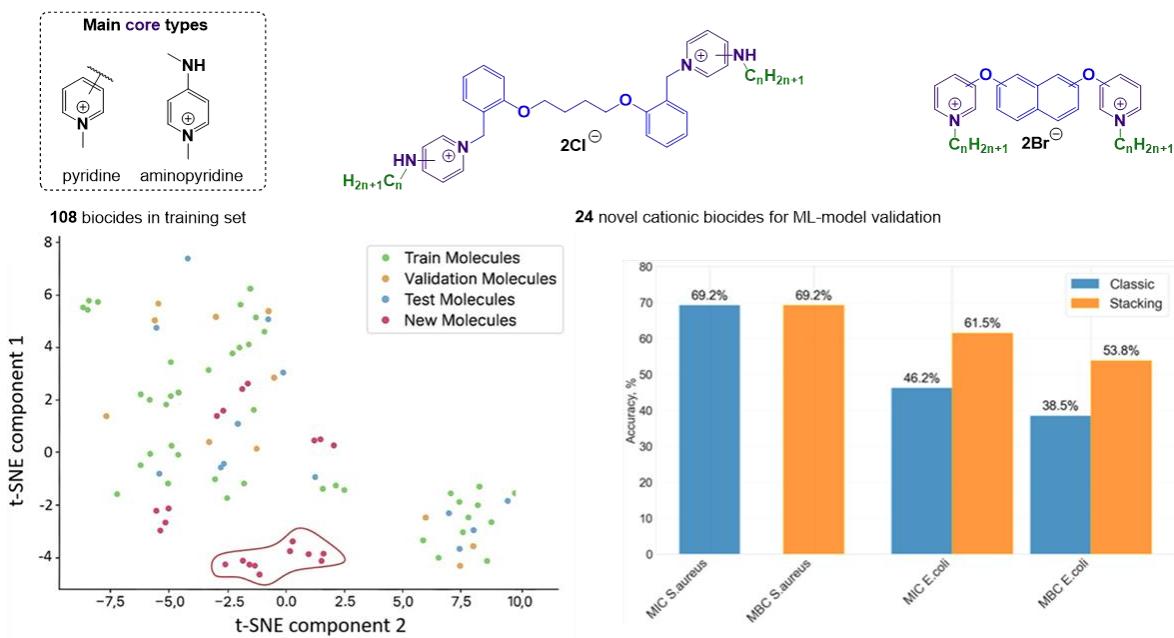
СИНТЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ И ПРИМЕНЕНИЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ КАТИОННЫХ БИОЦИДОВ

**Фролов Н.А.^а, Ильин Е.А.^а, Сеферян М.А.^а,
Валеев А.Б.^а, Винокуров А.Д.^а, Детушева Е.В.^{а,б}, Элизабет С.^б,
Медведев М.Г.^а, Верещагин А.Н.^а**

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

⁶Государственный научный центр прикладной микробиологии и биотехнологии, 142279, Московская обл., г.о. Серпухов, п. Оболенск, 24

Бактериальная резистентность представляет собой значительную угрозу эффективности современных антибактериальных препаратов, подвергая риску жизни миллионов людей. Однако, современные инструменты машинного обучения дают надежду на ускорение «вечной» разработки новых противомикробных агентов. В данной работе представлены подходы к синтезу и предсказанию антибактериальной активности четвертичных аммониевых соединений (ЧАС) в качестве катионных биоцидов. Реализованный принцип «биологически информированного» стекинга позволил предсказать биоцидные концентрации для широкого спектра бактерий с точностью 61–69% и R^2 0.68 при валидации на новых бис-ЧАС. Разработанная модель может служить эффективным инструментом для поиска antimикробных препаратов даже при лимитированных данных¹.



Литература

1. Ilin, E.; Frolov, N.A. et al. Available at SSRN 5396440.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ
(соглашение № 075-15-2024-531)*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ICP-CVD С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАШИННО-ОБУЧЕННЫХ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

**Чалый В.А.,^a Гарифуллин К.З.,^{б,в} Мезенцев И.А.,^a
Лосев Т.В.,^a Баширов И.И.,^a Кликушин А.С.,^a Подрябинкин Е.В.,^б
Малышев В.И.,^a Новиков И.С.,^{б,в} Шапеев А.В.,^б Медведев М.Г.^a**

^a Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН,
119334, Москва, Ленинский проспект, 47

^б Сколковский институт науки и технологий,
121205, Москва, Большой бул., 30/1

^в Московский физико-технический институт 141701,
Долгопрудный, Институтский пер., 9

Наноэлектроника следующего поколения требует разработки новых термически и механически стабильных материалов с относительной диэлектрической проницаемостью (k), максимально близкой к 1. В июне 2020 года Hong et al. представили аморфный нитрид бора, осажденный ICP-CVD (a-BN) с очень низким значением k , равным 1,78¹. Слой этого материала толщиной в три нанометра был получен методом химического осаждения боразола из газовой фазы с источником индуктивно-связанной плазмы (ICP-CVD). Два года спустя Lin et al. провели, казалось бы, идентичный синтез, но получили соединение с заметно отличающимися свойствами². В условиях идентичных эксперименту Hong, соотношение бора и азота (B:N) составляло ~2,64, тогда как B:N в оригинальных пленках составляло 1,0. Чтобы получить такое же соотношение B:N, группе Lin пришлось добавлять молекулы азота в поток газа. Чтобы понять, почему предположительно эквивалентные условия приводят к получению разных продуктов, мы сконструировали цифровой двойник процесса ICP-CVD для этой системы и установили наиболее вероятную причину расхождения между экспериментами. Наша модель, использующая машинообученный межатомный потенциал MLIP³, позволила установить, что морфология пленок в значительной степени зависит от частиц, достигающих подложки.

Литература

1. Hong S., Lee C.-S., Lee M.-H., Lee Y., Ma K.Y., Kim G., Yoon S.I., Ihm K., Kim K.-J., Shin T.J., Kim S.W., Jeon E., Jeon H., Kim J.-Y., Lee H.-I., Lee Z., Antidormi A., Roche S., Chhowalla M., Shin H.-J., Shin H.S. Nature, 2020, **582**, 7813, 511
2. Lin C., Hsu C., Huang W., Astié V., Cheng P., Lin Y., Hu W., Chen S., Lin H., Li M., Magyari-Kope B., Yang C., Decams J., Lee T., Gui D., Wang H., Woon W., Lin P., Wu J., Lee J., Liao S.S., Cao M. Advanced Materials Technologies, 2022, **7**, 10, 2200022
3. Podryabinkin E.V., Shapeev A.V. Computational Materials Science, 2017, **140**, 171.

МЕТОДЫ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПАРСИНГА ХИМИЧЕСКИХ СТАТЕЙ

**Шандыбо М.А.^{a,b}, Рекут Н.А.^c,
Злобин И.С.^{a,b}, Павлов А.А.^a**

^aИнститут общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект 31

^bИнститут физической химии и электрохимии имени А. Н. Фрумкина РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4

^cИнститут элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,
119334, Москва, ул. Вавилова 28

Ключевая проблема применения методов машинного обучения в химии – это нехватка качественных и достоверных данных. Несмотря на простоту формулировки, задача извлечения текстовой информации из PDF-файлов с сохранением исходного форматирования до сих пор не решена в полной мере: даже лучшие open source решения не обеспечивают качества, достаточного для дальнейшей автоматизированной обработки и извлечения химических сущностей¹.

В настоящей работе мы представляем фреймворк для полностью автоматического извлечения информации из химических статей, без использования больших лингвистических моделей промышленного масштаба, включающий перевод PDF-файла научной статьи в Markdown с полным сохранением структуры и форматирования и выделение заданных химических сущностей из полученного текстового массива. Изложенный подход демонстрирует качество выделения химических сущностей с F1 score 87%, что на 11% выше, чем самые продвинутые аналоги в области².

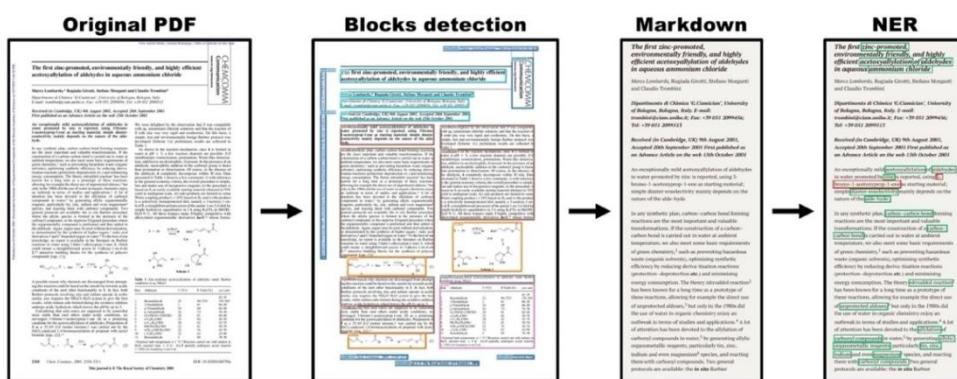


Рисунок 1. Визуализация стадий работы фреймворка

Литература

1. Swain, M. C. & Cole, J. M. *J. Chem. Inf. Model.* 2016, **56**, 1894–1904.
2. Zhang, Y., Vlachos, D. G., Liu, D. & Fang, H. *J. Chem. Inf. Model.* 2025, **65**, 4334–4345.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение о предоставлении гранта №075-15-2025-584).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ИНТЕНСИВНОСТИ ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ В МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСАХ

**Широбоков В.П.^а, Жолобов Д.В.^а
Мезенов Ю.А.^а, Миличко В.А.^{а,б}**

^аУниверситет ИТМО,

197101, г. Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, д.49, литер А.,

^бNew Uzbekistan University,

100102, Узбекистан, г. Ташкент, улица Мовароуннахра, 1

Генерация второй гармоники (англ. Second-harmonic generation, SHG) – ключевой феномен для лазерных технологий и фотоники. Поиск альтернатив традиционным кристаллам (КTP, LiNbO₃) среди металлоорганических каркасов (МОК) ограничивается фрагментацией данных между экспериментальными и вычислительными источниками с разными методологиями, а также малым количеством данных по второй гармонике. Химическое пространство материалов для генерации второй гармоники огромно и машинное обучение может ускорить поиск таких материалов, но требует качественных унифицированных данных.^{1, 2}

Создана первая экспериментальная база данных SHG-коэффициентов для 66 МОК. Дополнительно были интегрированы вычислительные данные (996 неорганических материалов) через формулу Курца-Перри, преобразующую тензорные элементы в экспериментально сопоставимые величины d_{kp} . База дополнена 1441 центросимметричными структурами из различных семейств материалов для обучения физическому принципу нулевой SHG при наличии центра инверсии.

Унифицированная база (2413 материалов) улучшила модель GIN-SHG: MAE снизилась с 19.56 до 2.27 пм/В, RMSE – с 34.62 до 9.72 пм/В. Критически важно корректное предсказание нулевых коэффициентов для центросимметричных структур (MAE=0.009 против 32.046 пм/В у исходной модели).

Работа решает проблему несогласованности данных в машинном обучении для предсказания SHG в кристаллах, интегрируя физические ограничения в data-driven процессы. Подход применим для других симметрийно-зависимых свойств, таких как сегнетоэлектричество и пьезоэлектричество.

Литература

1. R. Bano et al. A theoretical perspective on strategies for modeling high performance nonlinear optical materials. *Frontiers in Materials*, 2021, **8**.
2. C. E.Wilmer et al. Large-scale screening of hypothetical metal–organic frameworks. *Nature Chemistry*, 2012, **4**, 83.

ДИЗАЙН БИОАКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИФТОРБЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ

**Щегольков Е.В., Бургарт Я.В., Щур И.В.,
Барановский А.Д., Салоутин В.И.**

*Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского УрО РАН, Российская Федерация,
620066, Екатеринбург, С. Ковалевской, 22*

Полифторбензойные кислоты (ПФБК), включая их 2-гидроксипроизводные – полифторсалициловые кислоты (ПФСК), представляют собой перспективные синтон-блоки для органического синтеза и медицинской химии.¹ Модификация этих кислот может проходить не только по карбоксильной/гидроксильной группе, но и по полифторароматическому ядру в реакциях нуклеофильного ароматического замещения (рис. 1). Продукты их превращений проявляют различные виды биологической активности: туберкулостатическая, анальгетическая и противовоспалительная. На основе ПФСК/их эфиров и лигандов бипиридинового типа получены металлокомплексы, сочетающие высокое антибактериальное и противогрибковое действие.

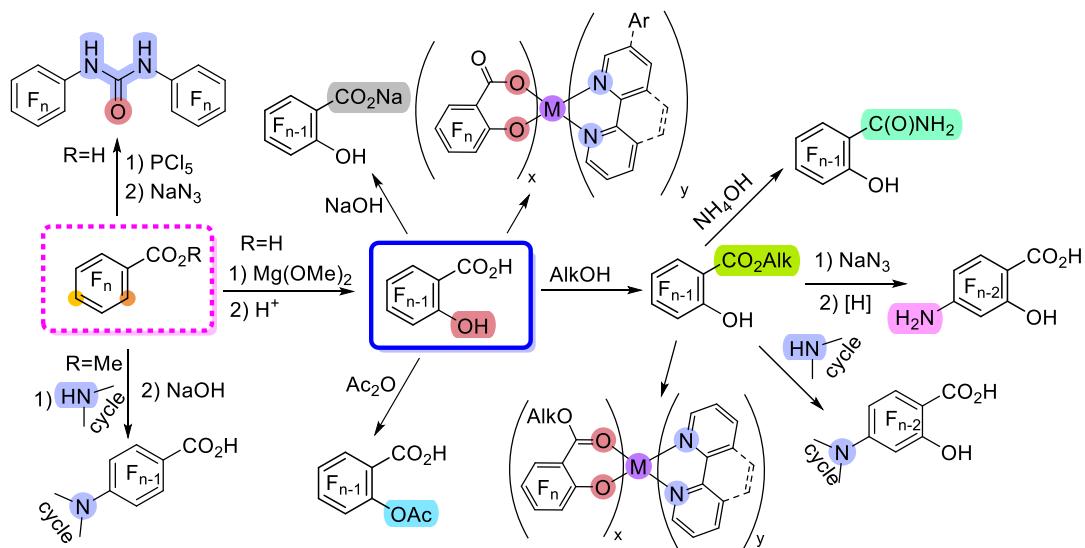


Рисунок 1. Реализованные трансформации на основе ПФБК и ПФСК

Оценка ADME профиля синтезированных соединений проведена с помощью программы QikProp (Schrödinger) и веб-платформы SwissADME. Противовоспалительная активность полифторсалицилатов может быть связана с ингибиением ЦОГ-1, что подтверждено *in vitro* экспериментом и молекулярным докингом.

Литература

1. Щегольков Е.В., Бургарт Я.В., Щур И.В., Салоутин В.И. Успехи химии, 2024, **93**, RCR5131.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 24-23-00062.

ТРАНСФЕРНОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ УСКОРЕНИЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ДИНАМИКИ СЛОЖНЫХ АНСАМБЛЕЙ АТОМОВ

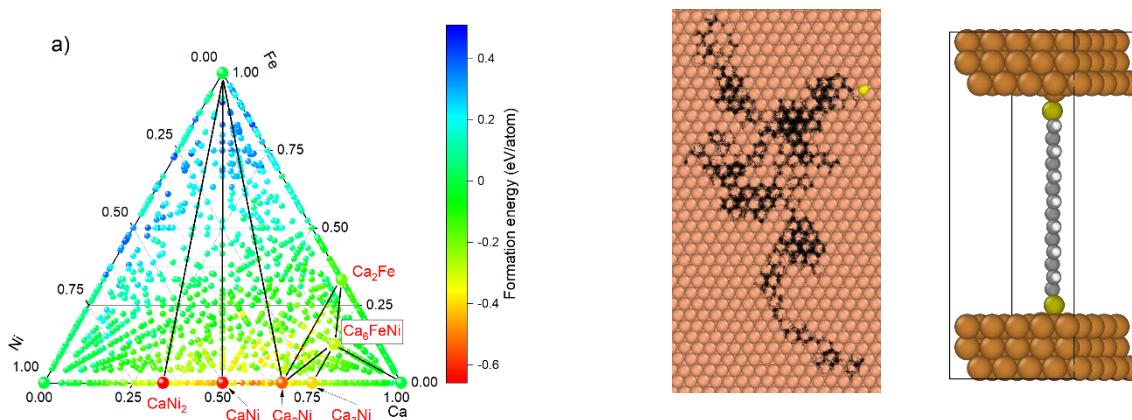
**Щелкачев Н.М.^а, Магницкая М.В.^а
Рыльцев Р.Е.^б, Успенский Ю.А.^с**

^аИнститут физики высоких давлений РАН, Москва 108840, Россия,

^бИнститут металлургии УрО РАН

^сФизический институт имени П.Н. Лебедева РАН

Межатомные потенциалы машинного обучения (МО) сегодня являются стандартным инструментом моделирования [1]. Хотя кажется, что универсальные графовые потенциалы, обученные на обширных квантово-химических данных, способны решить широкий круг задач, на практике возникает ряд ограничений: 1) их работа требует дорогих GPU, 2) моделирование систем крупнее 1000 атомов упирается в дефицит памяти и проблемы параллелизма, 3) скорость молекулярной динамики недостаточна, а масштаб в 1000 атомов мал для многих задач, 4) точность потенциалов может критически снижаться в многокомпонентных системах и при давлениях $P>0$. Решением является многоступенчатое трансферное обучение [2]: на первом этапе точные, но медленные графовые МО дообучаются на ограниченном наборе структур, пересчитанном *ab initio* и полученном «активным отбором». На их основе, под конкретную задачу, «трансферно создаются» более быстрые МО на основе полно связанных нейросетей. Данный подход на порядок сокращает объем тренировочных данных и позволяет эффективно адаптировать потенциалы МО для сложных систем, таких как многокомпонентные сплавы, материалы под высоким давлением или катализаторы. В качестве примера, на рисунке показаны найденные новые фазы Ca–Fe–Ni при давлении $P=100\text{ ГПа}$ и диффузионный путь конца молекулы, зажатой между двумя электродами, при $T=300\text{ К}$.



Литература

1. Jacobs R. et al., Current Opinion in Solid State and Materials Science, 2025, **35**, 101214.
2. Khazieva E.O., Chtchelkatchev N.M., Ryltsev R.E., J. Chem. Phys., 2024 **161**, 174101.

НЕИНВАЗИВНЫЙ СКРИНИНГ ОНКОЛОГИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЙ НА ОСНОВЕ ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКОГО МУЛЬТИСЕНСОРНОГО АНАЛИЗА МОЧИ В СОЧЕТАНИИ С МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Юськина Е.А., Кирсанов Д.О.

*Санкт-Петербургский государственный университет,
198504, Санкт-Петербург, Университетский проспект 26*

В настоящее время ведутся активные разработки, направленные на создание неинвазивных методов скрининга онкологических заболеваний. Химический состав биожидкостей (крови, мочи, слюны) может существенно отличаться у пациентов с диагностированным заболеванием и здоровых людей. Для анализа биожидкостей и выявления заболеваний используются различные аналитические методы, включая рамановскую спектроскопию, флуориметрию, импедансную спектроскопию, газовую хроматографию с масс-спектрометрическим детектированием и т.д.. Перспективным направлением является создание простых и недорогих сенсорных устройств для скрининга заболеваний.

Настоящее исследование направлено на разработку методики экспресс-скрининга рака почки и предстательной железы, основанной на применении потенциометрической мультисенсорной системы и алгоритмов машинного обучения. Были проведены потенциометрические измерения в образцах мочи от пациентов с подтвержденным раком почки (38 образцов), пациентов с подтверждённым раком простаты (39 образцов) и здоровых добровольцев (39 образцов). Регистрируемые отклики сенсоров, зависящие от общего ионного состава мочи, служат исходными данными для последующего анализа.

Результаты потенциометрических измерений были использованы в качестве входных данных для различных методов визуализации данных (PCA, UMAP) и классификации (логистическая регрессия (LR), метод случайного леса (RF), классификатор с экстремальным градиентным усилением (XGBC), метод опорных векторов (SVM), метод k ближайших соседей (kNN)). Модель SVM продемонстрировала точность 77% в дифференциации образцов мочи пациентов с раком почки от контрольной группы и 79% - для рака предстательной железы. Классификатор RF показал более высокую точность (87%) при различении образцов между двумя типами рака, что представляет определенный интерес для ранней скрининговой диагностики.



ПОСТЕРНЫЕ ДОКЛАДЫ

QSPR МОДЕЛЬ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОНОДОНОРНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ ЛИГАНДОВ К КАТИОНУ УРАНИЛА

Абдульмянов А.Р.

*Самарский университет,
443086, г. Самара, Московское шоссе, д. 34*

Правило 18 электронов – эффективный способ предсказания состава продуктов, кристаллизующихся из сложных водно-солевых систем, содержащих катионы f-металлов и различные лиганда [1]. С его позиций электронодонорную способность лиганда можно выразить через величину телесного угла граней полиэдра Вороного-Дирихле (**ПВД**), являющихся общими для атомов донора и комплексообразователя. Существенной особенностью метода является необходимость предварительного кристаллохимического анализа полученных ранее экспериментальных данных для оценки донорности каждого лиганда.

В данной работе получена **QSPR** модель на атом-центрированных фрагментах, позволяющая прогнозировать значение телесного угла грани **ПВД** донорного атома органического лиганда с атомом U(VI) с использованием информации о связности молекулы. Эта величина может быть применена для оценки электронодонорной способности в рамках правила 18 электронов.

Данные о структуре комплексов уранила были взяты из Кембриджского банка структурных данных [2]. Расчет характеристик **ПВД** и получение молекул лигандов в виде массива несвязных подграфов проводили в *Rymatgen* [3]. Таргетным свойством стало значение телесного угла общей грани **ПВД**, выраженное в процентах от 4π стерадиан. Набор в формате *sdf*, содержащий геометрию и свойства лигандов, собран в *RDKit* [4]. Для учета локального окружения расчет фрагментных дескрипторов в виде атомных последовательностей начинался от донорного атома (в программе *ISIDA-QSPR* [5]). Для обучения модели использовано 29 последовательностей, состоящих из 2-6 атомов неметаллов.

QSPR модель была обучена на 566 лигандах методом линейной регрессии с коэффициентом детерминации $R^2 = 77\%$. Средняя абсолютная ошибка **МАЕ** на тестовой выборке составила 1,4% от 4π стерадиан.

Литература

1. Serezhkin, V.N., Medrish, I.V. & Serezhkina, L.B. Russ J Coord Chem. 2008. V34, 146–155
2. Allen F.H. Acta Cryst. 2002. V. B58. Part 3. 380–388.
3. Shyue Ping Ong, William Davidson Richards, Anubhav Jain, Geoffroy Hautier, Michael Kocher, Shreyas Cholia, Dan Gunter, Vincent Chevrier, Kristin A.Persson, Gerbrand Ceder. Computational Materials Science. 2013. V68. 314–319.
4. Greg Landrum, Paolo Tosco, Brian Kelley, Ricardo Rodriguez, David Cosgrove, Riccardo Vianello, и др. rdkit/rdkit: 2025_09_1 (Q3 2025) Release. Zenodo; 2025.
5. Solov'ev V., Varnek A. A. John Wiley & Sons. 2017. 488.

БАЗА ДАННЫХ АЗОМЕТИНОВ С НЕБЕНЗОИДНЫМИ СИСТЕМАМИ ДЛЯ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

**Акентьева Т.А., Чащин А.Н.,
Жакова С.Н., Мудрых Н.М.**

*ФГБОУ ВО «Пермский Государственный Аграрно-технологический университет имени академика Д.Н. Прянишникова».
614990, Пермь, ул. Петропавловская, 23*

Развитие методов искусственного интеллекта, в частности машинного обучения, открывает новые возможности в области химии¹, требуя формирования массивов верифицированных данных. В работе представлена база данных соединений с небензойдными ароматическими системами², содержащая структурные формулы, физико-химические константы, спектральные характеристики (ЯМР¹H, хромато-масс, ИК), элементный анализ, РСА и биологическую активность. Интерфейс реализован на JavaScript и доступен по адресу: <http://azomethines.na4u.ru>. Перспективы исследований связаны с созданием на основе базы данных датасета для машинного обучения. Особые надежды возлагаются на РСА, который закладывает основу для анализа больших массивов данных и установления корреляций между структурой небензойдных систем и свойствами молекул, а так же прогнозирования их реакционной способности и возможных продуктов реакций.

Рис. 1. Общий вид интерфейса базы данных

Литература

1. Zhenqin Wu, et al. MoleculeNet: a benchmark for molecular machine learning. *Chemical Science*, 2018, **9**, 513.
2. Акентьева Т.А., Махмудов Р.Р. Журнал общей химии, 2017, **87**, 1204.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 1023051000003-9-4.1.1).

ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ СТРАТЕГИЯ СИНТЕЗА ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОТИОФЕНА

Андреев Д.М.^{1,2}, Шлапаков Н.С.²,
Анаников В.П.²

¹ Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова,
 119991, Москва, ул. Ленинские горы, 1, стр. 3

² Институт Органической Химии им. Н. Д. Зелинского,
 119991, Москва, Ленинский проспект, 47

В настоящее время производные бензотиофена пользуются высоким спросом в качестве лекарственных препаратов, полупроводников, пигментов и красителей [1]. Однако большинство известных методик синтеза бензотиофена и его производных осложнены множеством проблем: низкие выходы продуктов реакций, необходимые дорогостоящие металл-содержащие катализаторы для осуществления превращений, жесткие условия проведения синтезов и пр. [2].

Нами разрабатывается новый способ получения производных бензотиофена из соответствующих тиофенолсукинимидов и алкинов при помощи фотокатализа (схема 1). Преимущество данной работы в том, что, помимо устранения вышеперечисленных трудностей, удается решить проблему синтеза 2,3-дизамещенных производных бензотиофена, содержащих электронодонорные группы.

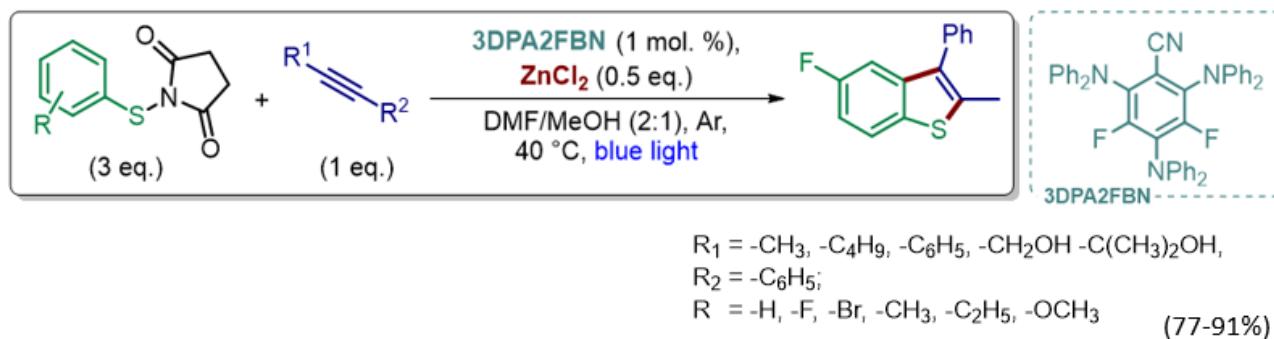


Схема 1. Реакция получения производных бензотиофена

Литература

- Z. Qin, I. Kastrati, R. E. P. Chandrasena, H. Liu, P. Yao, P. A. Petukhov, J. L. Bolton and G. R. J. Thatcher, *Med. Chem.*, **2007**, 50, 2682.
- M. Kuhn, F. C. Falk, J. Paradies, *Org. Lett.*, **2011**, 13, 4100-4103.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ: ИНТЕГРАЦИЯ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ И ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

**Ануфриева Д.^а, Абруков В.^а, Левченко С.В.^б,
Саперов Д.^а, Зарипов Р.^б**

^а*Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова,
428015, Чебоксары, Россия*

^б*Сколковский институт науки и технологий, Инновационный Центр «Сколково»,
121205, Москва, Россия*

Разработан подход к созданию нейросетевых многофакторных моделей для прогнозирования скорости детонации и чувствительности высокогенергетических материалов. Метод решает как прямую задачу (определение скорости детонации по молекулярной структуре), так и обратную (проектирование молекулы с заданной скоростью детонации).

Для репрезентативного набора молекул ВЭМ методами DFT (r2SCAN-3c, ORCA) рассчитан набор квантово-химических дескрипторов, включающий энергетические, электронные и структурные параметры.

Применен новый метод последовательных нейросетевых приближений [1].

Модель продемонстрировала высокую точность: при прогнозировании скорости детонации ошибка уменьшена за счет последовательного применения нейронных сетей примерно в 100 раз (RMSE снижен с 5.8×10^{-3} до 4.2×10^{-5}). Для обратной задачи достигнута сравнимая точность прогнозирования структурных параметров по заданной скорости детонации.

Разработанный подход открывает новые возможности для ускоренного компьютерного дизайна высокогенергетических материалов с целевыми свойствами.

Литература

1. Darya Anufrieva, Victor Abrukov, Vladica Bozic, Daniil Sapyorov. Determination of Combustion Law Parameters from Noisy Experimental Data Using a Novel Sequential Neural Network Approach. XVI International Symposium on “Combustion and Plasma Chemistry. Physics and Chemistry of Carbon and Nanoenergetic Materials”: / Book of abstracts of International Symposium / Institute of Combustion Problems – Almaty, 2025, pp. 33-36.

СОЗДАНИЕ «ИДЕАЛЬНОГО» ЭКСПЕРИМЕНТА С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА НЕЙРОСЕТЕВЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ.

Ануфриева П.¹, Саперов Д.²

¹ НИЯУ МИФИ, Москва, 11540, Россия

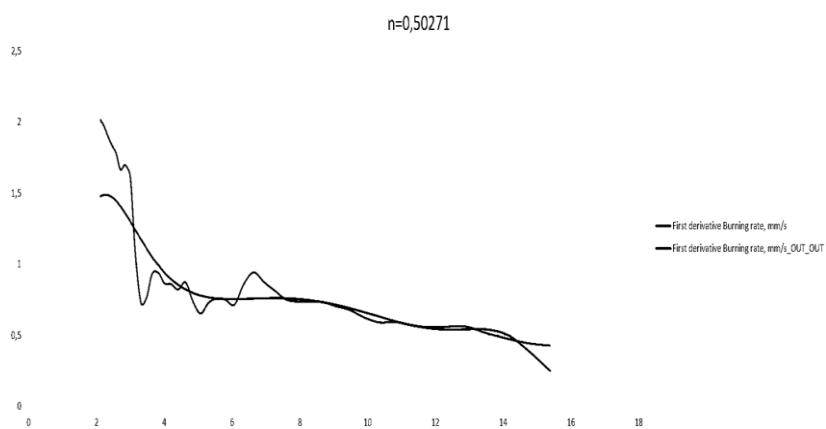
² Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова, Чебоксары 428015, Россия

Реальные экспериментальные данные практически всегда отягощены случайными ошибками измерений. В работе представлен метод нейросетевых последовательных приближений (НПП), который позволяет нивелировать случайные ошибки измерений и получить «идеальные экспериментальные данные» («идеальный эксперимент»). Суть метода следующая.

Используются три последовательные нейронные сети (НС1, НС2, НС3). Первая нейронная сеть обучается на реальных зашумленных данных, вторая и третья - обучаются на выходных данных предыдущих сетей:

Реальные зашумлённые экспериментальные данные → [НС 1] → Сглаженные данные НС 1 → [НС 2] → Сглаженные данные НС 2 → [НС 3] → «Идеальные экспериментальные данные»

В качестве примера применения данного метода приведены результаты определения первой производной закона горения для твердых топлив (зависимость скорости горения i от давления P). На рисунке приведены графики первой производной $i(P)$ по давлению для реальных зашумленных данных, полученных непосредственно из экспериментов (синий график), и для «идеальных экспериментальных данных», полученных с помощью предложенного авторами метода НПП (красный график).



Из рисунка видно, что метод НПП эффективно сглаживает случайные ошибки измерений.

Метод может быть применен для любых экспериментальных данных отягощенных случайными ошибками. Это особенно важно в случаях, когда первая производная от целевой функции является важной для анализа процесса.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕШЕТОЧНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ЭЛЕКТРОН-ФОНОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В МУАРОВЫХ РЕШЕТКАХ

Арабов Р.И.^а, Рыбин Н.Е.^{а,б}, Демин В.А.^в,
Половинкин М.С.^а, Квашнин А.Г.^а, Чернозатонский Л.А.^в,
Шапеев А.В.^{а,б}

^а*Сколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, территория инновационного центра “Сколково”, Большой бульвар, д. 30, стр. 1*

^б*ООО «Цифровые Материалы», 143085, Московская область, Г.О. Одинцовский, РП Заречье, ул. Медовая, д.3*

^в*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, 119334, Москва, ул. Косыгина, д. 4*

В данной работе было исследовано влияние угла поворота слоев θ в муаровых решетках гидрированных нитрида бора и графена на фононную теплопроводность и величину запрещенной зоны. Для расчета энергий и сил межатомных взаимодействий использовались машинно-обучаемые потенциалы МТР. В муаровых решетках наблюдалось значительное уменьшение теплопроводности с увеличением угла поворота слоев (см. рис. 1). Также поворот слоев приводил к изменению величины запрещенной зоны. Было также показано, что величины запрещенных зон муаровых решеток, вычисленные при $T = 0$ К с учетом нулевых колебаний ядер, значительно отличаются от величин, полученных при рассмотрении ядер как классических (неподвижных при 0 К) частиц (см. табл. 1).

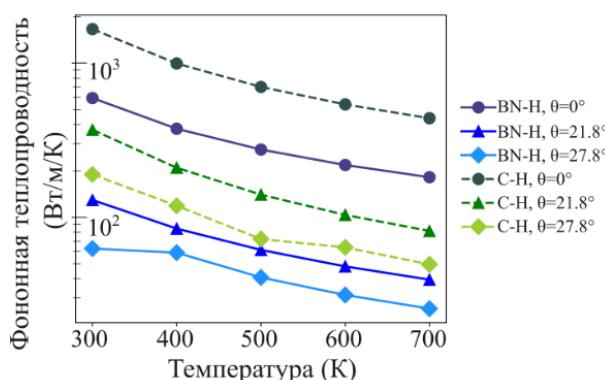


Рисунок 1. Зависимости теплопроводности муаровых решеток гидрированного графена (C-H) и нитрида бора (BN-H) при углах поворота слоев 0°, 21.8°, 27.8°

Таблица 1. Разница между величинами запрещенной зоны (Δ) при $T = 0$ К, рассчитанными для муаровых решеток с неподвижными ядрами и с учетом нулевых колебаний ядер.

Материал	C-H, $\theta = 0^\circ$	C-H, $\theta = 21.8^\circ$	C-H, $\theta = 27.8^\circ$	BN-H, $\theta = 0^\circ$	BN-H, $\theta = 21.8^\circ$	BN-H, $\theta = 27.8^\circ$
Δ , эВ	0.39	0.47	0.51	0.22	0.66	0.51

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-13-00332.

ПРОГРАММА ДЛЯ ОЦЕНКИ СИНЕРГИЗМА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ КОМПОЗИЦИЙ ПАВ

Баландинский Д.А., Черемисина О.В.

Санкт-Петербургский горный университет императрицы Екатерины II, 199106,
Санкт-Петербург, 21-я линия В.О., д. 2, Санкт-Петербург

Оценка синергизма действия в многокомпонентных композициях ПАВ имеет важное практическое значение во многих горно-обогатительных и химико-биологических процессах^{1,2}.

Классическим способом оценки синергетических эффектов в сложных системах с участием поверхностно-активных веществ служит подход Рубена-Розена, заключающийся в решении нелинейных систем уравнений, заданных в неявном виде на основании изотерм поверхностного натяжения.

Для упрощения обработки экспериментальных данных и автоматизации вычислительных процессов был написан программный софт³, позволяющий вычислять: значения ККМ, реальные мольные доли компонентов в моно-слое, коэффициенты активности и параметр межмолекулярного взаимодействия.

Результаты работы программы представлены на рисунке 1.

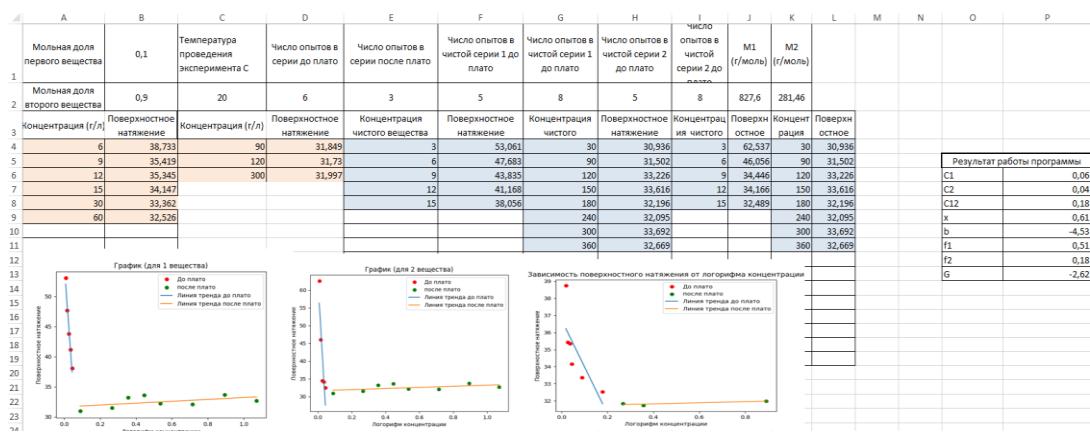


Рисунок 1 – результаты оценки действия многокомпонентной композиции ПАВ с использованием авторского программного обеспечения

Литература

1. Pandey M.M., Raza M.Q. *Synergistic effect of binary surfactant mixture for enhanced boiling heat transfer*, 2025, Journal of Molecular Liquids, 430, 127813.
 2. Shah S.K., Chakraborty G. *Synergistic and antagonistic effects in micellization of mixed surfactants*, 2022, Journal of Molecular Liquids, 368, 120678.
 3. Черемисина О.В., Баландинский Д.А., Лысенко М.Р. Программа для расчета смешанных мицелл поверхностно-активных веществ. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2025616139.

СИНТЕЗ И АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ СИММЕТРИЧНЫХ 1,3-БИС(ПОЛИФТОРФЕНИЛ)МОЧЕВИН

**Барановский А.Д., Щегольков Е.В.,
Бургарт Я.В., Салоутин В.И.**

*Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского УрО РАН,
Российская Федерация, 620066, Екатеринбург, С. Ковалевской, 22*

Нами предложен удобный метод синтеза симметричных 1,3-бис(полифторфенил)мочевин на основе однореакторного взаимодействия хлорангидридов полифторбензойных кислот с азидом натрия и последующей перегруппировки Курцуиса (Схема 1).¹

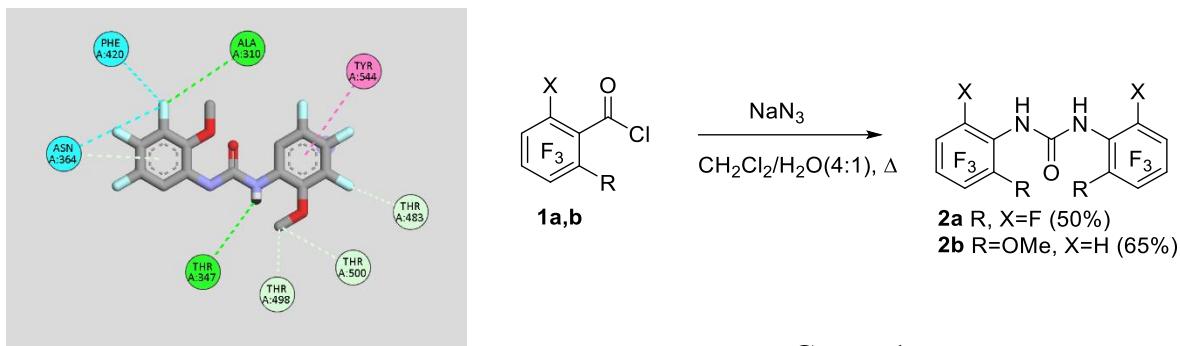


Рис. 1. Взаимодействие
лиганд **2b** – рецептор (PBP2,
PBD ID: 6XQV):

Схема 1

Показано, что соединение **2b** обладает умеренным антимикотическим эффектом, а также проявляет высокую антигонорейную активность (МИК 1.9 мкг/мл), превышающую действие спектиномицина в 8 раз.

Бактерицидная активность многих антибиотиков связана с ингибиением синтеза клеточной мембрany бактерий за счет связывания с пептидогликант-транспептидазами (PBP2). В связи с этим был проведен молекулярный докинг соединения **2b** в активный сайт белка PBP2 (рис. 1). Обнаружено, что это соединение проявляет сродство (-7.884 ккал/моль) к данному белку на уровне цефтриаксона (-8.562 ккал/моль).

С использованием веб-интерфейса SwissADME (<http://swissadme.ch>)³ проведена оценка физико-химических параметров, липофильности и сходства с лекарственными препаратами («druglikeness») для синтезированных бис-полифторарилмочевин **2a,b**.

Литература

1. А. Д. Барановский, Е. В. Щегольков, Я. В. Бургарт, Н. А. Герасимова, Н. П. Евстигнеева, В. И. Салоутин. // Доклады РАН. Химия, науки о материалах, 2025. **523**, С. 11.
2. Zhao S., Duncan M., Tomberg J., Davies C., Unemo M., Nicholas R.A. // Antimicrob. Agents Chemother. 2009. **53**, Р. 3744.
3. Daina A., Michelin O., Zoete V. // Sci. Rep. 2017. **7**. Р. 42717.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 24-23-00062.

ВЕРИФИКАЦИЯ ЛЕКАРСТВ С ПОМОЩЬЮ QCM: КОГДА МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОЧНО ПРЕДСКАЗАЛО АФФИННОСТЬ СВЯЗЫВАНИЯ С БЕЛКОМ

**Волкова О.О., Серова А.А., Москаленко И.В.,
Кравцов В.Ю., Скорб Е.В., Смирнов Е.А.**

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

РНК-связывающие белки (RBP) играют ключевую роль на всех этапах жизненного цикла РНК,^{1,2} а их дисфункция связана с развитием различных заболеваний, включая рак. Гетерогенный ядерный рибонуклеопротеин A2/B1 (hnRNPA2B1)³ является одним из RBPs и участвует во всем жизненном цикле РНК, и следовательно, в поддержании стабильности клетки. Высокая биологическая активность белка hnRNPA2B1 делает его перспективной мишенью для разработки лекарственных противораковых препаратов.

В данном исследовании методом молекулярного докинга и молекулярной динамики была смоделирована прямая связь между белком hnRNPA2B1 и двумя противораковыми соединениями - камптотецином и его производным иринотеканом. Компьютерное моделирование показало, что оба лиганда стабильно связываются в мотиве распознавания РНК. Для экспериментальной верификации результатов моделирования был использован метод кварцевых микровесов (Quartz Crystal Microbalance, QCM). Проведенный анализ количественно подтвердил факт связывания и позволил охарактеризовать кинетику взаимодействия, демонстрируя хорошую корреляцию с результатами моделирования.

Впервые продемонстрировано прямое взаимодействие камптотецина и иринотекана с RRM-доменом белка hnRNPA2B1. Полученные данные, согласованные между вычислительными и экспериментальными методами, указывают на новый потенциальный механизм биологической активности этих соединений, не связанный с ингибированием топоизомеразы I. Результаты работы открывают перспективы для направленного дизайна малых молекул, нацеленных на белок hnRNPA2B1, для терапии онкологических и нейродегенеративных заболеваний.

Литература

1. Gebauer F. и др. RNA-binding proteins in human genetic disease // Nat Rev Genet. Springer Science and Business Media LLC, 2020, **22**, 185–198.
2. He S. и др. The nexus between RNA-binding proteins and their effectors // Nat Rev Genet. Springer Science and Business Media LLC, 2022, **24**, 276–294.
3. Wu B. и др. Molecular basis for the specific and multivariant recognitions of RNA substrates by human hnRNP A2/B1 // Nat Commun. Springer Science and Business Media LLC, 2018, **9**.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ) (22-65-00022)

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ЛИНЕЙНОГО УМЕНЬШЕНИЯ РАЗМЕРНОСТИ ДАННЫХ ДЛЯ АНАЛИЗА РАМАНОВСКИХ СПЕКТРОВ МНОГОФАЗНЫХ КЕРАМИК

**Володина Н.О.,^а Шлимас Д.И.,^а
Шакирзянов Р.И.,^а Козловский А.Л.^б**

^а*Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева,
010008, Казахстан, Астана, ул. Сатпаева, 2*

^б*Институт ядерной физики,
010000, Казахстан, Астана, проспект Абылай Хана, 2/1*

Методы линейного уменьшения размерности данных представляют собой эффективный инструмент обработки спектроскопической информации. Они позволяют выявлять скрытые зависимости, которые могут быть неочевидны при обычном визуальном анализе спектров.

Одним из наиболее распространенных подходов является метод главных компонент (Principal Component Analysis, PCA). Этот метод широко применяется при работе с рамановскими спектрами, так как он позволяет выделить компоненты, отвечающие за наибольшие вариации данных, и наглядно продемонстрировать различия между образцами.

Особый интерес представляет метод факторизации неотрицательных матриц (Nonnegative Matrix Factorization, NMF). Важное преимущество NMF по сравнению с PCA заключается в том, что разложение производится только на неотрицательные компоненты, что физически соответствует природе рамановских спектров, представляющих собой сумму сигналов от отдельных фаз или соединений. Использование NMF позволяет разложить сложные многокомпонентные спектры на отдельные составляющие и более надежно выделять моды разных фаз.

В данной работе методы PCA и NMF были применены к рамановским спектрам многофазных керамик системы CeO₂-ZrO₂. Благодаря методу PCA удалось лучше проследить изменения в спектрах при увеличении концентрации допанта. Метод NMF обеспечил разложение спектров многофазных образцов на вклад отдельных фазовых компонент.

Данное исследование финансировалось Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (No. AP26103789).

НОВЫЕ САМОВОССТАНАВЛИВАЮЩИЕСЯ ПОЛИУРЕТАНЫ НА ОСНОВЕ ВОЗОБНОВЛЯЕМОГО СЫРЬЯ

**Волошин В.М.^{1,2}, Галкин К.И.^{1,2},
Анаников В.П.¹**

¹ИОХ РАН им. Н.Д.Зелинского, 119991, г. Москва, пр-кт Ленинский, д.47

²Московский политех, 107023, г. Москва, ул. Большая Семёновская д. 38

Перспективным направлением в создании самовосстановливающихся материалов является разработка полимеров с динамическими ковалентными связями, таких как системы на основе реакции Дильса–Альдера (ДА). [1] Использование данного подхода позволяет осуществлять многократное «заличивание» материала, например, простым термическим воздействием. Нами были успешно синтезированы новые динамические полиуретаны, содержащие фуран-малеимидные фрагменты, с использованием возобновляемого сырья (Схема 1). Основным отличием нашего подхода в сравнении с существующими аналогами является использование динамических аддуктов (DA adduct на схеме 1), полученных при реакции производных возобновляемого 5-гидроксиметилфурфуrola с N-(2-гидроксиэтил)малеимидом. Использование данных аддуктов позволяет осуществлять тонкий контроль степени сшивки в полученных полиуретанах путем варьирования молярного соотношения компонентов.

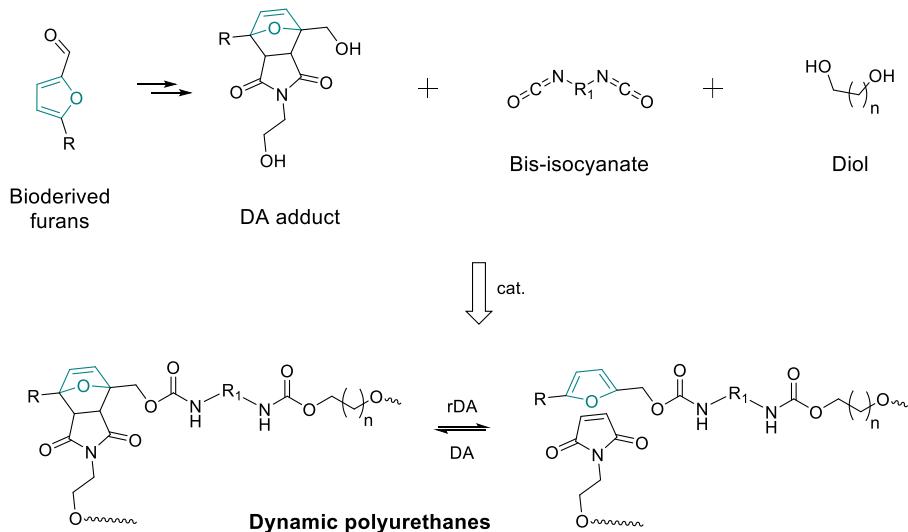


Схема 1. Общая схема получения динамических полиуретанов.

Полученные полимеры были охарактеризованы комплексом физико-химических методов, которые подтвердили их динамические свойства и высокие адгезионные характеристики. Сочетание этих свойств делает данные материалы перспективными для применения в качестве термочувствительных клеев, герметиков и адгезивов.

Литература

1. Y. Heo, Dr. H. A. Sodano, *Adv. Funct. Mater.*, 24, 5261-5268. DOI: 10.1002/adfm.201400299;

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект РНФ № 23-73-00003).

**ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ НЕЙРОСЕТЕВЫХ АЛГОРИТМОВ
В ИССЛЕДОВАНИИ ОБРАЗОВАНИЯ ВАКАНСИИ В ГИДРИДЕ
МАГНИЯ С ПРИМЕСЬЮ ЗАМЕЩЕНИЯ ХРОМА**

Врублевский Д.Б., Святкин Л.А.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
634050, Томск, проспект Ленина, 30*

Металлогидридные накопители водорода на основе MgH_2 оцениваются как перспективные в рамках развития водородной энергетики, но обладают такими недостатками, как высокие рабочие температуры и низкая кинетика сорбции, в свете чего представляет интерес изучение взаимодействия примесей Cr с дефектной структурой MgH_2 и их влияния на связь Mg–H.

В рамках теории функционала электронной плотности методом проекционных присоединенных плоских волн, реализованным в пакете ABINIT, был проведён расчёт энергий образования вакансии в суперячейке $3\times 3\times 3$ чистого α - MgH_2 и в присутствии примеси замещения Cr в неэквивалентных положениях P1–P3. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1. Расчёт энергий образования вакансий в структуре α - MgH_2

Энергия образования магниевой вакансии			Энергия образования магниевой вакансии в присутствии примеси Cr	
Система	δE_{vac} , эВ		Система	$\delta E_{sub(Cr)+vac}$, эВ
$Mg_{53}H_{108}-vac$	Эта работа	DFT ¹	$Mg_{52}H_{108}Cr^{P1}-vac$	3,52
			$Mg_{52}H_{108}Cr^{P2}-vac$	2,53
	6,65	6,54	$Mg_{52}H_{108}Cr^{P3}-vac$	1,85

Внедрение примеси замещения Cr в решётку приводит к снижению энергии, требуемой для образования вакансии, причём наблюдается зависимость этой энергии в присутствии примеси Cr от расстояния между атомом Cr и центром образования вакансии в структуре гидрида магния. Дальнейшее исследование этой зависимости требует увеличения размеров суперячейки для предотвращения влияния размерностных эффектов, что сопряжено с высокими требованиями к вычислительным ресурсам. Решением этой проблемы может выступить применение пакетов для моделирования атомных структур на основе машинного обучения².

Литература

1. Gaztañaga F., Luna C., Sandoval M. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2016, **120**, 774.
2. Wang H., Zhang L., Han J. *Computer Physics Communications*, 2018, **228**, 178

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-79-10009

СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ПРОГРАММ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ДЛЯ НЕЦЕЛЕВОГО УВЭЖХ-МСВР АНАЛИЗА МОЧИ ПАЦИЕНТОВ С ОНКОЛОГИЕЙ И ЗДОРОВЫХ ДОБРОВОЛЬЦЕВ

**Гашимова Э.М.,^а Малицкая Т.Ю.,^а Темердашев А.З.,^а Порханов В.А.,⁶
Поляков И.С.,⁶
Перунов Д.В.,⁶ Подживотов А.С.^а**

^а ФГБОУ ВО Кубанский государственный университет,
350040, Краснодар, Ставропольская 149,

⁶ Научно-исследовательский институт - Краевая клиническая больница № 1
им. С. В. Очаповского, 350901, Краснодар, Первого мая 167

Нецелевая метаболомика - незаменимый инструмент для комплексного исследования состава биологических жидкостей, что особенно актуально при поиске потенциальных биомаркеров различных заболеваний с последующей разработкой новых диагностических подходов и развития персонализированной медицины. Ультра высокоеффективная жидкостная хроматография в сочетании с масс-спектрометрией высокого разрешения (УВЭЖХ-МСВР) позволяет одновременно обнаруживать широкий спектр метаболитов в низких концентрационных диапазонах, что обуславливает широкую применимость данного подхода для нецелевого анализа.

Результат нецелевого УВЭЖХ-МСВР анализа - сложный многомерный набор данных, которые практически невозможно анализировать вручную. Для этих целей доступно множество программных инструментов для обработки данных, как широко известных, так и инновационных, таких как Peakonly и EVA, основанных на современных подходах с применением методов глубокого обучения для обнаружения и интеграции хроматографических пиков.

Настоящая работа посвящена исследованию возможностей различных программ для предварительной обработки данных на примере данных нецелевого анализа мочи с целью выявления онкологических биомаркеров.

Первичные данные УВЭЖХ-МСВР анализа мочи 40 онкологических больных и 40 здоровых добровольцев были предварительно обработаны с использованием, как стандартных программ MZmine, XCMS, MS-DIAL, iMet-Q, так и программой Peakonly. Оценены перспективы использования программы Paramounter для определения оптимальных параметров программ XCMS, MZmine и MS-DIAL. Программы сравнивались на основе качества интеграции пиков, выбора признаков при нецелевом анализе с применением случайного леса, точности моделей логистической регрессии, созданных с использованием выявленных признаков и статистического анализа некоторых известных метаболитов

ИСКУСТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В МАСС-СПЕКТРАЛЬНОМ АНАЛИЗЕ: ПРЕДСКАЗАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

**Голов И.В., Шнайдер М.Ю., Холманских Д.Д.,
Романов К.Я., Перекина Е.А., Лукин Р.Ю., Николенко С.А.**

*Научно-исследовательский центр в области искусственного интеллекта,
Университет Иннополис, ул. Университетская, д. 1, Иннополис, 420500*

Тандемная масс-спектрометрия (MC/MS) является одним из наиболее точных методов идентификации молекулярных структур. Однако существующие подходы анализа спектрограмм опираются на использование референсных библиотек, что обеспечивает высокую точность лишь в пределах известных соединений. Вследствие этого подавляющая часть химического пространства — так называемая «химическая темная материя» — остается неаннотированной, что существенно замедляет прогресс в естественных науках.¹

Современные модели искусственного интеллекта (ИИ) открывают возможность преодолеть эти ограничения за счет *de novo* предсказания молекулярных структур непосредственно по спектральным данным, выходящим за рамки обучающих наборов.

В данной работе проведено тестирование state-of-the-art моделей *de novo* генерации на реальных экспериментальных данных с целью объективной оценки их производительности и выявления путей повышения точности аннотации масс-спектров. Результаты показывают, что наиболее успешные решения, такие как DiffMS, достигают высокой эффективности благодаря интеграции химических ограничений и прямой генерации молекулярных графов.² Это демонстрирует перспективность генеративных фреймворков с ограничениями как принципиально нового подхода к исследованию химического пространства и ускорению научных открытий.

Литература

1. Da Silva R.R., Dorrestein P.C., Quinn R.A. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2015, **112**, 12549–12550.
2. Bohde M., Manjrekar M., Wang R., Ji S., Coley C.W. *Forty-second International Conference on Machine Learning*, 2025, Vancouver, Постер.

Работа выполнена при поддержке Министерства экономического развития Российской Федерации (соглашение № 139-10-2025-034 от 19.06.2025 г.).

СПОСОБ ОЦЕНКИ СИНТЕТИЧЕСКОЙ ДОСТУПНОСТИ С ПОМОЩЬЮ ИНСТРУМЕНТА AiZYNTHFINDER

**Голубев А.А.^{a,b} Магеррамов Э.А.^b,
Долганов А.Ю.^a**

^a Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620062, Екатеринбург, ул. Мира, 19

^b АО «БИОКАД», 198515, г. Санкт-Петербург, п. Стрельна, ул. Связи., 34

Одним из ключевых направлений использования машинного обучения и искусственного интеллекта в химии является планирование синтеза¹. Для решения данной задачи отлично себя зарекомендовал open-source инструмент AiZynthFinder, строящий схемы синтеза с помощью алгоритма Monte Carlo Tree Search и нейросетевых моделей².

В рамках данной работы было проведено масштабное исследование влияния гиперпараметров AiZynthFinder на результаты ретросинтетического анализа. Впервые было показано, что одним из ключевых таких параметров являются стоки – наборы соединений, использующиеся алгоритмом в качестве строительных блоков при построении схем синтеза. Так, при использовании различных комбинаций стоков удалось увеличить долю решенных инструментом молекул с 42 до 85% (рис. 1), а также снизить среднее число стадий в схемах с 10 до 4.



Рисунок 1. Зависимость доли решенных молекул от используемых стоков.

На основании данного исследования был предложен простой и интерпретируемый метод оценки синтетической доступности молекул с помощью инструмента AiZynthFinder. Молекулы тестируются при использовании трех комбинаций стоков с различным наполнением, затем каждой молекуле присваивается synthetic score, равный количеству комбинаций стоков, для которых найдены схемы синтеза (чем выше synthetic score, тем проще молекула). Данный подход вместе с другими расчетными параметрами позволяет эффективно отбирать наиболее перспективные соединения на ранних этапах разработки лекарств.

Литература

1. Mroz A. M., et al. *Chem. Soc. Rev.*, 2025, **54**, 5433-5469.
2. Saigiridharan L., et al. *J Cheminform*, 2024, **16**, 57.

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ ПОИСК ИОНОВ В МАСС-СПЕКТРАХ РЕАКЦИЙ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ

**Гуревич П.Е., Бойко Д.А.,
Бурыкина Ю.В., Анаников В.П.**

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

Масс-спектрометрия — один из наиболее распространённых методов анализа сложных химических систем. В частности, она активно применяется в металлоорганической химии и катализе для изучения комплексов переходных металлов, образующихся в изучаемом катализитическом цикле. Однако, большой объём масс-спектрометрических данных делает ручную расшифровку спектров сложным и трудозатратным процессом, а полный анализ и вовсе практически невозможным.

Классический цикл реакций кросс-сочетания состоит из трёх основных этапов: окислительное присоединение, переметаллирование и восстановительное элиминирование. Данные этапы протекают очень похоже в разных реакциях кросс-сочетания; различия преимущественно определяются катализатором и реагирующими с ним функциональными группами реагентов. Таким образом, возможно задать общий вид этих этапов при помощи правил, используя SMARTS (SMILES arbitrary target specification) строки.

В данной работе был реализован алгоритм генерации ионов, образующихся в ходе заданной реакции кросс-сочетания, с последующим автоматическим обнаружением этих ионов в масс-спектре. Данный подход значительно ускоряет анализ реакций с помощью масс-спектрометрических данных и делает его доступным в том числе для непрофессионалов в области масс-спектрометрии. Более того, алгоритм может быть использован для обнаружения неизученных путей катализитических реакций. Алгоритм был реализован на языке программирования Python с использованием библиотек RDKit¹ и MEDUSA².

Литература

1. Landrum, G. *et al.* rdkit/rdkit: 2025_09_1 (Q3 2025) Release. <https://doi.org/10.5281/ZENODO.17232453> doi:10.5281/ZENODO.17232453.
2. Boiko, D. A., Kozlov, K. S., Burykina, J. V., Ilyushenkova, V. V. & Ananikov, V. P. Fully Automated Unconstrained Analysis of High-Resolution Mass Spectrometry Data with Machine Learning. *J Am Chem Soc* 144, 14590–14606 (2022).

РАЗРАБОТКА РЕТРОСИНТЕТИЧЕСКОГО ПО ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО ТЭО

**Данилов С.Е.¹, Ершов В.А.²,
Третьяков А.Р.³, Хоритоненко Е.И.⁴**

¹ СПбГУ,

²ООО «Микрофлюидика»,

³АО «Радиевый институт им. В.Г. Хлопина»,

⁴ООО «ЯНДЕКС.ДОСТАВКА ХОЛДИНГ»

Для нормального функционирования современной экономики страны необходимо около 60 000 химических веществ. Для рационализации импортозамещения необходимо принимать оптимальные инвестиционные решения. Наша команда разрабатывает модульную систему предварительного технико-экономического анализа инвестиционной привлекательности проектов для отбора наиболее перспективных проектов для дальнейшей проработки.

Ретросинтетический модуль разрабатывается на основании open source проекте SynPlanner с возможностью учёта опыта химика-разработчика [1]. Структура программы представлена на рисунке 1.

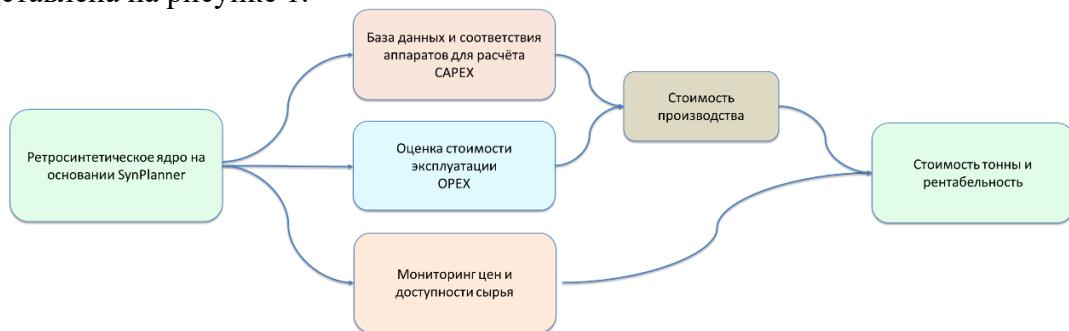


Рисунок 1. Основные модули программы.

Отработка ретросинтетического модуля проводилась на наборе 483 азокрасителей. Параметры аппаратов и стоимость сырья брались по рыночным данным. Результаты расчёта представлены на рисунке 2

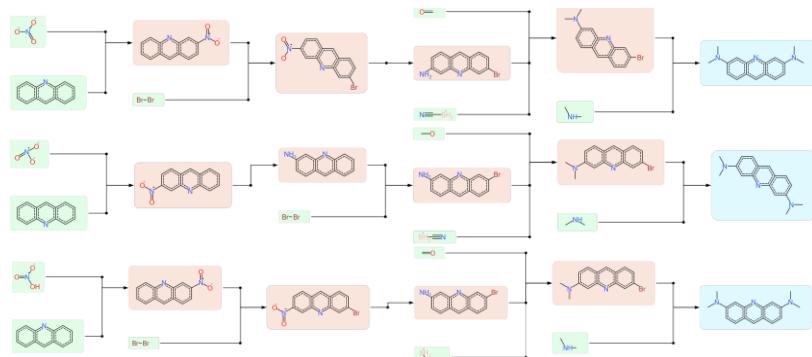


Рисунок 1. Варианты синтетических путей.

Литература

1. Sun Y., Sahinidis N. V. Computer-aided retrosynthetic design: fundamentals, tools, and outlook //Current Opinion in Chemical Engineering. – 2022. – Т. 35. – С. 100721.

СТРУКТУРНОЕ ПРОИСХОЖДЕНИЕ ТЕПЛОВОГО РАСШИРЕНИЯ В СОЕДИНЕНИЯХ Rb_2SO_4 И $\text{Rb}_2\text{Ca}_2(\text{SO}_4)_3$

**Демина С.В.^а, Шаблинский А.П.^а, Бирюков Я.П.^а,
Бубнова Р.С.^а, Филатов С.К.^б**

^а*Филиал НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ – ИХС,
Санкт-Петербург, наб. Макарова, 4*

^б*Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9*

Изучено термическое поведение сульфатов $\beta\text{-Rb}_2\text{SO}_4$, $\alpha\text{-Rb}_2\text{SO}_4$, $\text{Rb}_2\text{Ca}_2(\text{SO}_4)_3$ в широком интервале температур. $\beta\text{-Rb}_2(\text{SO}_4)$ кристаллизуется в пр. гр. $Pmcn$ ($a = 5.9834(1)$, $b = 10.4492(2)$, $c = 7.8292(2)$ Å) [1]. Изучено термическое расширение полиморфов в широком интервале температур -170 — 1000 °C [2]. Сульфат $\beta\text{-Rb}_2(\text{SO}_4)$ испытывает отрицательное термическое расширение от -170 до -130 °C. При температуре 675 °C низкотемпературная модификация $\beta\text{-Rb}_2(\text{SO}_4)$ переходит в высокотемпературную $\alpha\text{-Rb}_2(\text{SO}_4)$, который кристаллизуется в пр. гр. $P6_3/mmc$ ($a = 6.129(2)$, $c = 8.460(5)$ Å). Кристаллическая структура $\alpha\text{-Rb}_2\text{SO}_4$ уточнена методом Ритвельда [3] по порошковым данным при 700 и 1000 °C с целью выбора корректной структурной модели. Установлена структурная связь обратимого полиморфного превращения $\beta \leftrightarrow \alpha\text{-Rb}_2\text{SO}_4$, объясняющая природу анизотропии расширения Rb_2SO_4 .

Сульфат $\text{Rb}_2\text{Ca}_2(\text{SO}_4)_3$ кристаллизуется в с.т. лангбейнита $P2_13$, $a = 10.553(3)$ Å [4]. Результаты исследования термического расширения $\text{Rb}_2\text{Ca}_2(\text{SO}_4)_3$ показали отсутствие фазовых переходов в температурном интервале 25 — 900 °C. Рассмотрены кристаллохимические причины изменения шарнирных углов. Полученные результаты анализа механизмов теплового расширения могут быть полезны при разработке новых материалов с регулируемым расширением.

Литература

1. Weber H.J., Schulz M., Schmitz S., Granzin J., Siegert H. *J. Phys. Condens. Matter* 1, 1989, 8543–8547.
2. Шаблинский А.П., Демина С.В., Бубнова Р.С., Филатов С.К. *Литосфера*, 2024, **24**(2), 254-263.
3. Shablinskii A.P., Demina S.V., Biryukov Y.P., Bubnova R.S., Krzhizhanovskaya M.G., Filatov S.K. *Ceramics International*, 2025, *In press*.
4. Boujelben M., Toumi M., Mhiri T. *Acta Crystallogr*, 2007, **E63**, I157.

Работа выполнена при поддержке РНФ (№23-77-10066) и с использованием оборудования СПбГУ РЦ РДМИ.

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОБАВОК КАРБИДОВ И НИТРИДОВ НА МИКРОТВЕРДОСТЬ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА СИСТЕМЫ Вт6-Ni-Al С ПРИМЕНЕНИЕМ ПОДХОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Добрица И.И., Ерёмин С.А., Аникин В.Н.

Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Бакова Российской Академии Наук, 119334, Москва, Ленинский проспект 49

Работа посвящена исследования влияния добавок карбидов и нитридов на микротвердость композиционного материала на основе Вт6 [1], Ni, Al. Образцы были получены с методами порошковой металлургии и спекания в вакуумной печи. Основа идеи заключается в нагревании образцов в вакууме выше температуры плавления алюминия, который растекается по порам и приводит к образованию интерметаллидов. Внешний вид структуры экспериментального образца представлен на рисунке.

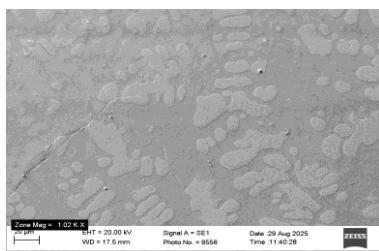


Рисунок 1. Внешний вид поверхности экспериментального образца

Сплав Вт6 изначально имеет сферическую форму, которая искажается после спекания, промежутки между частицами заполнены интерметаллидом с карбидами или нитридами.

На основе полученных результатов измерений микротвердости разработана база данных и получен датафрейм для обучения модели с применением алгоритмов машинного обучения. Построена модель с применением алгоритма случайного дерева решений позволяющая решать регрессионную задачу. В результате проведено моделирование значений микротвердости для концентраций добавок от 1-30 вес.% в зависимости от различных размеров порошков от 1 мкм до 50 мкм.

Литература

1. Maj Ł., Morgiel J., Mars K., Cios G., Tarasek A., Godlewska E.. *Materials Characterization*, 2019, **154**. 31-39. – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2019.05.040>.

Работа выполнена в рамках государственного задания № 075-00319-25-00.

ПРАКТИКА ВНЕДРЕНИЯ ИНДУСТРИАЛЬНЫХ ПРОЕКТОВ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЙ ПРОЦЕСС ПОДГОТОВКИ МАТЕРИАЛОВЕДОВ

Екимова Т.А.

*Петрозаводский государственный университет,
185910, Петрозаводск, пр. Ленина, 33*

Подготовка материаловедческих кадров в условиях повсеместного внедрения технологий искусственного интеллекта требует формирования принципиально новых междисциплинарных компетенций, обеспечивающих не только глубокое понимание физико-химических свойств материалов, но и навыки разработки и управления интеллектуальными системами. Следует учитывать и требования индустриальных партнеров к выпускникам, которые должны обладать не только актуальными знаниями и умениями, но иметь опыт практической работы под реальными производственными задачами. В таких условиях вузам необходимо принципиально менять подход к подготовке востребованных на рынке труда кадров. Ключевым элементом образовательного процесса становится работа над реальными кейсами от промышленных компаний. В области материаловедения при работе над такими проектами студенты учатся применять алгоритмы машинного обучения для анализа данных о свойствах материалов и прогнозирования дефектов. Это позволяет предприятиям получить готовые прототипы решений, а выпускникам — сформировать портфолио успешных кейсов для старта карьеры.

Успешным примером реализации такого подхода стало участие студентов Петрозаводского государственного университета в конкурсе Грантов Главы Республики Карелия. Целью конкурса является поддержка прикладных научных исследований и разработок студентов университета по тематикам, определенным индустриальными партнерами университета. В 2023–2024 гг. студентами ПетрГУ были выполнены три проекта в области материаловедения, направленных на решение прикладных задач: «Разработка системы поддержки принятия решений для предсказания механических свойств отливок из чугунов по данным о химическом составе», «Разработка системы машинного зрения для фиксации качества поверхности по результатам капиллярного контроля» и «Оптимизация состава полимерных смол, используемых в 3D печати». Все проекты выполнены с использованием комплексного подхода на стыке материаловедения и технологий машинного обучения. Результаты проектов внедрены не только в производственный процесс предприятий-заказчиков исследований, но и используются в учебном процессе для подготовки как специалистов в области материаловедения, так и информационных технологий.

ПАТТЕРНЫ – ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ КИРПИЧИКИ МЕЗО- И МАКРОСТРУКТУРЫ КОМПОЗИТОВ И ДРУГИХ СЛОЖНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Закиев С.Е., Джардимилиева Г.И.

*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики
и медицинской химии Российской академии наук,
142432, Черноголовка, пр. Семенова, 1*

Паттерн в теории нелинейных дифференциальных уравнений – это типичный вид небольшой области фазового портрета решения. Тем самым фазовый портрет можно разбить на одинаковые или, наоборот, постепенно меняющиеся паттерны, исходя из свойств уравнений, определяющих решение. Важно, что для создания довольно сложного «рисунка» паттерна требуется небольшое количество уравнений и входящих в них параметров. И следовательно, с помощью паттернов можно моделировать кинетику образования структур сложных материалов в рамках динамики решения выбранной системы уравнений.

В работе продемонстрированы возможности этой техники, как для описания эволюции сеточных структур, удобных для описания процессов полимеризации, так и различных зерновых структур. Предложены как требуемые уравнения, так и необходимая техника для их исследования. Важной особенностью здесь является допустимая с математической точки зрения многомасштабность подхода. В принципе этот язык претендует на универсальность для моделирования динамики различных процессов на мезоуровне. Несомненным достоинством подхода является континуальность уравнений моделей, способных напрямую зафиксировать причинно-следственную связь между используемыми параметрами и особенностями процессов образования рассматриваемых структур. Подход с использованием паттернов дифференциальных уравнений уже вошел в обиход физики неравновесных систем и теории их самоорганизации [1, 2]. Представляется, что математический аппарат паттернов – это эффективный подход к моделированию процессов получения сложных материалов, а также прогностических задач материаловедения, таких, например, как создание материалов с заданными свойствами.

Литература

1. Cross M., Greenside H. Pattern formation and dynamics in nonequilibrium systems. – N.Y.: Cambridge University Press, 2009. – 535p.
2. Desai R. C., Kapral R. Dynamics of self-organized and self-assembled structures– N.Y.: Cambridge University Press, 2009. – 344p.

Работа выполнена в рамках государственного задания (№ гос. регистрации 124020700089-3).

ПОТРЕБНОСТЬ В ЦИФРОВОМ ПОМОЩНИКЕ ДЛЯ ЛАБОРАТОРИИ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

Заправдина Д.М., Бурмистров В.В.

*Волгоградский государственный технический университет, пр. им. В.И. Ленина,
д. 28, г. Волгоград, 400005, Российская Федерация*

Химический склад любой лаборатории органической химии содержит большое количество разнообразных реагентов, число которых в некоторых случаях достигает тысяч или даже десятков тысяч. Обычно учет имеющихся реагентов ведется с помощью электронных таблиц, позволяющих осуществлять поиск по названию или другим заранее заданным параметрам. Однако с точки зрения химического анализа такая база данных зачастую оказывается недостаточно удобной.

В связи с этим возникает потребность в инструментах, способных анализировать базы данных о складских запасах лаборатории с учетом возможных химических превращений. Например, задачи, которые могла бы решать подобная система, включают:

1. Поиск соединений, содержащих заданные функциональные группы;
2. Планирование синтеза соединений с заданными функциональными группами — как в одну стадию из имеющихся на складе реагентов, так и в несколько стадий с предварительным преобразованием имеющихся реагентов в необходимые исходные соединения;
3. Рекомендации по приобретению реагентов, наличие которых может существенно расширить синтетические возможности лаборатории.

Так, при постановке задачи «синтез иминов в одну стадию» система анализирует базу данных, выявляет все карбонильные соединения и первичные амины, после чего формирует матрицу, содержащую все возможные продукты реакции, которые могут быть получены из имеющихся реагентов. Если же задача сформулирована как «синтез иминов в две стадии», то к уже имеющимся карбонильным соединениям и первичным аминам добавляются те соединения, которые могут быть синтезированы в одну стадию из других реагентов, присутствующих на складе.

Таким образом, предлагаемый подход позволит эффективнее использовать имеющиеся ресурсы лаборатории и расширить возможности синтеза за счет анализа больших объемов данных и планирования химических превращений.

РЕКОНСТРУКЦИЯ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ Тс–С С ПРИМЕНЕНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Зарипов Р.А.^а, Еремин Р.А.^б,
Хумонен И.С.^б, Кравцов А.В.^б, Кузнецов В.В.^{в, г}, Герман К.Е.^в,
Буденный С.А.^{б, д}, Левченко С.В.^а

^аСколковский институт науки и технологий, Москва
121205, Большой бульвар д. 30, стр. 1

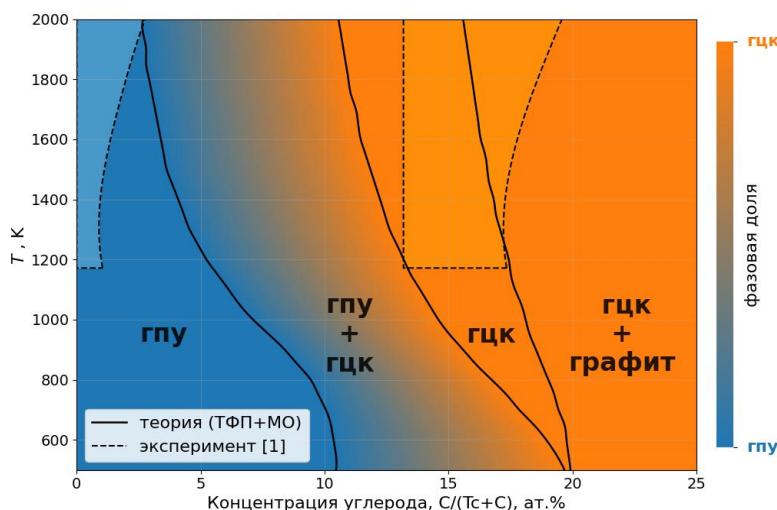
^бAIRI, Москва 123112, Пресненская набережная, д. 6, стр. 2

^вИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,
Москва 119071, Ленинский проспект, 31, корп. 4

^гРоссийский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
Москва 125047, Миусская площадь, д. 9, стр. 1

^дSber AI, Москва 121170, пр-кт Кутузовский, д. 32, к. 1

В работе представлен подход, объединяющий теорию функционала плотности (ТФП) и методы машинного обучения (МО) для исследования полного композиционно-конфигурационного пространства и построения фазовой диаграммы системы Тс–С. МО использовано для эффективного анализа множества конфигураций, соответствующих различным положениям атомов углерода в междуузлиях гпу и гцк решеток технеция. Это позволило определить наиболее энергетически стабильные структуры для каждого состава до 20 ат.% С, а также оценить вклады вибрационной свободной энергии и конфигурационной энтропии. На основе полученных данных построены области гомогенности и границы фазовой устойчивости в широком температурном диапазоне, результаты сопоставлены с экспериментальными данными [1].



Литература

1. В.Н. Еременко и др. Sov. Powder Metall. Metal Ceram. **28**, 868 (1989).

КИНЕТИКА ИЗМЕНЕНИЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СЛОЖНОСТИ В МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫХ РЕАКЦИЯХ

Зимина А.Д., Сабиров Д.Ш.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН
Россия, Республика Башкортостан, 450075 г. Уфа, проспект Октября, 141*

Информационная энтропия используется для количественных оценок сложности молекул, кристаллов, молекулярных ансамблей. Как правило, метод структурных дескрипторов применяется для решения задач математической химии, не связанных с изменением молекулярной сложности во времени, а информационная энтропия химической реакции рассчитывается как разность значений, соответствующих ансамблю продуктов и ансамблю реагентов.

Нами показана возможность использования информационно-теоретического подхода для изучения кинетики изменений молекулярной сложности в химических реакциях на примере реакций изомеризации и разложения органических соединений, а также последовательных мономолекулярных реакций. Основное уравнение нашего подхода:

$$h_{ME}(t) = H_\Omega(t) + \sum_{i=1}^n \omega_i(t)h_i$$

где $h_{ME}(t)$ – информационная энтропия ансамбля продуктов и реагентов, ω_i – доля атомов ансамбля, приходящихся на i – ю молекулу, $H_\Omega(t)$ – кооперативная информационная энтропия, отражающая факт смешивания молекул (объединения молекул в ансамбль), h_i – параметры участников реакции.

Проведен сравнительный анализ для реакций изомеризации³ ($A \rightarrow B$) и разложения ($A \rightarrow B + C$).

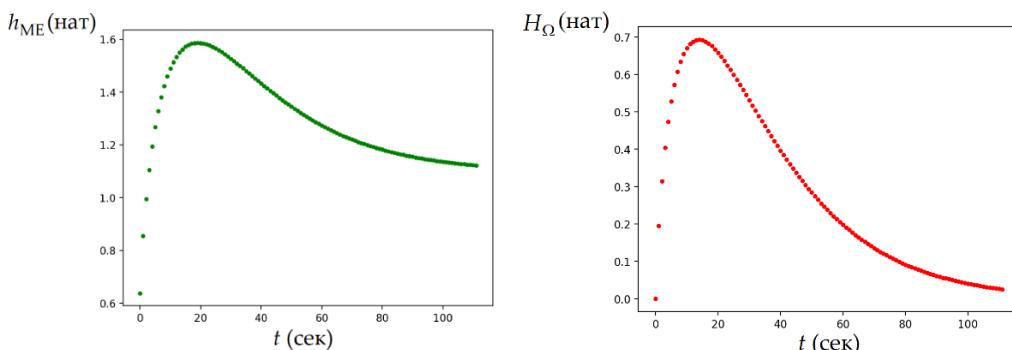


Рисунок 1. Кинетика изменений информационно-энтропийных параметров в реакции $A \rightarrow B$.

ЦИФРОВАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ СЛОЖНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ НА ОСНОВЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ ЭНТРОПИИ

Зимина А.Д., Сабиров Д.Ш., Шепелевич И.С.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН
Россия, Республика Башкортостан, 450075 г. Уфа, проспект Октября, 141*

Информационная энтропия применяется в качестве дескриптора для оценки структурной сложности химических систем. В данной работе выведена формула, устанавливающая связь между информационной энтропией сложной химической реакции $\Delta h_{R(\Sigma)}$ и параметрами её стадий h_k через доли атомов ω_k , приходящиеся на k -ую стадию в суммарном химическом уравнении:¹

$$\Delta h_{R,\Sigma} = \sum_{k=1}^K \omega_k \Delta h_{R,k}$$

Апробация подхода проведена для схем сложных химических реакций с последовательными, параллельными и сопряженными стадиями. Вид полученной формулы отличается от уравнений, используемых при применении закона Гесса к термодинамическим параметрам взаимозависимых реакций. На основе этих отличий предложены классификационные признаки для цифровой идентификации типов реакционных схем.

Таблица 5. Соотношения между коэффициентами ω_k для различных схем реакции

Схема реакции	Отношения
Последовательные реакции	$1 < \sum_{k=1}^K \omega_k \leq K$
Сопряженные реакции	$\sum_{k=1}^K \omega_k = 1$
Параллельные реакции	$\sum_{k=1}^K \omega_k = 1$ and all $\omega_k = \frac{1}{K}$

Литература

1. Sabirov D.S., Zimina A.D., Tukhbatullina A.A. Hess' law requires modified mathematical rules for information entropy of interdependent chemical reactions // J. Math. Chem. – 2024. – V. 62. – P. 819–835.

ИНСТРУМЕНТЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ В ИЗУЧЕНИИ КООРДИНАЦИОННОЙ ХИМИИ ФЕНАНТРОЛИНДИАМИДОВ

Зонов Р.В., Авакян Н.А.,
Лемпарт П.С., Ненайденко В.Г.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3*

Методы квантово-химического моделирования являются удобным инструментом для установления закономерности «структура-свойства». С помощью этих методов возможно, в частности, осуществление моделирования процессов связывания *f*-элементов органическими N,O-донаорными лигандами¹.

Диамиды 1,10-фенантролин-2,9-дикарбоновой кислоты (рисунок 1) являются перспективными лигандами для связывания *f*-элементов².

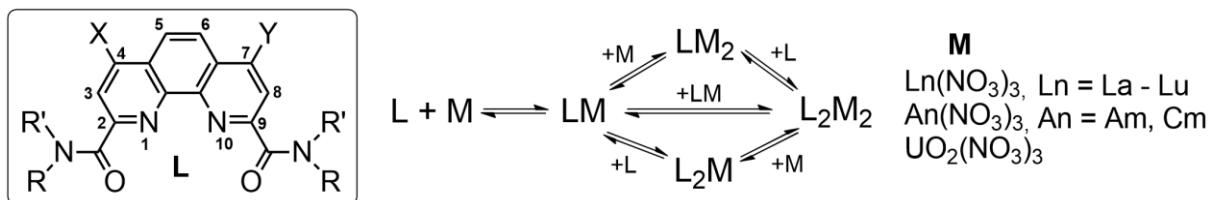


Рисунок 1. Общая формула лигандов **L**
и изучаемые координационные равновесия

Используемые нами методы квантовой химии позволяют анализировать особенности структуры этих соединений, в том числе осуществлять конформационный анализ и анализ таутомерных равновесий. Дальнейшая оптимизация структур комплексов с *f*-элементами позволяет вычислять такие характеристики как энергия комплексообразования, энергия предорганизации, а также заряды на атомах в комплексном соединении. Такие индикаторы полезны для разумного дизайна органических лигандов.

Одной из основных задач расчетов является выявление влияния заместителей в фенантролиновом ядре и в амидной функции на эффективность связывания *f*-элементов и стехиометрию образующихся комплексов. Показано, что даже малые изменения в структуре амидной функции способны приводить к значительным различиям в значении энергии комплексообразования, что коррелирует с экстракционной способностью лигандов в отношении *f*-элементов. Замена амидных заместителей приводит также к изменению кратности связи в комплексах с этими лигандами, что коррелирует с наблюдаемыми зависимостями квантовых выходов люминесценции комплексов и может быть использовано как индикатор³.

Литература

1. Ustyuyuk Yu. A., et al. *Russ. Chem. Rev.*, 2016, **85**, 917.
2. Gutorova S.V., et al. *Rus. J. Gen. Chem.*, 2025, **94**, 243.
3. Avagyan N.A., et al. *Rare Metals*, 2025, **44**, 4279.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ В АНАЛИЗЕ ЯМР СПЕКТРОВ ТЯЖЁЛЫХ НЕФТЕЙ

Иваненко Т.Ю., Морозов Е.В., Петерсон И.В.

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

В последние годы возрастает роль тяжёлых нефтей как стратегического ресурса, характеризующегося огромными запасами, но сложностью в добыче и переработке. Ключевой вызов при их изучении представляет исключительная химическая сложность: тяжёлые нефти являются многокомпонентной высокодисперсной системой, содержащей смесь многих тысяч различных низкомолекулярных соединений и сложный набор надмолекулярных образований, включающих смолы и асфальтены.

Анализ и интерпретация ЯМР-спектров нефтей является нетривиальной задачей вследствие многокомпонентности их состава. В случае тяжелых нефтей анализ становится малоэффективным: спектры образцов характеризуются сильным перекрытием сигналов, широкими и нерезкими пиками, а также низким соотношением сигнал/шум, что делает ручной анализ трудоёмким, субъективным и часто неполным.

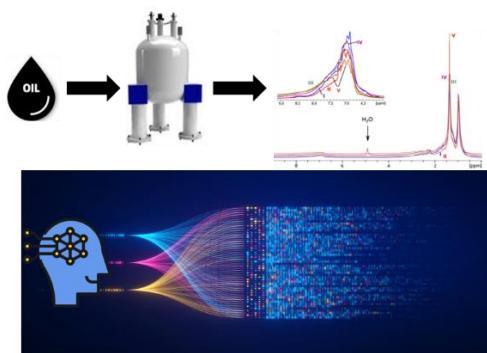


Рисунок 1. Анализ ЯМР спектров нефти с помощью машинного обучения

В данной работе был разработан подход на основе машинного обучения для автоматизированного анализа спектров ЯМР тяжёлых нефтей с целью прогнозирования их ключевых физико-химических свойств и химического состава.

В рамках подхода были реализованы автоматизированная предобработка ^1H и ^{13}C ЯМР спектров, их анализ, интерпретация и предсказание вязкости. Обучающая выборка составила 483 образца тяжёлых нефтей различного происхождения.

Работа выполнена с использованием оборудования Красноярского Регионального Центра Коллективного Пользования ФИЦ КНЦ СО РАН.

ОЦЕНКА ОБЪЕМА ИСПОЛЬЗОВАННЫХ И ПОТЕРЯННЫХ ДАННЫХ В ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Иванова Н.М., Кашин А.С., Анаников В.П.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект, 47*

В данной работе проанализирован большой массив данных, состоящий из микрофотографий, полученных в период с 2011 г. по 2023 г. с помощью сканирующих электронных микроскопов (Hitachi SU8000 и Hitachi SU8230/Regulus8230, Hitachi High-Tech, Япония) и просвечивающего электронного микроскопа (Hitachi HT7700, Hitachi High-Tech, Япония). Основная цель исследования заключалась в количественной оценке объема потерянных данных в ЭМ и определении степени использования полученных изображений в рецензируемых научных публикациях.

Обработка свыше 150 000 микрофотографий показала, что в научных статьях публикуется не более 2–3 % изображений, тогда как около 97 % экспериментальных данных остаются неопубликованными и, следовательно, недоступными для последующего анализа. Установлено, что значительная часть этих данных обладает высоким качеством и содержит потенциально важную информацию о микро/nanoструктуре материалов для дальнейших исследований. К основным причинам потерь можно отнести высокую избирательность, т.к. для иллюстрации в научных публикациях используется лишь одно или несколько изображений, подтверждающих ту или иную гипотезу, а также отсутствие единых стандартов, протоколов хранения и распространения микроскопических данных.

Для повышения эффективности использования результатов электронной микроскопии рекомендуется создание стандартизованных условий архивации изображений, формирование открытых баз данных, внедрение автоматизированных систем обработки и использование технологий машинного обучения для извлечения скрытой информации из неиспользованных микрофотографий. Реализация предложенных мер позволит повысить воспроизводимость научных результатов, оптимизировать использование дорогостоящего оборудования и раскрыть потенциал уже накопленных микроскопических массивов для развития современной науки [1].

Литература

1. Ivanova N. M., Kashin A. S., Ananikov V. P. *Chemistry*, 2025, **7**, 160.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2024-531).

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА КОМПОНЕНТОВ СМАЗОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ЗАДАННЫМИ СВОЙСТВАМИ

Иванова Ю.Ф., Емельянов В.В, Леванова С.В.

*ФГБОУ ВО Самарский государственный технический университет,
443100, Самара, Молодогвардейская, 244*

Синтез сложных эфиров пентаэритрита является важным процессом в химической промышленности, особенно в производстве смазочных масел, которые находят широкое применение в различных отраслях, от автомобилестроения до авиации и энергетики¹. Важнейшими характеристиками этих масел являются вязкость, температура застывания, стабильность при высоких температурах и устойчивость к окислению². Для достижения требуемых свойств конечного продукта необходимо контролировать состав и структуру получаемых эфиров, что требует разработки эффективных методов и инструментов для оптимизации процесса синтеза.

Цель данной работы — получение и системный анализ массива данных о кинетических закономерностях этерификации карбоновых кислот различной структуры пентаэритритом: оценка факторов, оказывающих влияние на скорость протекания процесса и компонентный состав получаемых продуктов; определение кинетических параметров из экспериментальных данных; аргументация моделей, способных обеспечить эффективный контроль за ходом процесса этерификации при использовании в качестве исходных реагентов как индивидуальных карбоновых кислот, так и их смесей.

В результате проведённых исследований был получен большой массив экспериментальных данных по этерификации линейных и изомерных кислот C₄-C₁₀; изучены 160 различных реакционных систем в температурном интервале 110-150 °C, содержащих инертные растворители в сочетании с гомогенными катализаторами; подобраны оптимальные условия синтеза (температура, каталитическая система), что позволяет подавлять смолообразование и снизить время реакции с 20 часов до 2 минут.

Полученные результаты могут быть использованы для создания отечественных методов получения сложноэфирных продуктов.

Литература

1. Wang Y., Liang Y., Li Y., Rui W., He J., Zhao M. *Tribol. Int.*, 2024, 195.
2. Chen B., Liu L., Zhang C., Zhang S., Zhang Y., Zhang P. *Tribol. Int.*, 2022, 176.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 24-79-00158.

**DFT ИССЛЕДОВАНИЕ НОВОГО МАРШРУТА МЕХАНИЗМА
РЕАКЦИИ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ МЕТАНА,
КАТАЛИЗИРУЕМОЙ КОМПЛЕКСАМИ МЕТАЛЛОВ
ПОДГРУППЫ НИКЕЛЯ**

Исламов Д.Н.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,
450075, Уфа, просп. Октября, 141*

Метан является широко используемым химическим сырьем, однако из-за сложности активации связи С–Н его химическая переработка требует агрессивных условий¹. Эффективная переработка метана становится еще более актуальной в свете рисков глобального изменения климата². В рамках данной работы проведено DFT исследование (PBE0-D3BJ // cc-pVTZ-PP (Pd, Pt) // cc-pVTZ (Ni) / 6-311G** (C, N, O, H, Cl)) механизма окисления модельных комплексов метал-алкил под действием 2,3-дихлор-5,6-дициано-1,4-бензохинона (DDQ) в водной среде (рис. 1). Данное превращение представляет из себя новый, ранее не рассматриваемый в литературе, маршрут стадии непосредственной функционализации метана, катализируемой комплексами металлов подгруппы никеля.

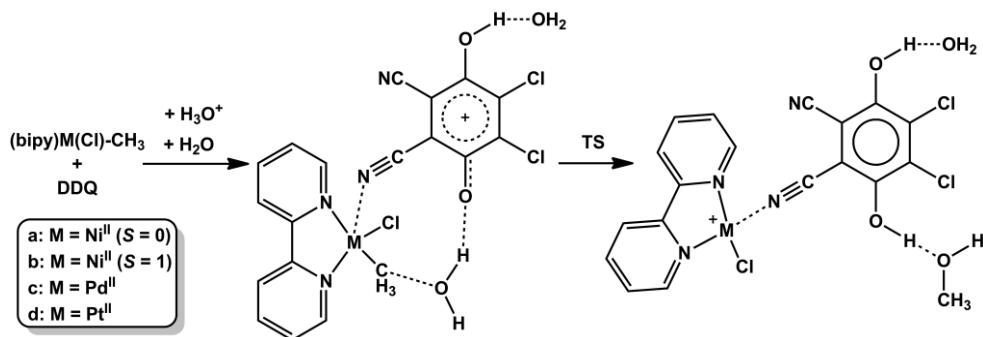


Рисунок 1. Образование метанола в реакции комплексов (bipy)M(Cl)-CH₃ с DDQ в кислом водном растворе.

Установлен термодинамически и кинетически благоприятный путь образования метанола непосредственно при взаимодействии (без изменения степени окисления металлического центра) комплексов (bipy)M(Cl)-CH₃ (M = Ni, Pd, Pt) с DDQ в присутствии воды и гидроксония. Предложен обобщенный теоретически обоснованный механизм реакции конверсии метана в метанол под действием хинонов, катализируемой комплексами металлов подгруппы никеля.

Литература

- [1] Gunsalus N.J. et al. *Chemical Reviews*. 2017, **117**, 8521-8573.
- [2] Mar K.A. et al. *Environmental Science & Policy*. 2022, **134**, 127-136.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема № FMRS-2022-0081)

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЙ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ НОНИЛ-БЕНЗОЛЬНОЙ КИСЛОТЫ

**Исхаков А.Ф., Романова К.А.,
Галяметдинов Ю.Г.**

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
420015, Казнь, ул. Карла Маркса 68*

Жидкие кристаллы демонстрируют набор мезофаз, определяющих их оптические и электрофизические свойства. Корректная идентификация которых критична для их дальнейших исследований и практического применения, хотя визуальная идентификация по микроскопическим текстурам трудна и субъективна. Компьютерное зрение позволяет повысить точность и воспроизводимость. В работе была произведена оценка модели нейронной сети MobileNetV2 для автоматического распознавания нематической (N) и смектической C (SmC) фаз нонилбензойной кислоты¹.

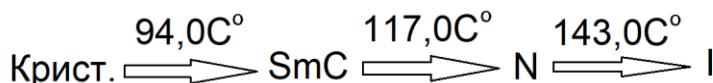


Рисунок 1. Температурный диапазон фазовых переходов нонил-бензольной кислоты

Температурный диапазон составляет 100–140 °C, при шаге 10 °C, и учетом гистерезиса составила ±2 °C². Примененная для настройки нейронной сети база данных составила 3000 изображений 224x224³. 1 этап (20 эпох) включал обучение с фиксированными слоями, 2 этап (10 эпох) был тонкой настройкой для лучшей модели из этапа 1.

Результаты показали, что точность обучения составила 84.90% (эпоха 13), при этом, для точной настройки точность упала до 83.33% (эпоха 3). Тонкая настройка не дала устойчивого прироста из-за ограниченности выборки, при этом выбранная модель MobileNetV2 достаточно хорошо продемонстрировала возможности распознавания текстур N и SmC мезофаз.

Литература

1. Rao J. V., Choudary L. V., et al., Phase Transitions: A Multinational Journal, 1985, 5:1, 73
2. Yadykova A.Y., Konstantinov I.I., et al., Int J Mol Sci, 2023, 24(21), 15706.
3. Howard A.G., Menglong Z., et al., arXiv:1704.04861, 2017.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания на оказание государственных услуг (выполнение работ) от 29.12.2022 г. № 075-01508-23-00

КЛАССИФИКАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА СО-КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ТРЕХ КОМПОНЕНТОВ

**Камалова А.В.,¹ Злобин И.С.,² Даньшина А.А.,²
Соловьёва С.А.,² Рекут Н.А.,² Нелюбина Ю.В.³**

¹ Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
117312, Москва, ул. Вавилова, 7

² Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмиянова РАН,
119334, Москва, ул. Вавилова, 28, стр. 1

³ ФИЦ ПХ и МХ РАН, 142432, пр. Ак. Семенова, 1, г. Черноголовка, Московская область

Рентгеноструктурный анализ – основной метод определения строения новых химических веществ, который, однако, требует получения монокристаллов хорошего качества, что не всегда достижимо. Одним из способов решения этой проблемы является со-кристаллизация плохо кристаллизующихся веществ с правильно подобранными ко-формерами. Например, в недавней работе [1] в качестве таких ко-формеров («кристаллизационных коктейлей») предложены комбинации доступных сульфокислот и аминов, подбираемые для каждого конкретного соединения. Для автоматизации подбора соответствующих комбинаций нами разработан алгоритм машинного обучения, позволяющий прогнозировать результат со-кристаллизации, что заметно упростит получение монокристаллов выбранных соединений для рентгеноструктурного анализа.

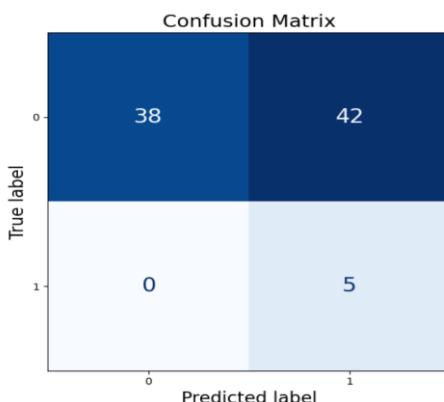


Рис. 1. Матрица ошибок для классификационной модели на тестовой выборке. Классы «1» и «0» отвечают успешной и неудачной со-кристаллизации выбранных соединений.

Литература

1. A. Danshina, I. Zlobin, S. Solov'eva, N. Rekut, Yu. Nelyubina, Cryst. Growth Des., 2025, 25, 12, 4601-4620.

ПРЕДСКАЗАНИЕ ОБМЕННОГО СМЕЩЕНИЯ ДЛЯ МАГНИТНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРНЫХ НАНОЧАСТИЦ С ПОМОЩЬЮ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Капранова К.А., Кладько Д.В.

*Университет ИТМО, Кронверкский пр.,
д.49, лит. А, Санкт-Петербург, Российская Федерация*

Разработка магнитных материалов лежит в основе современных технологий — от спинtronики до энергоэффективных систем хранения данных. Одним из ключевых эффектов является обменное смещение (ОБ), возникающее при взаимодействии ферромагнитных (FM) и антиферромагнитных (AFM) фаз¹. Особый интерес вызывают ядро-оболочечные наночастицы, свойства которых можно настраивать изменением геометрии и интерфейса, однако традиционные подходы (DFT, Монте-Карло и др.) остаются вычислительно затратными².

В работе разработан ML-фреймворк для прогнозирования поля ОБ. Сравнивались модели XGBoost и сети Колмогорова-Арнольда (КАН)³. Сформирован датасет из 980 образцов и 37 признаков. XGBoost показал наилучшее качество ($R^2 = 0.75$), обеспечив высокую точность, тогда как КАН продемонстрировала чувствительность к высоким значениям ОБ, важным для экстремальных магнитных свойств. Совместное применение моделей позволило объединить устойчивость и избирательность прогнозов. Анализ SHAP выявил ключевые факторы — коэрцитивную силу, поле анизотропии и отношение T_N/T_B , что согласуется с известными физическими механизмами⁴.

Предложенный подход является масштабируемой альтернативой физическим моделям, ускоряя проектирование магнитных материалов с заданными свойствами.

Литература

1. Kurichenko, V. L.; Karpenkov, D. Y.; Degtyarenko, A. Y. Experimental and micromagnetic investigation of texture influence on magnetic properties of anisotropic Co/Co₃O₄ exchange-bias composites. *J. Magn. Magn. Mater.* 2023, 565 (September 2022), No. 170232. (30)
2. Brown, W. F. Virtues and weaknesses of the domain concept. *Rev. Mod. Phys.* 1945, 17 (1), 15–19.
3. Wang, R., Yu, H., Zhong, Y., Xiang, H. (2024) Efficient prediction of potential energy surface and physical properties with Kolmogorov-Arnold Networks. *ArXiv Physics*.
4. Phan, M. H.; Alonso, J.; Khurshid, H.; Lampen-Kelley, P.; Chandra, S.; Stojak Repa, K.; Nemati, Z.; Das, R.; Iglesias, O.; Srikanth, H. Exchange bias effects in iron oxide-based nanoparticle systems. *Nanomaterials* 2016, 6 (11), 221.

ПРИМЕНЕНИЕ ОТХОДОВ ПЕРЕРАБОТКИ МИНЕРАЛЬНО-СЫРЬЕВОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ В ПРОИЗВОДСТВЕ УДОБРЕНИЙ

Караурова А.Н., Карапетян К.Г.

*Санкт-Петербургский горный университет императрицы Екатерины II, 199106,
Санкт-Петербург, 21-я линия В.О., д. 2, Санкт-Петербург*

В последнее время в мире уделяется большое внимание обеспечению продовольственной безопасности, напрямую связанной с необходимостью оптимизации индустрии минеральных удобрений.

В условиях ежегодного роста потребности в удобрениях особое внимание заслуживают плавленые фосфорно-магниевые удобрения (ПФМУ) демонстрирующие наибольшую перспективность их производства из вторичных отходов промышленности, что позволяет минимизировать требования к качеству исходного сырья и стоимость производства.

В процессе их производства происходит разрушение кристаллической решетки апатита, что приводит к образованию трехкальциевого фосфата, хорошо растворимого в 2%-ной лимонной кислоте, являющейся показателем его легкодоступности для сельскохозяйственных культур [1].

На данный момент для производства ПФМУ в основном используют магнезит и доломит в качестве магнезиальной составляющей [2]. Для уменьшения ресурсозатрат, на фоне роста интереса к вопросам экологической устойчивости, возможно применение в качестве магнезиальной составляющей альтернативного источника магния - сапонитового шлама, после процессов сгущения и сушки. Результаты физико-химических свойств показали содержание оксида магния около 24% и начало плавления при температуре 1150-1200°C.

Использование такого вторичного отхода промышленности в качестве магнезиального сырья, обладающего низкой себестоимостью и термической стабильностью, становится рентабельным и позволит улучшить структуру почвы.

Литература

1. Трушников, В. Е. Получение плавленых магниевых фосфатов из отходов мелочи фосфоритов и хвостов обогащения в крупнолабораторной и опытной электротермических печах [Текст]/ В.Е. Трушников //Известия Самарского научного центра Российской академии наук. – 2009. – Т. 11. – №. 3-2. – С. 350-356.
2. Караурова, А.Н. Обзор методов определения растворимости плавленых фосфорно-магниевых удобрений [Текст]/ А.Н. Караурова, К.Г. Карапетян // Южно-Сибирский научный вестник. – 2025. – № 2. – с. 95-103

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ЭРОЗИОННОСТОЙКИХ ЛАКОКРАСОЧНЫХ ПОКРЫТИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Кирпаль Ю.Г., Ромахина Т.Р., Силаева А.А.

*ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
125047, Москва, Миусская площадь, 9, стр. 33*

Эрозионностойкие лакокрасочные покрытия широко применяются в промышленности. С появлением новых пленкообразующих и функциональных наполнителей возникает запрос на создание материалов с улучшенными характеристиками, однако их целенаправленная разработка затруднена из-за отсутствия чётких моделей, связывающих состав со свойствами. Цифровизация материаловедения, в частности методы машинного обучения (ML), открывает новые возможности для ускорения разработки рецептур и выявления скрытых закономерностей¹. В рамках данной работы решаются следующие ключевые задачи: определение входных и выходных параметров модели, формирование базы данных и выбор оптимального алгоритма ML.

Для выявления целевых прогнозируемых переменных на основе литературных данных сформирована пилотная выборка. Ее корреляционный анализ выявил сильную связь эрозионной стойкости с прочностными свойствами, что согласуется с известными моделями², подтвердил гипотезу о важности адгезионной прочности покрытия. В ходе работы над литературой выявлены входные переменные, например, частота сшивки пленкообразующего, поверхностные свойства наполнителей, параметры нанесения материала.

В настоящее время для формирования однородной базы данных и обучения модели разработаны и испытываются рецептуры эрозионностойких ЛКМ с функциональными наполнителями (нитевидный ZnO, волластонит, тальк). Обучение планируется с использованием интерпретируемых алгоритмов, например, метода опорных векторов, множественной линейной регрессии, деревьев решений.

Литература

1. Jhamb S. et al. A review of computer-aided design of paints and coatings. Current Opinion in Chemical Engineering, 2020, 27, pp. 107-120.
2. Кондрашов Э. К., Найденов Н. Д. Эрозионностойкие лакокрасочные покрытия авиационного назначения. Часть 1. Эрозионностойкие лакокрасочные покрытия на основе эпоксидных и полиуретановых пленкообразователей (обзор). Труды ВИАМ. 2020, 2(86). С.81-90.

**ИЗУЧЕНИЕ СОЛЬВАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В
КАРБОНАТНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТАХ ДЛЯ ЛИТИЙ-ИОННЫХ
АККУМУЛЯТОРОВ МЕТОДОМ ИК-ФУРЬЕ
СПЕКТРОСКОПИИ НПВО**

**Клименко М.М.^а, Каторова Н.С.^а,
Антипов Е.В. ^{а,б,в}**

^а Институт органической химии Российской Академии Наук
119991, Москва, Ленинский проспект, д. 47

^б Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1

^в Сколковский институт науки и технологий
121205 Москва, Большой бульвар, д. 30 стр. 1

Литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) стали ключевым элементом современных технологий, обеспечивая энергией устройства от портативной электроники до электромобилей и систем стационарного хранения энергии. Их высокая энергетическая плотность, долговечность и экологичность делают их незаменимыми в условиях растущего спроса на возобновляемые источники энергии и устойчивые технологии. Одним из основных элементов ЛИА является электролит, служащий средой для переноса ионов лития между электродами. Его состав, проводимость и стабильность во многом определяют скорость заряда-разряда, эффективность хранения энергии и безопасность аккумулятора при эксплуатации.

Инфракрасная спектроскопия в режиме нарушенного полного внутреннего отражения (ИК-НПВО) является мощным и быстрым методом для неразрушающего контроля состава и исследования межмолекулярных взаимодействий в жидкых электролитах. Высокая чувствительность метода к колебаниям карбонильной группы ($\text{C}=\text{O}$) позволяет изучать сольватацию ионов лития в карбонатных растворителях, таких как этиленкарбонат (ЭК), этилметилкарбонат (ЭМК) и диметилкарбонат (ДМК). Координация катиона Li^+ с неподеленной электронной парой кислорода карбонильной группы приводит к ослаблению связи $\text{C}=\text{O}$, что проявляется в виде характерного низкочастотного сдвига и уширения соответствующей полосы поглощения в ИК-спектре. Это позволяет не только идентифицировать факт сольватации, но и дифференцировать вклад различных компонентов в смешанной сольватационной оболочке.

Таким образом, ИК-НПВО спектроскопия предоставляет широкие возможности как для фундаментального изучения механизмов сольватации, так и для решения прикладных задач по оптимизации состава электролитов для новых поколений литий-ионных аккумуляторов.

РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ МАШИННООБУЧАЕМЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ, ЯВНО УЧИТЫВАЮЩИХ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Корогод Д.В.^{а,б}, Новиков И.С.^в, Шапеев А.В.^{а,г}

^аСколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, территория инновационного центра “Сколково”, Большой бульвар, д. 30, стр. 1

^бМосковский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет),
141701, Московская Область, Долгопрудный, Институтский переулок, д.9,
^вНациональный исследовательский университет “Высшая школа экономики”,
101000, Москва, ул. Мясницкая, д. 20,
^гЦифровые Материалы, 143001, Московская область,
Одинцово, ул. Кутузовская, д. 44

Машинно-обучаемые потенциалы (MLIP-ы) обладают точностью *ab initio* методов и скоростью полуэмпирических потенциалов. Однако большинство существующих MLIP-ов является локальными и не предсказывает частичные заряды атомов, что ограничивает их применение для расчетов систем с большим вкладом дальнодействующего электростатического взаимодействия и таких свойств материалов как, например, диэлектрическая проницаемость и ионная проводимость.

В данном исследовании представлена модификация ранее предложенной модели предсказания зарядов¹, представляющая собой модель с зарядами, зависящими как от локальных атомных окружений, так и от химического состава всей системы. Разработанная модель была объединена с локальным потенциалом Moment Tensor Potential (MTP)² и протестирована на задаче моделирования кристаллического хлорида натрия.

Добавление к MTP явного учета электростатического взаимодействия привело к существенному уменьшению ошибок обучения. Разработанная модель позволила посчитать фононный спектр с учетом неаналитической поправки к динамической матрице³ без использования экспериментальных данных и проведения дополнительных первопринципных расчетов. Также, данная модель была использована для расчета диэлектрической постоянной кристаллического хлорида натрия.

Литература

1. Korogod D., Chalykh O., Hodapp M., Rybin N., Novikov I.S., Shapeev A.V. *arxiv preprint arXiv:2509.15907*
2. Shapeev A.V. *Multiscale Modeling & Simulation*, 2016, **14**, no.4, 1153
3. Wang Y et al. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2010, **22**, no.20, 202201

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РНФ, проект 23-13-00332.

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН НОВЫХ МОЛЕКУЛ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ РАКА МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ

Котлов Е.С., Ломова М.В.

*Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского,
Институт физики, 410012, Саратов, ул. Астраханская, д. 83*

Рак молочной железы остается одним из наиболее распространенных онкологических заболеваний в мире, являясь ведущей причиной смертности от рака среди женщин. Широко используемые сегодня методы лечения часто оказываются неэффективными из-за развития резистентности, токсичности для здоровых тканей и частых рецидивов. В связи с этим, поиск новых, более эффективных и безопасных противоопухолевых агентов представляется чрезвычайно актуальной задачей.

Целью данной работы является компьютерный дизайн и *in silico* оценка новых низкомолекулярных соединений, направленных на ключевые молекулярные мишени при раке молочной железы.

В качестве мишеней для молекулярного дизайна были выбраны ключевые белки, участвующие в патогенезе рака молочной железы. Обучающие датасеты, содержащие известные биологически активные соединения, были сформированы из общедоступных химических баз данных ChEMBL и PubChem. Дизайн новых молекул-кандидатов был выполнен с использованием генеративной модели REINVENT 4¹. Данный подход позволил целенаправленно создавать молекулы с заранее заданными свойствами, оптимизируя их в сторону желаемых ADMET-параметров. Таким образом, акцент был сделан на создании химически разнообразной группы соединений с улучшенными характеристиками. Первичный отбор сгенерированных молекул проводился на основе прогнозируемой IC50, соответствуя правилу "пяти" Липински и других фармакофорных-параметров. Для наиболее перспективных соединений-кандидатов был выполнен молекулярный докинг для оценки аффинности и характера связывания с активными центрачами белков-мишеней. В результате отобраны перспективные соединения-кандидаты, рекомендуемые для синтеза и последующих доклинических испытаний.

Литература

1. Loeffler, H.H., He, J., Tibo, A. *et al.* Reinvent 4: Modern AI–driven generative molecule design. – *J Cheminform*, 2024, Vol. 16, Article 20.

ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ И СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ

Кравцов А.В.^а, Еремин Р.А.^а,
Хумонен И.С.^а, Буденный С.А.^{а,б}

^аAIRI, 123112, Москва, Пресненская наб., 6, стр. 2

^бSber AI, 121170, Москва, Кутузовский пр-т, 32/3, стр. A

Доклад посвящён стратегии отбора структур из пространства состава и конфигурации разупорядоченных систем, основываясь на пространственной симметрии кристаллических структур, позволяющей эффективно проводить обучение ML-моделей с минимизацией размера тренировочных выборок применительно к функциональным материалам.

Один из ярких примеров применения данной методики — исследование материалов на основе перовскитов галогенидов свинца, востребованных в оптоэлектронных устройствах. Методология исследования основана на сочетании теории функционала плотности (DFT) и графовых нейронных сетей (GNN) для расчёта энергии образования кристаллов. Исследуемое пространство охватывало две фазы CsPbI₃, включающие около трёх миллионов возможных конфигураций замещения атомов Pb/Cd/Zn и I/Br. Методом DFT было рассчитано лишь ограниченное число структур (1162 экземпляра). Затем сформированы варианты обучающих наборов, содержащие разное соотношение высокосимметричных и низкосимметричных структур, на которых были обучены моделей Allegro. Ошибка предсказания энергии образования составила менее 11 мэВ/атом. Анализ показал, что оптимальный баланс типов симметрии кристаллических структур в составе тренировочной выборки повышает надёжность предсказательных возможностей ML-методов¹.

Ещё одним примером успешного построения обучающего набора является выявление оптимального замещающего металла и его концентрации в высшем бориде вольфрама, имеющего большое значение для улучшения механических качеств. Используя расчеты DFT примерно 200 структур, созданы модели с точностью до 3 мэВ/атом и успешно спрогнозированы термодинамические свойства почти полумиллиона структур, определив подходящие заместители и диапазоны их содержания, способные формировать стабильные фазы W-Me-B. Эти выводы подтвердились экспериментальным путём².

Литература

1. Krautsou A.V., Humonen I.S., Lazarev V.D., et al. *Sci. Rep.*, 2025, **15**, 8856.
2. Matsokin N.A., Eremin R.A., Kuznetsova A.A., et al. *npj Comput. Mater.*, 2025, **11**, 163.

НЕЛОКАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ НА ОСНОВЕ МЕХАНИЗМА ВНИМАНИЯ

Кулаев К.К.^{1,3}, Рябов А.А.¹, Проценко Б.О.³,
Бурнаев Е.Д.^{1,2}, Вановский В.В.¹

¹*Сколковский институт науки и технологий, Центр искусственного интеллекта,
Москва, 121205, Российская Федерация*

²*Автономная некоммерческая организация «Институт искусственного интеллекта»
(AIRI), Москва, 121170, Российская Федерация*

³*Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов
Южного федерального университета,
344090 Ростов-на-Дону, Сладкова, 178/242*

Одной из центральных задач теории функционала плотности (DFT) остаётся корректное описание нелокальных эффектов электронного обмена и корреляции.

В данной работе мы представляем нелокальную модель, основанную на модифицированном механизме внимания, взвешенного по расстоянию. Предлагаемая нейронная сеть уточняет энергии, рассчитанные с помощью B3LYP, что позволяет сохранить его физическую основу и повысить точность. Сравнивались две архитектуры: многослойный перцептрон (MLP) и модель со взвешенным по расстоянию вниманием. Количество параметров было одинаковым (≈ 143 тыс.), использовались единая инициализация и одинаковые процедуры обучения. Обучение: 1136 реакций (часть датасета энергий атомизации MSR-ACC-TAE25^[1] и подмножества GMTKN55^[2]: G21IP, G21EA, DIPCS10, BH76RC, BSR36, RG18, YBDE18, S66x8). Тест: BHDIV10 из GMTKN55. Валидация: оставшиеся подмножества GMTKN55. Полученные ошибки в энергии реакций GMTKN: Нелокальная модель со взвешенным по расстоянию вниманием: 2.47 ккал/моль. MLP: 3.70 ккал/моль. Исходный B3LYP/D3BJ: 3.81 ккал/моль.

Использование механизма внимания, взвешенного по расстоянию, позволяет значительно повысить точность по сравнению с B3LYP и MLP при одинаковых ресурсах.

Литература

1. Ehlert S. и др. Accurate Chemistry Collection: Coupled cluster atomization energies for broad chemical space // 2025.
2. Goerigk L. и др. A look at the density functional theory zoo with the advanced GMTKN55 database for general main group thermochemistry, kinetics and noncovalent interactions // Phys. Chem. Chem. Phys. 2017. Т. 19. № 48. С. 32184–32215.

Публикация подготовлена за счет средств гранта на поддержку исследовательских центров в сфере искусственного интеллекта, предоставленного Министерством экономического развития Российской Федерации (идентификатор соглашения о предоставлении субсидии 000000Ц313925Р4F0002) и договором со Сколковским институтом науки и технологий от «20» июня 2025 г. № 139-10-2025-033.

**ВНУТРИКЛЕТОЧНАЯ ЛОКАЛИЗАЦИЯ И ФОТОИНАКТИВАЦИЯ
ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТОК ХЛОРИНОВЫМИ
ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРАМИ С РАЗЛИЧНЫМИ
ФУНКЦИОНАЛЬНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ**

**Кустова Т.В.,^а Зорин В.П.,^б Зорина Т.Е.,^б
Кустов А.В.,^в Белых Д.В.^с**

^а*ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет»,
153000, Иваново, Шереметевский проспект 7*

^б*Белорусский государственный университет, Минск*

^в*ФГБУН Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново*

^с*Институт химии ФИЦ Коми научного центра УрО РАН, Сыктывкар*

Ключевым компонентом противоопухолевой фотодинамической терапии является фотосенсибилизатор (ФС), который селективно аккумулируется в опухолях и при фотоактивации эффективно генерирует синглетный кислород, вызывающий гибель опухолевых клеток. Хотя хлориновые ФС используются в клинике уже давно, информация о внутриклеточной локализации препаратов и влиянии на нее функциональных заместителей очень ограничена. Цель исследования заключалась в анализе влияния функционального замещения на накопление, локализацию и фотоинактивацию лейкемических клеток миелоидного происхождения К 562.

Полученные нами результаты позволили сделать следующие выводы: (1) ни один из исследованных ФС до проведения фотоинактивации не локализуется в ядре клеток; (2) наиболее часто ФС локализуются в эндоплазматическом ретикулуме и комплексе Гольджи, а также в митохондриях ($KПП=0.6-0.9$); (3) ФС с пентагликольным фрагментом обладает очень высокой аффинностью к лизосомам ($KПП=0.93$) и скоростью миграции между клетками; (4) полученные нами соединения являются более эффективными ФС при фотоинактивации опухолевых клеток К 562 по сравнению с хлорином е6.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00042,
<https://rscf.ru/project/25-23-00042/>.*

ЦИКЛИЧЕСКИЕ ПОЛИ-*N*-ГИДРОКСИАМИНЫ — КОНФОРМАЦИОННО-НАСТРАИВАЕМЫЕ СИНТОНЫ САМОСОБИРАЮЩИХСЯ СИСТЕМ

Лесников В.К., Сухоруков А.Ю.

*Институт органической химии им Н.Д. Зелинского РАН,
119991, Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 47*

При со-кристаллизации с органическими кислотами, циклические полиамины способны образовывать самособирающиеся надмолекулярные структуры. Материалы подобного типа представляют особый интерес для разработки систем молекулярного распознавания, фармацевтических препаратов и в качестве нелинейно-оптических (НЛО) материалов третьего порядка. Однако рациональный дизайн супрамолекулярных ансамблей с водородными связями все еще остается сложной задачей.

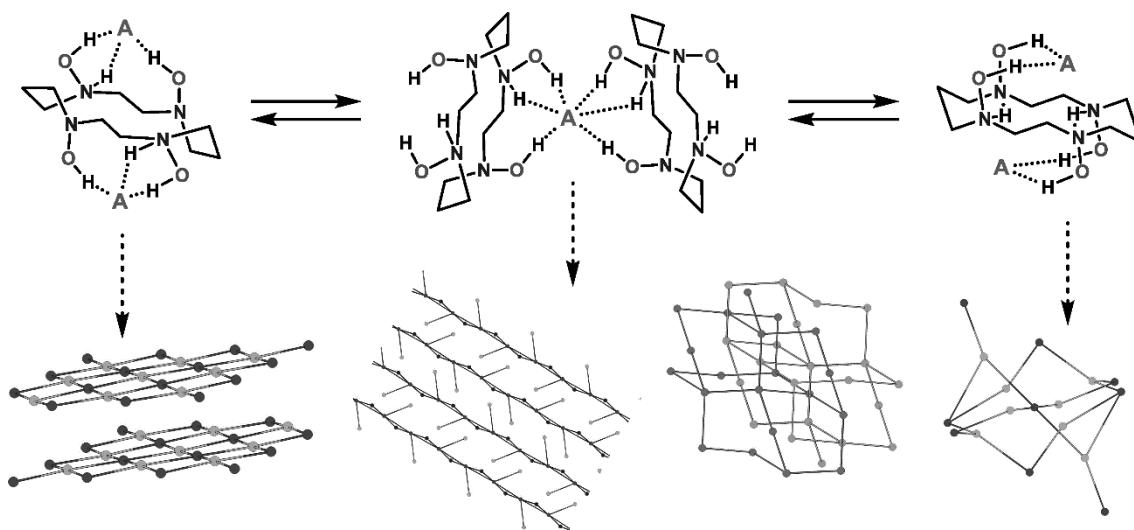


Рисунок 1. Самособирающиеся водородно-связанные надмолекулярные структуры *N* - гидроксилированных циклических полиаминов.

Выявление типов супрамолекулярных ансамблей позволяет сделать предположение о закономерностях их образования, а также о возможных сферах применения получаемых соединений и кристаллов. Идентификация образующихся надструктур производится посредством анализа данных РСА, с помощью специализированных программ, что требует колоссальной ручной работы, которую можно было бы упростить с помощью ИИ. В данной работе для построения супрамолекулярных ансамблей мы представляем новые синтоны на основе поли-*N*-гидроксиаминов и рассказываем о свойствах, которые нам удалось обнаружить для полученных надструктур.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 25-73-00218).

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН НОВЫХ ЛЕКАРСТВ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ РАКА МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ

**Ломова М.В.,^{a,б} Котлов Е.С.,^а Анисимов Р.А.,^{a,б}
Калинова А.Е.,^{a,б} Садовников А.В.^б**

^a ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Научный медицинский центр,
410012, Саратов, ул. Астраханская, д. 83

^б ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Институт физики,
410012, Саратов, ул. Астраханская, д. 83

Наиболее интенсивно развивающимся подходом в противоопухолевом лечении считается генная терапия наряду с традиционными хирургическими протоколами, химио- и радиотерапии, разработкой новых препаратов на основе терапевтических нуклеиновых кислот. Совмещение неинвазивного физического (электромагнитное поле, например) воздействия на раковую опухоль с одновременной химиотерапией позволит реализовать новый локализованный подход к лечению заболеваний с минимальными побочными эффектами^{1,2}.

Применение высокочастотных магнитных переменных полей имеет ряд недостатков: сложность конструирования установок для переменных магнитных полей высоких частот в условиях клиники, неконтролируемый перегрев магнитных наночастиц, приводящий к некрозу здоровых окружающих тканей. Низкочастотные переменные магнитные поля не нагревают магнитные носители, а их действие обусловлено магнитно-механическим вращением носителей в поле действия магнитных полей, разрушая³.

Целью данной работы является создание молекулярного дизайна действующих веществ, которые проявят свою активность в отношении определенных типов опухоли рака молочной железы, а также покажут ее максимальное действие в присутствии физического триггера – электромагнитного поля низкой частоты с помощью методов машинного обучения.

Нами будет предложена первичная генеративная модель для новых молекул с улучшенной противоопухолевой активностью.

Литература

1. Soto, F.; Chrostowski, R. Front. Bioeng. Biotechnol. 2018, 6, 170.
2. Gogoi, M. Curr. Pathobiol. Rep. 2021, 9 (3), 71–78.
3. Baskin, D. S.; Sharpe, M. A.; Nguyen, L.; Helekar, S. A. Front. Oncol. 2021, 11, 708017.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-13-00373.

ПРИМЕНЕНИЕ ГЕНЕРАТИВНЫХ ПОДХОДОВ ПРИ ОБУЧЕНИИ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ НА ПРИМЕРЕ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ КАРБИДОВ

Луканов М.М., Квашнин А.Г.

*Сколковский институт науки и технологий,
121205, Москва, Россия*

Теоретическое исследование молекулярных систем являются важной и необходимой задачей при изучении новых и ранее синтезированных соединений. Основным из широко используемых инструментов в последнее время являются квантово-химические расчёты на уровне теории функционала плотности (DFT), которые сильно лимитированы размером рассматриваемых систем. В связи с этим актуальной является задача разработка более эффективных методов расчёта с точностью, не ниже уровня DFT.

В качестве таких методов могут выступать ML-потенциалы, которые (при разумном выборе алгоритмов оптимизации) могут давать точность, сопоставимую с тем уровнем теории, которая была использована при обучении моделей.

В данной работе приводится пример использования генеративной модели MatterGen [1] для создания разнообразной и репрезентативной выборки для обучения и валидации модели. Этот подход может стать хорошей альтернативой других методов обучения потенциала, а именно пассивного и активного обучения. В качестве объектов изучения были выбраны высокотемпературные материалы, которые обладают относительно большим конфигурационным пространством, что особенно сложно учитывать при составлении баз данных для обучения моделей.

Литература

1. C. Zeni et al., “MatterGen: a generative model for inorganic materials design,” arXiv (Cornell University), Dec. 2023, doi: <https://doi.org/10.48550/arxiv.2312.03687>.

ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ LSTM

Лысенко М.Р., Сергеев В.В.

*Санкт-Петербургский горный университет императрицы Екатерины II,
199106, Санкт-Петербург, 21-я линия В.О., д. 2, Санкт-Петербург*

Повышение эффективности химико-технологических процессов за счет внедрения новых методов машинного обучения является важной и актуальной задачей современной химической науки^{1,2}.

В рамках выполнения проекта по созданию технологии вторичного вовлечения осветленной части жидких стоков производства соды с получением побочной продукции в виде хлоридного натриево-кальциевого рассола¹ была разработана прогностическая модель на основе LSTM (рисунок 1), позволяющая предсказывать концентрацию солей в накопителе-испарителе в ближайшие 5 лет.

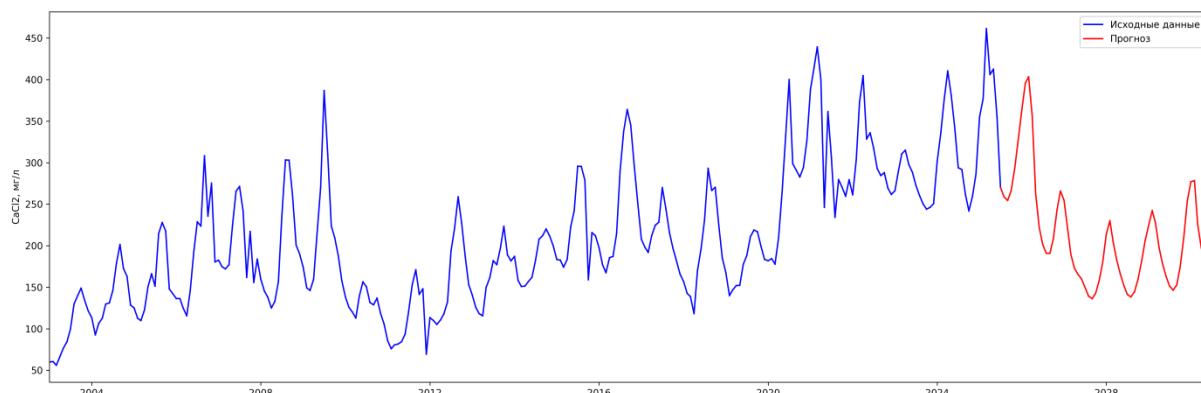


Рисунок 1. Прогноз концентрации CaCl_2 в накопителе-испарителе на следующие 5 лет (до 2030 года)

Представленное решение позволило оптимизировать технологический процесс получения рассола, соответствующего ТУ 20.13.31-026-00723477-2023 «Раствор хлорида кальция технологический» и обеспечить стабильное качество выпускаемой продукции

Литература

- Takefuji Y. Challenges in feature importance interpretation: Analyzing LSTM-NN predictions in battery material flotation // Journal of Industrial Information Integration. 2025. Vol. 45. P. 100809.
- Wanlu Wu, Guoquan Wu, Zhe Wu. A graph convolutional LSTM approach for modeling nonlinear chemical process networks using spatial-temporal data // Computers and Chemical Engineering. 2025. Vol. 201. P. 109242.

КОМБИНАТОРНО-ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД ДЛЯ КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ХАРАКТЕРИЗАЦИИ ВНУТРЕННЕЙ СТРУКТУРЫ ПРИРОДОПОДОБНЫХ МАТЕРИАЛОВ

**Мануковская Д.В.¹, Калашников А.О.^{2,4}, Грачев Е.А.³, Тимошенко
В.В.³, Чернявский М.В.³, Тананаев И.Г.¹**

¹ Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им.
И.В.Тананаева, 184209, г. Апатиты, Академгородок 26а

² Геологический институт Кольского научного центра РАН,
184209, г. Апатиты, ул. Ферсмана, 14

³ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1

⁴Инженерная школа, АФ Мурманского арктического университета,
184209, г. Апатиты, ул. Лесная 29

В материаловедении геологических пород как природоподобных материалов остро стоит проблема формализации морфологии составляющих минералов, определяющих ключевые свойства их извлечения для переработки в целевые компоненты. Мы предлагаем комбинаторно-топологический подход к характеризации меймечита (Контозеро, Кольский п-ов) с применением функционалов Минковского M_0 - M_3 [1]. Распределение минеральных фаз [серпентин (s), оливин (o), магнетит (m), вмещающая матрица (hm)] достоверно определяется с помощью X- μ CT системы v|tome|x L240, а их сегментирование - методом мульти-Оцу. Количественный анализ многофазных объектов достигается вычислением топологических инвариантов для каждой фазы в отдельности и для их комбинаций с применением функционала M_3 и входящих в него чисел Бетти (b_0 – объекты; b_1 – сквозные каналы во всех объектах; b_2 – закрытые поры в трехмерном пространстве). Анализ проводился с учетом соотношения $b_0^{(f12)} <, >, = b_0^{(f1)} + b_0^{(f2)}$, f_1, f_2 – фазы по отдельности, f_{12} – объединение фаз. Возможные комбинации b_0 и их топологические следствия расширяются при учете условия $b_0^{(f1)} > b_0^{(f2)}$: если $b_0^{(f12)} = \text{MAX}[b_0^{(f1)}; b_0^{(f2)}]$, то в объеме как минимум присутствуют кластеры $(f1)-(f2)$; если $b_0^{(f12)} = \text{MIN}[b_0^{(f1)}; b_0^{(f2)}]$, то кластеры $(f1)-(f2)-(f1)$; а если $b_0^{(f12)} < \text{MIN}[b_0^{(f1)}; b_0^{(f2)}]$, то кластеры $(f1)-(f2)-(f1)-(f2)-(f1)$. Применив расширение к уже известным для меймечита результатам показано, что серпентин и оливин, оливин и вмещающая матрица, а также серпентин и вмещающая матрица агрегируются в длинные цепочки типа (s)-(o)-(s)-(o)-(s), (s)-(hm)-(s)-(hm)-(s) и (o)-(hm)-(o)-(hm)-(o). Причем серпентин агрегируется с вмещающей матрицей в намного меньшей степени, чем оливин. Фазы (s) и (m) не взаимодействуют, а (o) и (m) обладают сродством к образованию кластеров (o)-(m), хоть и слабым. Показано, что фазы (m) и (hm) образуют цепочки (m)-(hm)-(m)-(hm)-(m), для которых определена минимальная длина и конфигурация. Объемы вычисления при анализе большого количества образцов подразумевают участие ИИ. В таком случае числа Бетти выступают как мощный и эффективный ИИ ресурс.

Литература

- Chernyavskiy, M., et al. Quantitative description of internal 3D structure of a geological sample using algebraic topology methods. Sci Rep 15, 22582 (2025). <https://doi.org/10.1038/s41598-025-05692-9>

Работа выполнена по теме НИР FMEZ-2022-0055, FMEZ-2024-0008.

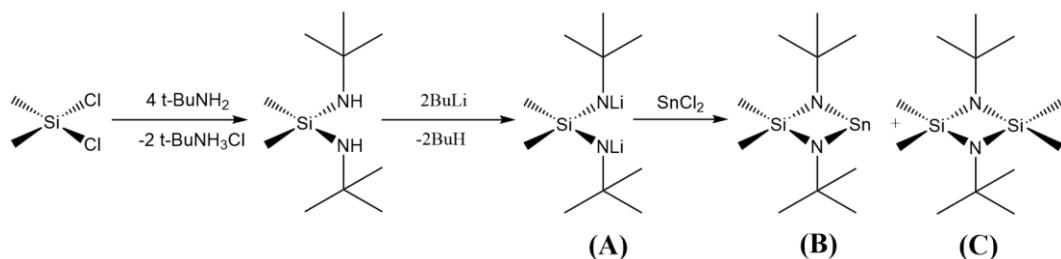
СРАВНЕНИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО ПОДХОДА И СМЕШАННОГО ПОДХОДА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ РЕАКЦИЙ С УЧАСТИЕМ СИЛАНДИАМИДОВ

Мартыненко П.А.

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
Новосибирск, ул. Лаврентьева 3

Силандиамины представляют значительный интерес благодаря своему потенциальному применению в материаловедении и в качестве универсальных лигандов в координационной химии.

Данное исследование посвящено проблемам синтеза силандиаминов и их производных, изучению их реакционной способности с помощью стандартного квантово-химического подхода (B3LYP/def2-tzvp) и смешанного подхода с применением методов на основе ИИ (MLAtom).



С помощью квантово химических методов и моделей на основе ИИ изучается система конкурирующих реакций A→B и A→C (см. схему), даются сравнительный анализ и рекомендации по проведению синтеза, в результате которого селективно образуются продукты B или C.

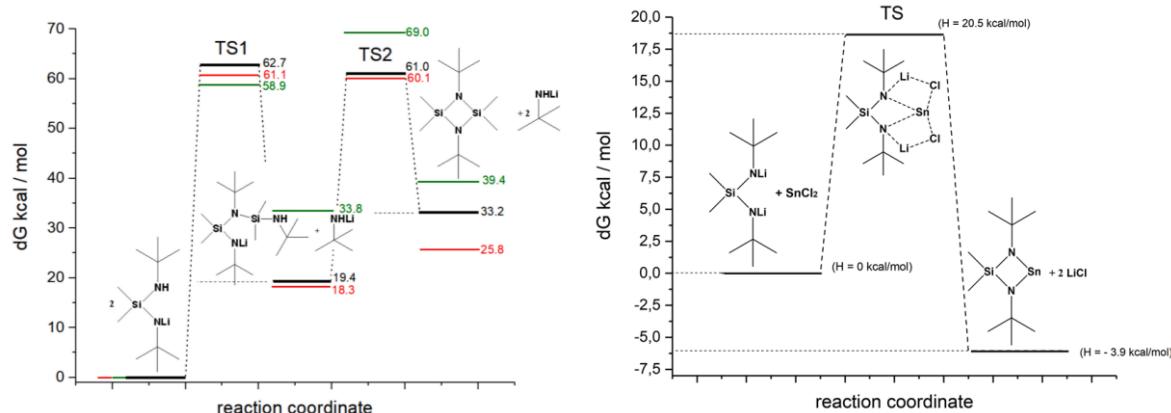


Рисунок 1 Энергетические диаграммы реакций A→B (справа) и A→C (слева).

Литература:

1. Martynenko, P. (2025) Comparison of quantum chemical approach and mixed approach using AI in study of reactions involving silanediimides. Comput. Theor. Chem., 1252

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСАЖДЕНИЯ ЗОЛОТА НА ПОВЕРХНОСТИ МЕДИ С ПРИМЕНЕНИЕМ МАШИННО-ОБУЧАЕМОГО ПОТЕНЦИАЛА

Маслов П.А., Орехов Н.Д.

*Московский физико-технический институт,
141700 Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9*

С момента открытия графена, все больший интерес вызывают двумерные материалы, одним из которых недавно стали ультратонкие золотые пленки [1]. Несмотря на возможность получения таких пленок, остается открытым вопрос о механизме их формирования. Определение данных механизмов составляют основную цель данной работы.

Задача получения и изучения роста тонких слоев металлов давно существует в различных технологиях [2, 3]. Для большинства систем было показано, что соответствующие механизмы роста задают грубую поверхность пленки, портящую её свойства. В таких исследованиях обычно применялись кинетические методы Монте-Карло, опирающиеся на экспериментальные данные, или межатомные потенциалы типа ЕАМ, не всегда корректно описывающие взаимодействие [4].

В данной работе результаты опираются на использование методов *ab initio*. С помощью предварительного обучения на конфигурациях, обработанных пакетом VASP, а также методами активного обучения был получен машинно-обучаемый МТР потенциал [5], позволяющий вести расчеты молекулярной динамики с высокой точностью. Определяется характер роста золотой пленки на поверхности меди. Исследуется зависимость коэффициента поверхностной диффузии золота от степени покрытия поверхности. Рассчитывается энергия активации атомов золота.

Литература

1. Mironov M. S. [et al.] Graphene-Inspired Wafer-Scale Ultrathin Gold Films // Nano Lett. 2024. V. 24(51). P. 16270-16275.
2. Fischer B. Nucleation and Growth in Metal-on-Metal Epitaxy: The Influence of Strain and Surface Reconstruction: Doctoral dissertation. École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 1998.
3. Herman M. A., Richter W., Sitter H. Epitaxy: Physical Principles and Technical Implementation. Berlin: Springer, 2004.
4. Müser M. H., Sukhomlinov S. V., Pastewka L. *Interatomic potentials: Achievements and challenges.* // Adv. Phys. X. 2023. V. 8(1). P. 025002.
5. Novikov I. S. [et al.] The MLIP package: moment tensor potentials with MPI and active learning // Mach. Learn.: Sci. Technol. 2021. V. 2(2). P. 025002.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СИНТЕТИЧЕСКИХ ДАННЫХ ДЛЯ РАСШИРЕНИЯ ОБУЧАЮЩИХ ВЫБОРОК В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Махилев Р.А., Екимова Т.А.

*Петрозаводский Государственный Университет,
185910, Россия, Республика Карелия, г. Петрозаводск, пр. Ленина, 33*

Маленькая выборка данных одна из наиболее острых проблем при применении машинного обучения в материаловедении¹. На гистограмме (рис. 1) представлен подобный случай, когда данные по твёрдости имеют низкую репрезентативность крайних значений. Такое распределение значений приведёт к недостаточной обобщающей способности предсказательной модели.

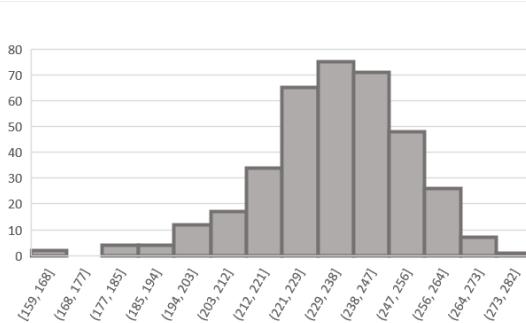


Рис.1. Гистограмма распределения значений твёрдости.

Для решения данной проблемы был использован метод, предложенный в работе², который заключается в генерации синтетических данных с использованием условного вариационного автокодировщика (Conditional Variational Autoencoder, CVAE). Эти синтетические данные могут закрыть нехватку значений. После генерации значений была проведена оценка пригодности их использования в обучающей выборке. Оценку проводили с помощью корреляционного и регрессионного анализа. По результатам оценки показано, что синтетические данные сохраняют зависимости и влияния между переменными как у реальных значений. Следовательно, их использование в обучающей выборке наравне с реальными значениями оправданно.

Литература

1. Xu P., Ji X., Li M., Lu W. Small data machine learning in materials science // npj Computational Materials. 2023. Vol. 9. Art. № 94. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41524-023-01000-z>.
2. Sohn K., Yan X., Lee H. Learning Structured Output Representation using Deep Conditional Generative Models // Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS). 2015. DOI:https://papers.nips.cc/paper_files/paper/2015/hash/8d55a249e6baa5c06772297520da205-1-Abstract.html

СОЧЕТАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И РАСЧЕТНЫХ ПОДХОДОВ ДЛЯ КОНСТРУИРОВАНИЯ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ БИОСОВМЕСТИМЫХ ФОТОКАТАЛИЗАТОРОВ

**Мешина К.И., Ткаченко Д.С., Бобрышева Н.П.,
Осмоловский М.Г., Вознесенский М.А., Осмоловская О.М.**

*Санкт-Петербургский государственный университет,
199034, Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7-9*

Разработка и внедрение в водоочистные системы фотокаталитических материалов на основе полупроводниковых оксидов – многообещающая технология избавления от циклических органических загрязнителей. Существует множество подходов к созданию подобных материалов: синтез полупроводников разной природы, в том числе допированных; создание гетероструктур и композитов; модификация поверхности фотокатализатора и т.п. Однако механизм фотодеградации и причины вариативности ее протекания остаются малоизученными. Чтобы комплексно исследовать как особенности формирования полупроводниковых фотокатализаторов, так и их производительность при варьировании условий, к химическому эксперименту необходимо добавить изучение материала на атомном уровне с помощью расчетных методов.

В фокусе работы с точки зрения получения высокоеффективного фотокатализатора находится изучение взаимодействия загрязнителей с разными кристаллографическими гранями на его поверхности. При этом биосовместимый оксид цинка (ZnO) с различным соотношением граней формируется легко и управляемо благодаря процессу ориентированного присоединения (ОП). По нашей гипотезе, ОП можно предсказывать с использованием специально разработанного протокола.

Так, синтезированные нами методом «мокрой» химии наночастицы ZnO были охарактеризованы методами РФА, моделирования полного профиля дифрактограммы, ИК-спектроскопии, СЭМ, ПЭМ, БЭТ, РФЭС и СКР. Проведенные с использованием оригинального подхода квантово-химические расчеты показали, что красители отличающихся типов формируют активированный комплекс с разными гранями кристалла, и что на процесс ОП, определяющий доли граней в конечном продукте, можно влиять путем изменения состава реакционной среды.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта СПбГУ № 116653661 с использованием оборудования ресурсных центров научного парка СПбГУ, в том числе «РДМИ», «ИТКН», «МАСВ», «МРЦНТ», «ДФММФН», «ОЛМИВ», «ВЦ», «МРМИ», «ФМИП», «НФМ».

**РЕГИОСЕЛЕКТИВНОСТЬ РЕАКЦИИ ХЕКА:
ИЗУЧЕНИЕ МЕТОДОМ КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ
ДИНАМИКИ**

Назарова В.В., Гордеев Е.Г., Анаников В.П.

*Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского Российской академии наук,
119991, Москва, Ленинский проспект, 47*

В современном тонком органическом синтезе, предъявляющем высокие требования к атом-экономичности химических процессов, реакция Хека сохраняет свою актуальность, так как позволяет получать сложные органические соединения с высокой селективностью [1]. В катализируемых комплексами палладия реакциях образования связи углерод-углерод, в частности в реакции Хека, региоселективность процесса определяется стадией внедрения алкена по связи Pd-C [2].

В данном проекте было проведено квантово-химическое моделирование стадии внедрения молекулы алкена по связи Pd-C для ряда алkenов (стирола, аллилового спирта и N-винилпирролидона) и органогалогенидов (йодбензола, этилйодида, винилийодида и 1-йодо-1-пропина). Энергии активации стадии внедрения, полученные в результате поиска переходных состояний, находятся в хорошем согласии с экспериментом в случае стирола (преимущественным образованием линейного продукта). Однако, для других алkenов соответствие энергий активации, рассчитанных данным способом, экспериментально наблюдаемой региоселективности меньше. Для объяснения наблюдаемой региоселективности реакции Хека было проведено моделирование предреакционного комплекса стадии внедрения алкена методом квантовой молекуллярной динамики. Показано, что результаты такого моделирования, как в континуальной, так и в явной среде ДМФА, лучше согласуются с экспериментом. Показано, что замена фосфинового лиганда PPh_3 на $\text{PM}_{\text{e}3}$ в составе предреакционного комплекса в большинстве случаев приводят к аналогичным результатам МД моделирования, но в случае NVP такая замена способствует изомеризации комплекса, в большей степени благоприятствующей формированию разветвленного продукта реакции.

Таким образом, моделирование молекуллярной динамики предреакционных комплексов стадии внедрения может являться эффективным теоретическим инструментом для анализа региоселективности в реакциях сочетания.

Литература

1. I.P. Beletskaya, A.V. Cheprakov, *Chem. Rev.* **2000**, 100, 3009-3066.
2. L.T. Sahharova, E.G. Gordeev, D.B. Eremin, V.P. Ananikov, *ACS Catal.* **2020**, 10, 9872–9888.

АТОМИСТИЧЕСКОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АДСОРБЦИИ ТЕРМОПЛАСТИЧНЫХ ПОЛИИМИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ

Назарычев В.М., Добровский А.Ю., Лукашева Н.В.

*Филиал НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИВС,
199004, Санкт-Петербург, В.О. Большой пр. 31*

Полииимида (ПИ) — термостойкие и химически устойчивые полимеры с хорошими диэлектрическими свойствами, но уступающие металлам по механическим характеристикам. Для улучшения этих свойств используются наночастицы Al_2O_3 и Fe_2O_3 , часто применяемые при создании полимерных нанокомпозитов. Однако механизмы, отвечающие за улучшение свойств полимерных нанокомпозитов, остаются малоизученными. Атомистическое компьютерное моделирование позволяет исследовать взаимодействие полимера с нанонаполнителем, чтобы установить пути улучшения эксплуатационных свойств полимерных нанокомпозитов.

В данной работе представлены результаты атомистического компьютерного моделирования моделей трех термостойких ПИ на основе диамина 4,4'-диаминодифенилоксида (ДАДФЭ) и трёх диангидридов: бензол-1,2,4,5-тетракарбоновой кислоты (ПМ), бензол-1,2,4,5-тетракарбоновой кислоты (ДФО) и 1,3-бис-(3',4'-дикарбоксифенокси)бензола (Р). Для исследования взаимодействия на границе раздела фаз «полимер-нанонаполнитель» были использованы методы квантовой химии (КХ) и молекулярной динамики (МД). С помощью методов КХ с использованием DFT были рассчитаны энергии взаимодействия между мономерными звеньями ПИ и поверхностью наночастиц оксидов металлов. Для анализа влияния полимерных эффектов на адсорбцию ПИ на поверхности наночастиц было выполнено атомистическое моделирование методом МД.

Гибкость фрагментов диангидрида в полииимидах ПМ-ДАДФЭ, ДФО-ДАДФЭ и Р-ДАДФЭ влияет на энергию адсорбции на оксидах алюминия и железа. Более «гибкие» полииимиды ДФО-ДАДФЭ и Р-ДАДФЭ образуют больше водородных связей и имеют более высокую энергию адсорбции. «Жесткий» диангидрид ПМ-ДАДФЭ ограничивает конформационные изменения и уменьшает количество водородных связей. Атомистическая МД подтвердила влияние гибкости полимерной цепи на энергию адсорбции полимеров на наночастицах оксидов металлов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (Соглашение № 24-73-10216, <https://rscf.ru/project/24-73-10216/>).

ИНТЕРПРЕТИРУЕМОСТЬ СКРЫТОГО ПРОСТРАНСТВА ЯЗЫКОВОЙ МОДЕЛИ ПОСРЕДСТВОМ ШТРАФА ЗА НЕДИАГОНАЛЬНЫЕ ВЕСОВЫЕ МАТРИЦЫ

Нам Е.В., Дин Е., Серов Н.С.

*НИУ ИТМО, 197101, Санкт-Петербург,
Кронверкский проспект 49 лит. А*

Работа посвящена разработке модели для получения стабильных, независимых от задачи и интерпретируемых эмбеддингов пептидов.

Предлагаемая архитектура представляет собой автоэнкодер с BiLSTM. Функция потерь включает компонент InfoNCE для выравнивания скрытого пространства с “one-hot” представлением пептидов и штраф на недиагональные весовые матрицы, обеспечивающий распутывание признаков. Качество эмбеддингов оценивалось на четырех датасетах по активности пептидов (таблица 1). Интерпретируемость количественно характеризовалась через матрицу Яакби с последующей оценкой диагональности как отношения суммы диагональных элементов к сумме всех элементов. Результаты демонстрируют сравнимую стабильность эмбеддингов при повышенной интерпретируемости (достигнутая диагональность - 49%) и значительно меньшем числе обучаемых параметров. Работа показывает возможность разработки параметр эффективных моделей в задаче обучения представлений для пептидов.

Таблица 1. Результаты валидации. АДП - антидиабетические, ПВП - противовоспалительные, АМП - antimикробные, АОП - антиоксидантные пептиды.

Модель	Количество параметров	Датасет (MCC ↑)				Среднее
		АДП	ПВП	АМП	АОП	
ESM-C ¹	600.000.000	0,433	0,193	0,679	0,761	0,517
Ankh ²	1.150.000.000	0,574	0,335	0,614	0,863	0,596
ProtT5 ³	3.000.000.000	0,659	0,402	0,686	0,893	0,660
dcBiLSTM-AE (наша)	90.000	0,327	0,337	0,599	0,750	0,503

Литература

1. ESM Team. Esm cambrian: Revealing the mysteries of proteins with unsupervised learning, 2024.
2. Elnaggar A. et al. Ankh: Optimized protein language model unlocks general purpose modelling. arXiv preprint arXiv:2301.06568, 2023.
3. Elnaggar A. et al. Prottrans: Toward understanding the language of life through self-supervised learning. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 44(10):7112–7127, 2022.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы академического лидерства “Приоритет 2030”, №925051

КОНВЕРТАЦИЯ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЯРНОГО КРИСТАЛЛА В ГРАФ ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Насырова Д.И., Миняев М.Е., Анаников В.П.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук,
119991, Ленинский просп., 47, Москва, Россия*

Графы являются наиболее подходящим типом данных для представления кристаллической структуры. В последние годы именно они широко используются для обучения нейронных сетей, создавая векторные вложения, оптимизированные для задач прогнозирования на последующих этапах¹.

Актуальной задачей является автоматическая конвертация структуры молекулярного кристалла, полученной методом рентгеноструктурного анализа, в граф, а также его дальнейшее использование в машинном обучении. В нашей работе мы сконцентрировались на создании алгоритма, способного учитывать как ковалентные, так и невалентные взаимодействия в кристалле при построении графа.

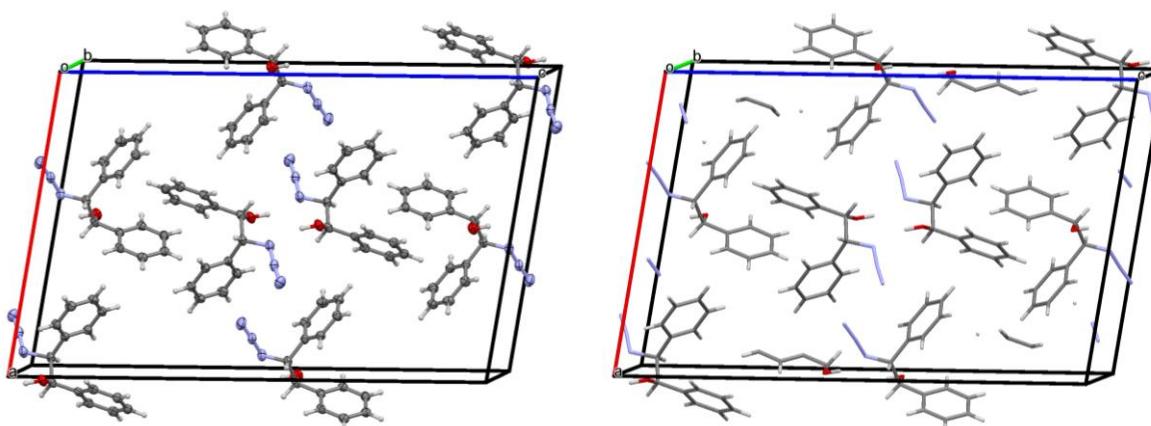


Рисунок 1. Кристаллическая ячейка пробного образца (слева).
Модифицированная кристаллическая ячейка, учитывающая короткие контакты с
соседними ячейками (справа).

При конструировании алгоритма были использованы стандартные пакеты языка программирования Python3.

Литература

1. Xie, T.; Grossman, J. C., Crystal Graph Convolutional Neural Networks for an Accurate and Interpretable Prediction of Material Properties. *Physical Review Letters* **2018**, *120* (14), 145301.

СОЗДАНИЕ БАЗЫ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ ПРОЦЕССА ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО ЭЛИМИНИРОВАНИЯ ДЛЯ СИСТЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Наумович В.О., Гордеев Е.Г., Анаников В.П.

ФГБУН Институт органической химии Н. Д. Зелинского РАН
119991 Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 47

Реакции кросс-сочетания, катализируемые комплексами палладия, лежат в основе многих современных синтетических методик. Одной из стадий этих процессов является восстановительное элиминирование (ВЭ)¹. В данной работе разрабатывается база данных термохимических данных ВЭ, полученных методами квантовой-химии. База данных содержит энергию активации и энергию реакции для ВЭ в комплексах Pd(II) с различными органическими заместителями (схема 1). Результаты являются основой для моделей машинного обучения, способных прогнозировать энергетические параметры и структуру комплексов в стационарных точках на пути реакции ВЭ².

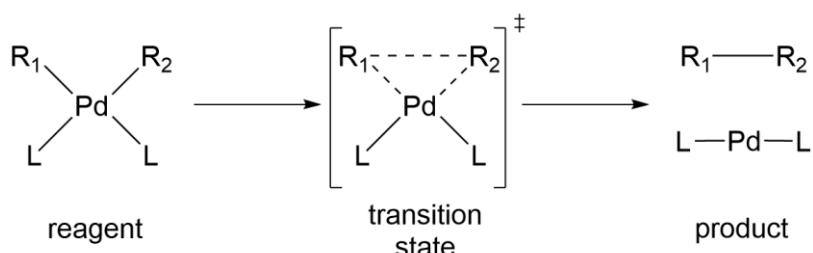


Схема 1. Стадия восстановительного элиминирования

В качестве сочетающихся групп R₁ и R₂ были выбраны 66 групп, включающих в себя алкилы, алкенилы, алкинилы, аминогруппы, арилы, гетероариды, насыщенные гетероциклы и цианогруппу (L = PMe₃; PPh₃). База данных будет содержать данные о более чем 4000 реакций ВЭ. В данной работе, была разработана методика автоматической генерации структур каждого из комплексов. После построения первичных структур на основе SMILES, происходит предварительная оптимизация их геометрии методами молекулярной механики и полуэмпирическими методами. На завершающем этапе выполняется оптимизация комплексов квантово-химическими методами, в результате которой формируется массив данных для базы данных.

Литература

1. Gordeev E.G., Musaev D.G., Ananikov V.P. *Organometallics*, 2024, **43**, 1-13.
2. Ananikov V.P. *Chemistry Today*, 2024, **42(4)**, 14-15

МОДИФИКАЦИЯ ПАЛЛАДИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ННС-КАРБЕНАМИ ДЛЯ ИЗБИРАТЕЛЬНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ ТЕРМИНАЛЬНЫХ ОЛЕФИНОВ

**Паршин Т.В., Шайдуллин Р.Р.,
Галушко А.С., Анаников В.П.**

*Институт Органической Химии им. Н. Д. Зелинского РАН,
119991, Москва, Ленинский проспект, 47*

В современном органическом синтезе одной из главных проблем остаётся селективное восстановление ненасыщенных связей в зависимости от расположения в структуре молекулы. Данное исследование направлено на синтез, изучение и оптимизацию новых гетерогенных катализаторов на основе палладия, а также проведения скрининга с большим числом субстратов, в том числе изучение кинетики реакций.

В качестве исходного катализатора были выбраны многостенные нанотрубки с нанесенными наночастицами палладия. Модификация проводилась нанесением ННС-карбенами: лучшей селективностью обладала каталитическая система Pd/MWCNT@iMes. Данная селективность проявляется и в некоторых реакциях кросс-сочетания (например, реакция Сузуки-Мияуры), где комплекс Pd/MWCNT@iMes вновь продемонстрировал высокую селективность по отношению к реагентам.

Таким образом, гетерогенные катализаторы модифицированные ННС-карбенами могут стать прорывными для проведения селективного восстановления в присутствии нескольких кратных связей, позволяя гидрировать исключительно терминальные кратные связи без использования защитных групп или мягких восстановителей.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант 24-43-02042).

ИНЖЕНЕРИЯ ДЕФЕКТОВ В НАНОЧАСТИЦАХ LiNbO₃ ДЛЯ АДСОРБИИ ОРГАНИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ

Мартынов И.В.,^a Позов Б.Е.,^a Завидовский И.А.,^a
Целиков Д.И.,^b Пугачевский М.А.,^b Арсенин А.В.,^a Сюй А.В.^a

^a МФТИ, Физтех, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д.9.

^b Институт инженерной физики для биомедицины (ИФИБ),
НИЯУ МИФИ, г. Москва, Каширское шоссе, 31

^bЮго-Западный государственный университет, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94

Современные промышленные процессы требуют разработки новых стратегий очистки сточных вод от стойких синтетических красителей. В данной работе предложен механохимический подход к инженерии дефектной структуры наночастиц ниобата лития (LiNbO₃), позволяющий перейти от классической неселективной адсорбции к доминирующей хемосорбции.

Установлено, что контролируемое создание дефицита лития и кислородных вакансий в кристаллической решетке приводит к формированию на поверхности координационно-ненасыщенных центров Nb⁵⁺. Данные активные центры выступают в качестве ловушек для молекул красителей, что обеспечивает прочное химическое связывание и кардинальное улучшение сорбционных характеристик. В результате адсорбционная ёмкость материала по отношению к метиленовому синему увеличилась в 25 раз (с 4 до 100 мг/г) при эффективности удаления до 96.8%.

Важно отметить, что высокая сорбция катионного красителя наблюдается несмотря на значительный отрицательный дзета-потенциал поверхности наночастиц (-40.3 мВ), что указывает на превалирование локальных хемосорбционных взаимодействий над общим электростатическим отталкиванием. Параллельно с инженерией дефектов метод синтеза обеспечивает формирование монодисперсных наночастиц (28.8 нм) и позволяет настраивать оптоэлектронные свойства за счет синергии квантового ограничения и гибридизации дефектных орбиталей, что выражается в расширении запрещенной зоны с 3.28 до 4.13 эВ.

Таким образом, работа демонстрирует, что целенаправленное создание атомного беспорядка является эффективным инструментом дизайна функциональных материалов с программируемыми свойствами для применения в области энвироники.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 25-79-10108

**ОБРАТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ СУРРОГАТНОЙ
ML-МОДЕЛИ: КАЛИБРОВКА КИНЕТИЧЕСКИХ
ПАРАМЕТРОВ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СХЕМЫ
НА ПРИМЕРЕ ПРОИЗВОДСТВА LDPE**

**Проломов И.В.,^{a,b} Рожков Д.Е.,^a Бойко К.В.,^a
Исаков Д.А.,^a Тарасов И.В.,^a Янилкин А.В.,^a Сиротин И.С.^a**

^aПИШ ХИМ, Российский химико-технологический университет

им. Д. И. Менделеева, Москва,

^bИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва

Калибровка внутренних параметров сложных физико-химических моделей (скрытых кинетических/массо- и теплообменных констант) в химико-технологическом ПО традиционно формулируется как обратная задача, представляемая в виде подбора внутренних параметров, путем однопараметрической оптимизации, до достижения целевых значений отдельных выходных показателей, при заданных управляемых параметрах. В таком подходе задача многопараметрической калибровки модели делает процедуру её настройки трудозатратной для пользователя и чувствительной к начальному приближению. В данной работе мы предлагаем подход для переноса оптимизации внутренних параметров с модельной схемы на ML-суррогат, обученный на результатах работы модельной схемы.

Для демонстрации разработанного подхода использована модель производства LDPE из стандартного набора Aspen Plus 14. На данных 10 000 симуляций обучены две ML-модели: нейронная сеть и градиентный бустинг в режиме прямого отображения «управляемые + внутренние параметры → выходные показатели». Затем эти модели применены в semi-inverse постановке: при фиксированных управляемых параметрах подбирались внутренние параметры, минимизирующие невязку по заданным целевым выходам. Найденные значения сравнивались с внутренними параметрами, использованными при симуляции. Бустинг показал приемлемые результаты воспроизводимости ($R^2 \approx 0,79$), нейросеть — превосходные ($R^2 \approx 0,99$).

Полученные результаты демонстрируют, что обе ML-модели качественно аппроксимируют исходную модельную схему в прямом режиме работы: нейронная сеть — $R^2 \approx 0,89$, бустинг — $R^2 \approx 0,90$. Суррогатная модель на основе нейронной сети позволяет проводить калибровку внутренних параметров значительно эффективнее за счёт наличия аналитических градиентов, тогда как у бустинга градиенты вычисляются численно. Использование аналитических производных в задаче обратного моделирования снизило численный шум, что обеспечило более высокое качество восстановления внутренних параметров.

IN SILICO ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ НАФТИЛСОДЕРЖАЩИХ ТИОСЕМИКАРБАЗИДОВ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫХ ПРОТИВОТУБЕРКУЛЁЗНЫХ АГЕНТОВ

**Пустолайкина И.А.^а, Курманова А.Ф.^а,
Рахимжанова А.С.^а, Музапаров Р.А.^а, Фазылов С.Д.^б**

^а Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А.Букетова, 100024, Казахстан, Караганда, улица Университетская, 28,

^б ТОО «Институт органического синтеза и углехимии РК», Казахстан,
100001, Караганда, улица Алиханова, 1

На базе Института органического синтеза и углехимии РК был осуществлён синтез и характеристизация пяти новых нафтилсодержащих производных тиомочевин и тиосемикарбазидов 1–5, потенциально обладающих максимальной терапевтической активностью и широким спектром действий.

Вновь синтезированные соединения 1–5 были подвергнуты *in silico* оценке биологической активности с использованием ИИ-аналитики и молекулярного докинга. Конформационный анализ на платформе Conf-GEM (<https://confgem.cmdrg.com>) [1] с применением силового поля MMFF94 [2] позволил определить наиболее стабильные структуры, которые затем были преобразованы в 3D модели. Эти модели использовались для прогнозирования активности на платформе PASS Online (<http://way2drug.com/PassOnline/predict.php>) [3] и последующего молекулярного докинга с белками PknB, DprE1 и InhA (PDB ID: 2FUM, 6HEZ, 1ENY) с помощью программы AutoDock Vina. Все соединения показали антимикобактериальный потенциал, особенно соединения 3–5, продемонстрировавшие более высокое сродство к мишениям по сравнению с стандартными противотуберкулезными препаратами изониазид и рифампицин.

Литература

1. Yang Z., Xu Y., Pan L., Huang T., Wang Y., Ding J., Wang L., Xiao J. Conf-GEM: A geometric information-assisted direct conformation generation model // Artificial Intelligence Chemistry. 2024. Vol. 2, No. 2. P.
2. Halgren T.A. Merck molecular force field. I. Basis, form, scope, parameterization, and performance of MMFF94 // Journal of Computational Chemistry. 1996. Vol. 17, No. 5–6. P. 490–519.
3. Poroikov V.V., Filimonov D.A., Gloriozova T.A., et al. Computer-aided prediction of biological activity spectra for organic compounds: the possibilities and limitations // Russian Chemical Bulletin. 2019. Vol. 68. P. 2143–2154.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан, проект № AP23488790.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОКТЕЙЛЯ ФОТОКАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ 3DPA₂FBN

Путилин К.В.^{1,2}, Чадин А.А.^{1,2},
Шлапаков Н.С.², Анаников В.П.²

¹ Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова,
 Москва, ул. Колмогорова, 1, стр.3

² Институт Органической Химии им. Н. Д. Зелинского,
 Москва, Ленинский проспект, 47 стр.1

Фоторедокс-катализ является интенсивно развивающейся областью современной химии и находит широкое применение в органическом синтезе. Последние исследования показывают, что зачастую в условиях фотохимических реакций фотокатализаторы подвержены процессам деградации. Изучение фотодеградации для нашедших широкое применение цианареновых фотокатализаторов при помощи ТСХ показало, что только для 3DPA₂FBN образуется устойчивый коктейль фотокатализаторов. Подробное исследование коктейля фотокатализаторов, образующегося из 3DPA₂FBN, показало, что он является смесью продуктов циклизации (Рисунок 1), каждый из которых вносит свой вклад в общую катализическую активность [1]. При помощи ТСХ был рассмотрен процесс деградации 3DPA₂FBN в некоторых растворителях и в присутствии различных оснований, а также в ходе нескольких фотокатализических реакций. Далее на примере модельной реакции присоединения малонового эфира к стиролам при помощи ГХ-МС была определена катализическая активность основных форм фотокатализатора. Также при помощи ТСХ были проанализированы взаимопревращения форм фотокатализатора, происходящие в реакционной смеси.

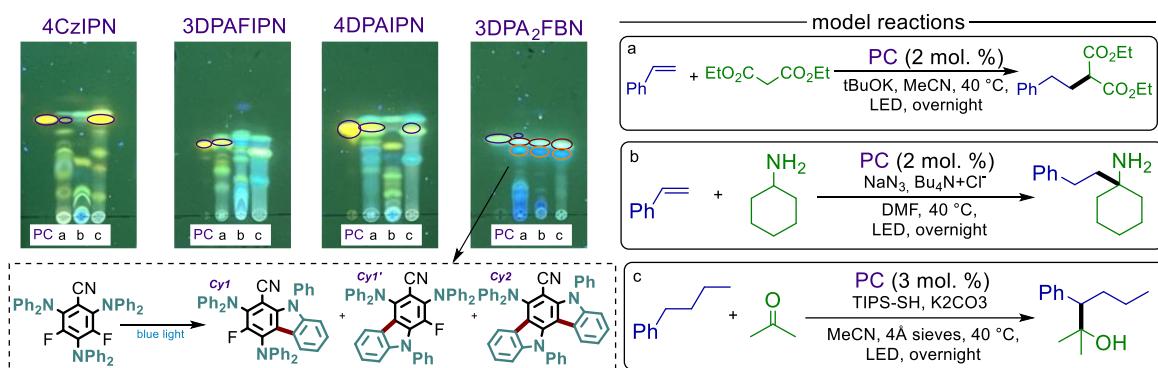


Рисунок 1. Сравнение процессов деградации цианаrenовых фотокатализаторов.

Литература

1. Shlapakov N.S., Chadin A.A., Kobelev A.D., Putilin K.V., Korshunov V.M., Burykina J.V., Taydakov I.V., Ananikov V.P. Cocktail of photocatalysts forming from 3DPA₂FBN [manuscript in preparation]

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-13-00099.

СИНТЕЗ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА АЛЮМИНАТОВ $(\text{Gd}, \text{Y})\text{AlO}_3$, АКТИВИРОВАННЫХ ИОНАМИ Eu^{3+}

Разумова Я.Е., Мишенина Л.Н.

*Национальный исследовательский Томский государственный университет,
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36*

Поиск и усовершенствование новых люминофоров представляют собой актуальную научно-практическую задачу, которая является ключевой для развития технологий твердотельного освещения. Одной из основных проблем, ограничивающих качество белых светодиодов, является недостаточная эффективность эмиссии в красной области спектра, приводящая к низким значениям индекса цветопередачи и смещению координат цветности. Решением данной проблемы может быть применение алюминатов редкоземельных элементов (РЗЭ) со структурой перовскита, их кристаллическая решетка состоит из октаэдров $[\text{AlO}_6]$, соединенных вершинами, образующих полости, в которых располагаются ионы-активаторы европия (III), демонстрирующие интенсивные полосы излучения в красной части спектра.

В данной работе в качестве матриц выбраны ортоалюминаты иттрия и гадолиния с пространственной группой $Pbnm$, в которых ион активатора оказывается в нецентросимметричной позиции C_s , что благоприятно сказывается на красной люминесценции из-за снятия запрета Лапорта¹, и как следствие усилению переходов $^5\text{D}_0 - ^7\text{F}_2$ и $^5\text{D}_0 - ^7\text{F}_4$.

С использованием нитрат-цитратной технологии получен ряд твердых растворов замещения составов $\text{Gd}_{1-x}\text{Eu}_x\text{AlO}_3$, $\text{Gd}_{1-y-0,5x}\text{Y}_{y-0,5x}\text{Eu}_x\text{AlO}_3$, где $x = 0,02; 0,05; 0,08; 0,09; 0,1; 0,12; 0,15$; $y = 0,125; 0,25$. Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии подтверждено, что европий в люминофорах находится в трехвалентном состоянии. Установлено, что максимальная интенсивность люминесценции достигается при содержании Eu^{3+} 8 мол. % ($\lambda_{\text{возб.}} = 275$ нм), причем наибольшей интенсивностью свечения обладает люминофор на основе твердого раствора $\text{Gd}_{0,835}\text{Y}_{0,085}\text{Eu}_{0,08}\text{AlO}_3$, дальнейшее увеличение концентрации приводит к концентрационному тушению люминесценции по мультипольному механизму. На основании анализа спектров люминесценции и кинетики затухания показано, что при концентрации европия (III) выше 10 мол. % происходит увеличение вероятности безызлучательных переходов, что приводит к снижению квантовой эффективности.

Литература

1. Binnemans K. Coordination Chemistry Reviews, 2015, **295**, 1.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы развития Томского государственного университета (Приоритет-2030)

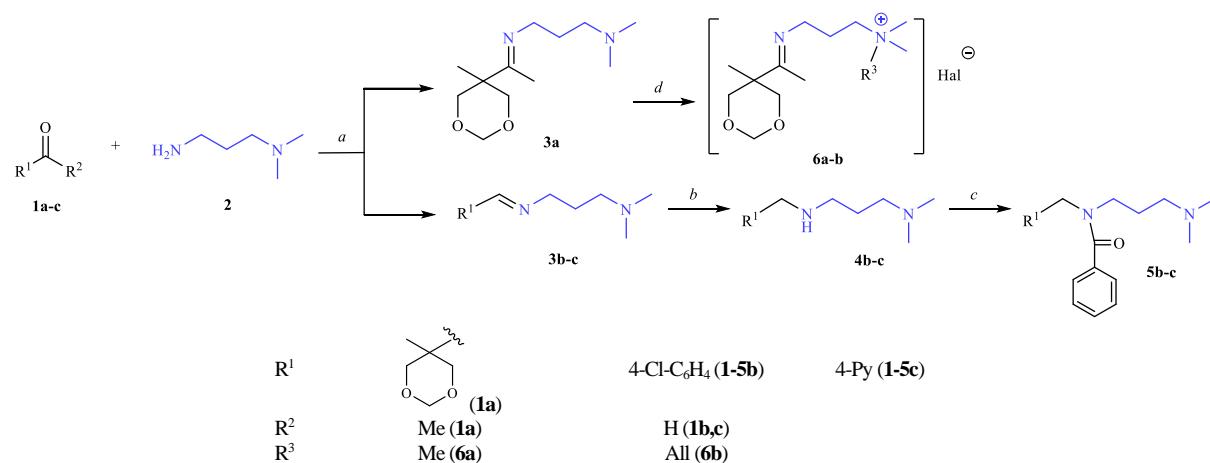
ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ КАРБОНИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ DMAРА И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ АМИНОВ И ЧАС НА ИХ ОСНОВЕ

**Акимова Е.С., Березняк Я.С.,
Султанова Р.М., Раскильдина Г.З.**

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,
450064, Уфа, Космонавтов 1*

Диметиламинопропиленамин (DMAРА) широко используется для функционализации различных фармакологически активных и важных, с медицинской точки зрения, соединений, а также при получении ПАВ, обладающих антимикробным действием.

В настоящей работе конденсацией карбонильных соединений 1a-c с N,N-диметилпропилендиамином 2 в среде бензола получены основания Шиффа 3a-c. Кватернизацией амина 3a CH₃I или Br-All синтезированы четвертичные аммонийные соли 6a,b. Восстановление иминов 3b,c в смеси NaBH₄ и CH₃COOH с последующим ацилированием аминов бензоилхлоридом привело к образованию амидов 5b,c – стартовых реагентов для получения ЧАС.



Условия и реагенты: а) бензол, КУ-2-8, 80°C, б) NaBH₄+CH₃COOH, бензол, 25°C, б)
C₇H₅ClO, K₂CO₃, бензол, 80°C, д) МТБЭ, CH₃I, Br-All, 25°C

Согласно результатам, молекулярного докинга, все синтезированные соединения проявляют высокую биологическую активность в отношении штаммов *E. coli*, *C. albicans*, *S. Aureus*.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR — 2025-0001 «Нефтехимические реагенты, добавки и материалы».

РАЗРАБОТКА ПОЛЬЗОВАТЕЛЬСКИХ ИНТЕРФЕЙСОВ К ИИ МОДЕЛЯМ В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

**Рыжов А.П.,^a Карпов К.В.,^a Королев В.В.,^б
Елисеев А.А.,^{a,б} Митрофанов А.А.,^{a,б}**

^aХимический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова

119234, Москва, тер. Ленинские Горы, дом 1

*^б Институт искусственного интеллекта МГУ им. М. В. Ломоносова,
119899, г. Москва, Ленинские горы*

Стремительное развитие ML-моделей открывает возможности для предсказания свойств химических соединений и материалов, однако их практическое применение ограничено: большинство моделей доступны лишь в виде исходного кода, требуя от химиков и материаловедов специализированных программных и аналитических навыков. Вследствие этого многие полезные инструменты остаются невостребованными вне круга их разработчиков.

Для преодоления «барьеров доступности» мы разработали интуитивно понятные веб-интерфейсы, превращающие сложные ML-пайплайны в практические инструменты и позволяющие исследователям использовать предиктивное моделирование без работы с кодом. В работе представлен подход на примере трёх возрастающих по сложности типов моделей: «состав–свойство» (температура плавления и механические свойства неорганических кристаллов), «кристаллическая структура–свойство» (проводимость кристаллов)¹ и «молекулярная структура + условия–свойство» (константы устойчивости металлоганических комплексов).²

Разработанные веб-интерфейсы обеспечивают доступ химикам к современным ML-моделям и поддерживают как исследовательские, так и образовательные сценарии. Важной особенностью является логирование пользовательских данных, превращающее интерфейсы из пассивных «калькуляторов» в активные источники данных для дообучения моделей. Наш подход был апробирован на трех классах моделей с различной сложностью входных данных: от предсказаний на основе химического состава до комплексных моделей, учитывающих кристаллическую или молекулярную структуру и условия эксперимента.

Литература

1. Dudakov I. V. et al. Examining proton conductivity of metal–organic frameworks by means of machine learning //Physical Chemistry Chemical Physics. – 2025. – Т. 27. – №. 14. – С. 6850-6857.
2. Karpov K. V. et al. Data-driven approach to the design of complexing agents for trivalent transuranium elements [Электронный ресурс] // arXiv. — 2025. — URL: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2509.21362>

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ФУНКЦИОНАЛА BHLYP ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ ТОЧНОСТИ TDDFT РАСЧЁТОВ СПЕКТРАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ СИСТЕМ С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА

Самолыга А.А.^{1,2}, Рыкова Е.А.¹

¹КККиФ НИЦ «Курчатовский институт», 123098 Москва, ул. Новаторов, д.74

²НИУ МФТИ, 141701 Долгопрудный, Институтский переулок, д.9

Предложен простой подход к точным расчетам длин волн флуоресценции систем с переносом заряда на основе TDDFT расчетов эксиплексов дибензоилметаната дифторида бора (DBMBF₂) с бензолом, алкилбензолами и пиридином с варьированием доли обменной энергии Хартри-Фока(HFX) в обменно-корреляционном функционале BHLYP.

Проанализированы два набора экспериментальных данных [1, 2] и подобраны значения HFX для наилучшего соответствия рассчитанных и экспериментальных длин волн флуоресценции. Получены зависимости для экспериментальных данных в двух растворителях, которые за две оптимизации геометрии позволяют получить оптимальный параметр HFX для точного расчета длины волны флуоресценции эксиплекса [3].

Изменение параметров квантовохимических расчетов в сочетании с использованием ИИ позволит увеличить точность рассчитанных величин за разумное время. «Ручной» анализ всех рассчитанных данных и выявление закономерностей при более строгом, чем в данной работе, подходе является трудоёмкой задачей, нивелирующей поставленную в работе цель – предсказание свойств молекулярных систем за разумное время без проведения дорогостоящих и затратных по времени экспериментов.

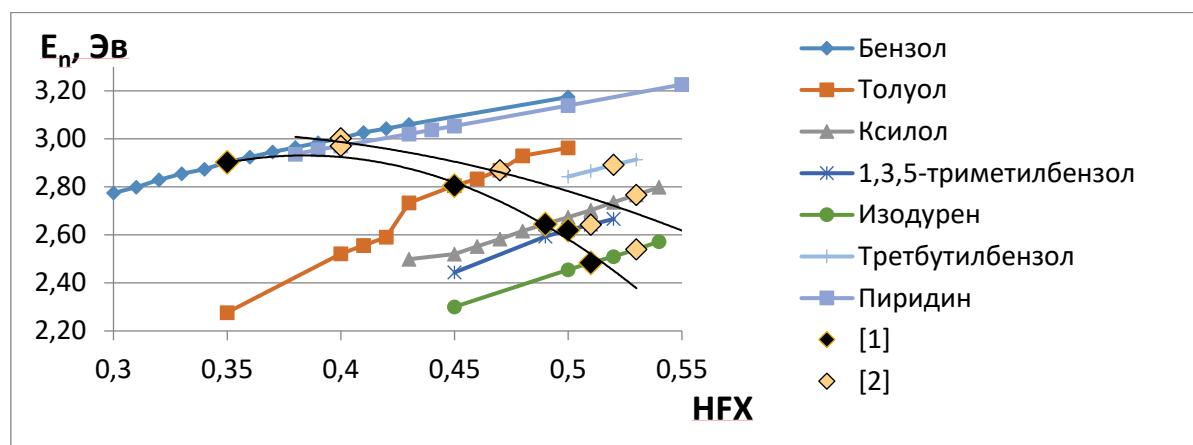


Рис. 1. Зависимость энергии вертикальных переходов (E_n) от HFX для эксиплексов.

Литература

1. P. Valat, V. Wintgens, Y. Chow, J. Kossanyi, *Can. J. Chem.*, **1995**, 73, 1902–1913.
2. Y. Chow, Zh.-L. Liu, C. Johansson, J. Ishiyama, *Chem. Eur. J.*, **2000**, 6, 2942–2947.
3. A. Samolyga, A. Safonov, E. Rykova, *Mendeleev Commun.*, **2024**, 34, 131–133.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 24-13-00443).

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ГРАФИТОВОМ
НОСИТЕЛЕ В ПРОЦЕССЕ РЕАКЦИИ ВЫДЕЛЕНИЯ ВОДОРОДА**

**Самороднова А.П., Хризанфоров М.Н.,
Галушко А.С., Скуратович А.В., Анаников В.П.**

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

Присущая наноразмерным электрокатализаторам нестабильность, особенно в сложных условиях реакции выделения водорода (РВВ), представляет собой критическое препятствие для их широкого применения в технологиях чистой энергии.[1] Традиционные пути деградации, такие как Оствальдовское созревание и агломерация частиц, обычно приводят к прогрессирующей потере каталитической активности. В данной работе сообщается об открытии принципиально иного явления: термодинамического процесса самосборки под действием потенциала, который преобразует разрозненные исходные структуры катализатора в единое, высокоактивное и стабильное конечное состояние. Начиная с матрицы из восьми различных прекатализаторов – одноатомных катализаторов (SAC) и наночастиц (NP) Fe, Ni, Pd и Pt, нанесенных на графит, показано, что все системы, подвергаемые РВВ в 0,5 M H₂SO₄, универсально сходятся к однородной архитектуре равноудаленных друг от друга наночастиц. Эта реструктуризация не является путём деградации, а представляет собой самооптимизирующийся активационный процесс, о чём свидетельствует значительное спонтанное увеличение плотности тока с течением времени. Сканирующая электронная микроскопия с идентичным расположением обеспечивает прямое визуальное подтверждение этой конвергенции, отслеживая рост SAC и изменение размера как мелких, так и крупных наночастиц до единообразного размера.

Литература

1. Qadeer M.A., Zhang X., Farid M.A., Tanveer M, Yan Y., Du S., Huang Z.-F., Tahir M., Zou Ji-J., A review on fundamentals for designing hydrogen evolution electrocatalyst. – J. Power Sources, 2024. – Vol.613 – Art. 234856.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РАСТВОРИМОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В РАЗЛИЧНЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ КОМБИНИРОВАННОЙ ГРАФОВОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТЬЮ

**Сидорова Э.С., Смирнова А.А.,
Карпов К.В., Митрофанов А.А.**

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр.3*

Растворимость – одно из ключевых свойств органических соединений, определяющее их применение в различных областях химических технологий, например, в катализе, гидрометаллургии, создании фармацевтических препаратов. В то время как растворимость воды сегодня хорошо определяется различными моделями машинного обучения, прогнозирование растворимости в органических растворителях представляет собой важную задачу.

В данной работе разработана модель машинного обучения, которая позволяет с точностью, превосходящей существующие аналоги, прогнозировать растворимость органических молекул в различных растворителях, основываясь на структурной формуле соединения и небольшом наборе данных о растворителе.

Модель обучалась и тестировалась на базе данных BigSolDB2.0¹. Архитектура содержит в себе два входа: графовая свертка кодирует структуру молекулы, а линейные слои обрабатывают признаки-описание растворителя. В работе была рассмотрена возможность использования различных теоретических и экспериментальных дескрипторов как входных данных для линейной части. Для интерпретации вклада признаков использовался метод SHAP². Коэффициент детерминации для всех моделей при прогнозировании logS, где S – растворимость в моль/л, составил более 0.94.

Отличительной особенностью разработанной модели является то, что в качестве информации о растворителе используются параметры, легко определяемые экспериментально (молярная масса, показатель преломления, температуры плавления и кипения и др.). Такой подход существенно облегчает ввод данных, так как модель основывается на информации «с этикетки на бутылке». Это делает модель доступной для химиков-практиков, а также открывает возможность для работы со смесями растворителей.

Литература

1. Krasnov L., Malikov D., Kiseleva M. et al. Sci Data, 2025, 12, 1236.
2. Strumbelj E., Kononenko I. J. Mach. Learn. Res., 2010, 11, 1.

НАНЕСЕННЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ВИДА Cu/C В РЕАКЦИЯХ ОБРАЗОВАНИЯ СВЯЗИ С-С И С-ГЕТЕРОАТОМ

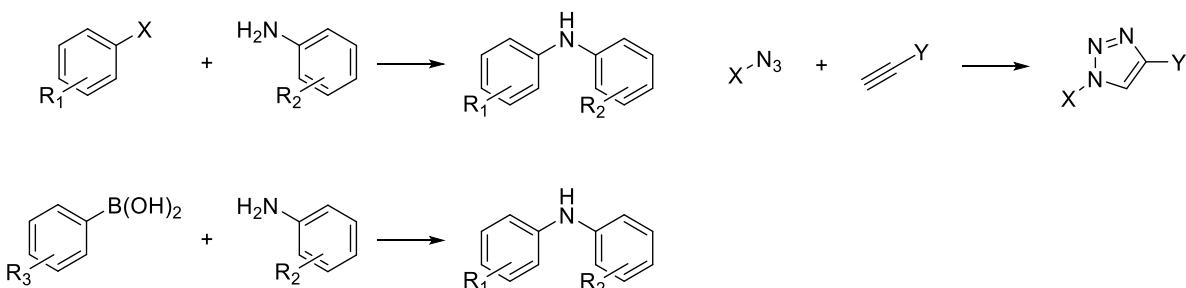
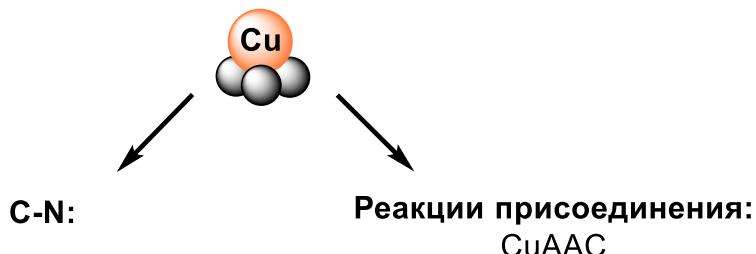
Скуратович В.А., Галушко А.С.

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

Медь — наиболее яркий представитель, способный заменить такие драгоценные и редкие металлы, как палладий, платина, золото в реакциях образования связей C—N, C—O и C—S в органическом синтезе. Однако, особенность электронного строения меди требует создания особых условий проведения синтезов и дизайна катализаторов, отличных от условий с вышеуказанными металлами.

Учитывая доступность меди и текущее научное и экономическое состояние (проблемы активности и селективности) использование наночастиц (Cu-NP) становится перспективным. Так на селективность реакции может влиять размер и форма наночастиц, влияние носителя. В данной работе будет рассмотрена катализическая активность различных медных наноразмерных катализаторов на графитовой подложке.

Однако наночастицы являются метастабильными из-за большой площади поверхности и стабилизируются за счет своего увеличения в растворе при получении. Таким образом селективность ограничена условиями получения разнообразных высокодисперсных наночастиц ограничено до некоторого минимального порога. Задачу по контролю размера медных наночастиц возможно решить используя самые современные подходы.



Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 23-13-00171.

ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ПЛАТФОРМА ДЛЯ ДОВУЗОВСКОЙ ПОДГОТОВКИ В ОБЛАСТИ ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Смирнова Н.В., Бринк И.Ю.

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

Подготовка кадров в области химии, химических технологий и новых материалов является одной из приоритетных задач для обеспечения устойчивого развития экономики и безопасности России. К сожалению, с каждым годом падает интерес школьников к химии, о чем свидетельствует число сдающих ЕГЭ по химии и уровень поступающих на химические направления подготовки. Особенно эта негативная тенденция проявляется в технических и технологических вузах. В определённой степени это обусловлено отсутствием разделов, посвященных химическим технологиям, в учебных планах и школьных учебниках по химии.

В ЮРГПУ(НПИ) разработана образовательная платформа «Химия и мы», которая представляет собой красочный стенд (рис. 1) для размещения в классах школы, техникумов и т.д., и обширных материалов в информационном пространстве (<https://www.npi-tu.ru/science/terra-politekh/khim-park/stend-khim>). В информационном пространстве в доступной для школьников форме представлены учебные материалы по основным современным и перспективным химическим технологиям. Переход из физического пространства в информационное осуществляется с помощью QR-кодов.

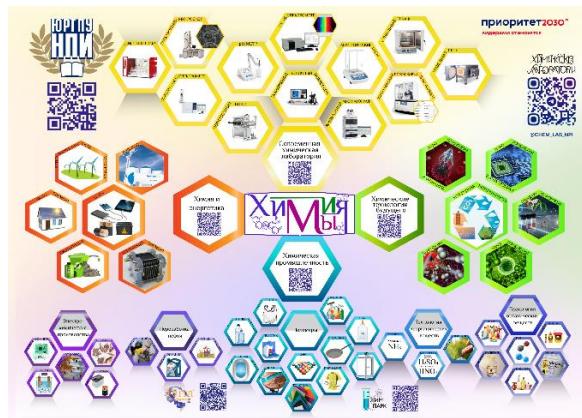


Рисунок 1. Стенд «Химия и мы»

Настоящая образовательная платформа помогает учителям химии дополнить образовательный процесс по химии отсутствующими в учебниках материалами, представленными в современном и более притягательном для молодежи цифровом формате.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЯЗЫКОВЫХ МОДЕЛЕЙ BERT ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ ПУБЛИКАЦИИ БАЗЫ ДАННЫХ ChEMBL ПО БИОЛОГИЧЕСКИМ АКТИВНОСТЯМ

**Смоляников С.К., Мрасов А.М.,
Панова М.В., Новиков Ф.Н.**

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект, 47*

Применение методов машинного обучения для предсказания свойств соединений сталкивается с проблемой неопределённости исходных экспериментальных данных¹. Особую остроту эта проблема приобретает в задачах предсказания биоактивности, где выбор надежных данных является ключевым фактором, лимитирующим точность и предсказательную силу моделей^{2,3}. Публичные базы данных, такие как ChEMBL, консолидирующие миллионы значений биоактивности из разнородных источников, требуют тщательной валидации. Проведённый анализ 354,923 пар «мишень-активность» выявил что порядка 75% от всех данных содержат критические ошибки. При этом лишь 4,1% измерений не имеют проблем с цитированием, что в совокупности с наличием дубликатов, ошибок аннотации и высокой вариабельности измерений указывает на системный характер проблемы.

Для её решения разработана комплексная процедура валидации, предусматривающая, помимо контроля стандартных артефактов данных, количественное определение платформенно-специфической вариабельности.

Разработанный метод позволяет формировать надёжные и стандартизованные наборы данных для обучения моделей, а также оценивать неопределённость при отсутствии множественных измерений, что заполняет существующий методологический пробел и способствует повышению воспроизводимости результатов в вычислительной химии.

Литература:

1. Wang T. et al. From aleatoric to epistemic: Exploring uncertainty quantification techniques in artificial intelligence //arXiv preprint arXiv:2501.03282. – 2025.
2. Kramer C. et al. The experimental uncertainty of heterogeneous public Ki data //Journal of medicinal chemistry. – 2012. – Т. 55. – №. 11. – С. 5165-5173.
3. Kalliokoski T. et al. Comparability of mixed IC50 data—a statistical analysis //PloS one. – 2013. – Т. 8. – №. 4. – С. e61007.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ДИАМАНОПОДОБНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ BN/ГРАФЕН

Суханова Е.В., Демин В.А.

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

После успешного синтеза диаманов^{1,2} – двумерных алмазоподобных наноматериалов, структура которых была предложена в 2009 г. Л.А. Чернозатонским³, началось активное изучение материалов данного семейства⁴. Изменение угла поворота между углеродными монослоями, типа функциональных групп и химического состава оказывает значительное влияние на свойства материала⁴. Особый интерес представляют диаманоподобные наноматериалы с монослоями различного химического состава, в частности ведется активное изучение наноматериалов на основе графена и гексагонального нитрида бора⁵.

В данной работе была исследована возможность образования диаманоподобных гибридных наноматериалов, состава $B_xN_xC_yH_z$ с использованием метода функционала электронной плотности⁶ и машинно-обучаемых потенциалов межатомного взаимодействия⁷.

Литература

1. Piazza F., Cruz K., Monthoux M., Puech P., Gerber I. Raman evidence for the successful synthesis of diamane. *Carbon*, 2020, **169**, 129–133.
2. Bakharev P.V., Huang M., Saxena M., Lee S.W., Joo S. H., Park S. O., Dong J., Camacho-Mojica D. C., Jin S., Kwon Y., Biswal M., Ding F., Kwak S. K., Lee Z. & Ruoff R. S. Chemically induced transformation of chemical vapour deposition grown bilayer graphene into fluorinated single-layer diamond, *Nature nanotechnology*, 2020, **15**(1), 59–66.
3. Chernozatonskii L.A., Sorokin P.B., Kvashnin A.G., Kvashnin D.G. Diamond-like C_2H nanolayer, diamane: Simulation of the structure and properties, *Jetp Letters*, 2009, **90**, 134–138.
4. Tiwari S.K., Pandey R., Wang N., Kumar V., Sunday O.J., Bystrzejewski M., Zhu Y., Mishra Y.K., Progress in Diamanes and Diamanoids Nanosystems for Emerging Technologies, *Advanced Science*, **9**(11), 2105770.
5. Demin V.A., Chernozatonskii L.A. Diamane-like Films Based on Twisted G/BN Bilayers: DFT Modelling of Atomic Structures and Electronic Properties, *Nanomaterials*, 2023, **13**(5), 841.
6. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set, *Computational materials science*, 1996, 6 (1), 15–50.
7. Mazitov, A., Bigi, F., Kellner, M., Pegolo, P., Tisi, D., Fraux, G., Pozdnyakov S., Loche P., Ceriotti. M. Pet-mad, a universal interatomic potential for advanced materials modeling, arXiv preprint arXiv:2503.14118. 2025.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект №24-22-00444.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ОПТОЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ МУЛЬТИРЕЗОНАНСНЫХ TADF-ЭМИТТЕРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГРАФОВЫХ И МУЛЬТИМОДАЛЬНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Таракановская Д.Д., Мостович Е.А.

Новосибирский государственный университет,
630090, Новосибирск, улица Пирогова, 2

Для создания органических светоизлучающих диодов (OLED) требуются узкополосные органические эмиттеры с шириной спектра излучения ≤ 15 нм. Достигнуть таких значений позволяют эмиттеры на основе мультирезонанса (MR), в которых, за счет различных резонансных эффектов атомов бора и азота, происходит разделение электронной плотности ВЗМО и НСМО и как следствие уменьшение разницы энергии синглет-триплет.¹ Разработка новых функциональных материалов остается крайне ресурсоемким и длительным процессом. Современные вычислительные подходы на основе нейронных сетей открывают новые перспективы для быстрого открытия и генерации новых органических молекул с заданными свойствами.²

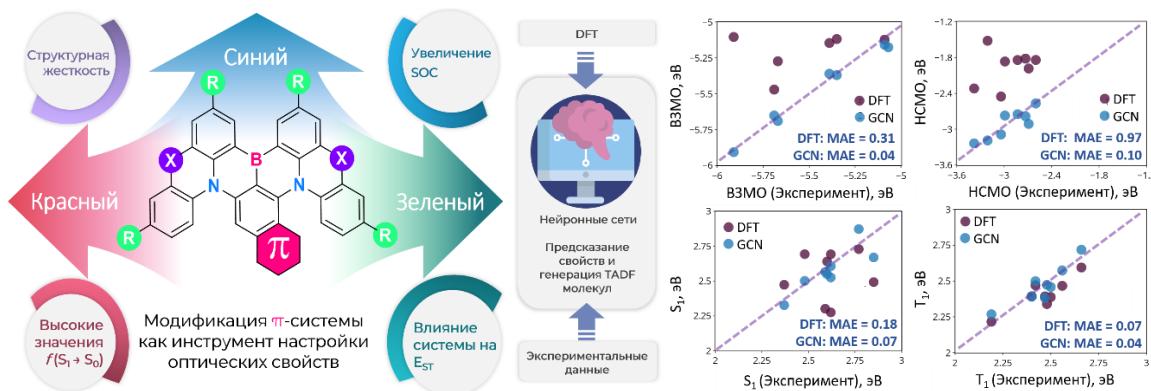


Рисунок 1. Схема исследуемых систем и их свойств (слева), сравнение прогнозирования ВЗМО, НСМО, S₁, T₁ с помощью DFT и GCN (справа).

Мы разработали серию MR-TADF эмиттеров на основе B,N-гетероаренов, которые различаются степенью структурного напряжения. Для повышения вычислительной эффективности и быстрого молекулярного скрининга мы внедрили графовую сверточную сеть (GCN)³ и мультимодальную трансформерную сеть для генерации TADF структур с заданными свойствами.

Литература

1. T. Hatakeyama , K. Shiren , K. Nakajima , S. Nomura , S. Nakatsuka , K. Kinoshita , J. Ni , Y. Ono and T. Ikuta , *Adv. Mater.*, 2016, **28**, 2777 —27811.
2. Chang, J., Ye, J.C., *Nat. Commun.*, **15**, 2323 (2024).
3. D. Tarakanovskaya, E. Mostovich, *J. Phys. Chem.*, 2025, **129**, 20, 4458–4470

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации No FSUS-2021-0014.

**АКТУАЛЬНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ ИСКУССТВЕННОГО
ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ ИНЖИНИРИНГА КОМПОЗИЦИОННЫХ
МАТЕРИАЛОВ-НАКОПИТЕЛЕЙ ВОДОРОДА
НА ОСНОВЕ МАГНИЯ**

**Терентьева Д.В., Врублевский Д.Б.,
Святкин Л.А.**

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
634050, Томск, проспект Ленина, 30*

Переход к возобновляемым источникам энергии определяет водород как одного из ключевых энергоносителей будущего. В этом контексте гидрид магния является перспективным материалом-накопителем водорода благодаря своей высокой теоретической гравиметрической водородной емкости, доступности металла и экологической чистоте. Однако его практическое применение осложнено высокой температурой десорбции и замедленной кинетикой процессов гидрирования/дегидрирования. Для преодоления этих ограничений активно разрабатываются подходы по модификации MgH_2 посредством введения каталитических добавок, таких как алюминий, никель и хром, выбор которых основан на их способности улучшать ключевые параметры материала. Для понимания причин улучшения свойств гидрида магния на атомарном уровне были выполнены теоретические расчеты из первых принципов в рамках теории функционала электронной плотности методом псевдопотенциала с использованием пакета программ ABINIT. Основная проблема заключается в том, что каждый тип добавки (Al, Ni, Cr) приводит к уникальному характеру взаимодействия водорода с ней на поверхности гидрида магния, что требует системного сопоставления и глубокого анализа всей совокупности информации о типах химических связей Mg–H и Me–H. Ручной анализ такого объема данных не позволяет эффективно систематизировать поведение разных металлов, установить количественные закономерности и определить, какие характеристики наиболее критично влияют на макроскопические эксплуатационные свойства гидрида магния. В связи с этим наиболее актуальным является применение нейросетевых алгоритмов и машинного обучения для систематизации и сопоставления данных по различным атомам добавок, извлечения значимых закономерностей, связывающих электронную структуру с конечными свойствами материала, а также создания моделей, способных прогнозировать эффективность композиционных материалов-накопителей водорода на основе гидрида магния.

Работа выполнена в рамках программы развития ТПУ, проект Приоритет-2030-ЭЭЗЦ-017-198-2025

**ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ИИ МЕТОДОВ В
ИССЛЕДОВАНИИ ПОВЕРХНОСТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ:
АДСОРБЦИЯ УГЛЕРОДА НА MgH₂(110)**

**Терентьева Д.В., Врублевский Д.Б.,
Святкин Л.А.**

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
634050, Томск, проспект Ленина 30*

Актуальная глобальная задача перехода к возобновляемым источникам энергии определяет водород как ключевой энергоноситель будущего. В этом контексте гидрид магния является одним из наиболее перспективных материалов-накопителей. Практическое применение MgH₂ ограничено высокой температурой десорбции водорода и низкой кинетикой процессов сорбции/десорбции водорода, что также обусловлено неравномерным теплообменом. Углеродные модификации поверхности MgH₂ рассматриваются для решения данной проблемы. Благодаря высокой теплопроводности и возможности формировать теплопроводящие пути (графеновые плёнки, углеродные нанотрубки) углерод снижает локальные температурные градиенты, что обеспечивает более однородный отвод/подвод тепла. Для этого были произведены расчеты энергии адсорбции атома углерода на поверхность MgH₂(110), произведен расчет переноса заряда по Бадеру, а также произведен анализ заселенности кристаллических орбиталей Гамильтона (СОНР). Основная проблема, возникающая в результате проведения расчетов из первых принципов, заключается в формировании многомерного объема данных. Поскольку в ходе исследования накапливается огромный объем данных о локальной плотности состояний атомов водорода и окружающих их атомов магния и углерода, а также о зависимости СОНР от энергии электронов для связей между этими атомами, о переносе заряда по Бадеру на атомах изучаемой системы, а также множество значений энергии связи атомов водорода, то ручной анализ такого массива данных является неэффективным и не позволяет выявить тонкие, но критически важные корреляции между типом химической связи, электронными характеристиками и конечными эксплуатационными свойствами материала. В связи с этим наиболее актуальным является применение нейросетевых алгоритмов и машинного обучения для систематизации, глубокого анализа и извлечения значимых закономерностей из большого объема данных, полученных из первых принципов, а также извлечения значимых закономерностей, присущих различным типам химической связи.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-79-10009,
<https://rscf.ru/project/25-79-10009/>*

РАЗРАБОТКА МЕЖАТОМНОГО ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЦЕОЛИТОПОДОБНЫХ ИМИДАЗОЛАТНЫХ КАРКАСОВ

**Моцейко А.А.,^a Гуда С.А.,^б
Гуда А.А.,^б Тер-Оганесян Н.В.^a**

^a*НИИ физики, Южный федеральный университет,*

344090, г. Ростов-на-Дону, просп. Ставки 194

^б*МИИМ, Южный федеральный университет,*

344090, г. Ростов-на-Дону, ул. Сладкова 178/24

Цинк-имидаолатные каркасы (например, ZIF-8) – класс материалов с высокой химической и термической стабильностью, уникальной пористостью и настраиваемой химией узлов/линкеров. Они являются перспективными для применения в таких областях, как, например, разделение газов и жидкостей, катализ, точечная доставка лекарств. Понимание ранних стадий кристаллизации в растворе критично для контроля морфологии, размера кристаллитов и дефектности. Современные обзоры подчёркивают сложность механизмов зарождения и роста ZIF-8, а также чувствительность к растворителю/ко-растворителям и pH¹.

Целью данной работы является создание машинно-обучаемого межатомного потенциала типа moment tensor potential (MTP)², пригодного для моделирования растворов H₂O – Zn²⁺ – 2-метилимидаолат-анион и начальных стадий самоорганизации ZIF-8 – от прекурсорных комплексов до пред-нуклеационных кластеров.

Начальная обучающая выборка для разработки потенциала получена при помощи молекулярно-динамического моделирования различных конфигураций атомов цинка и 2-метилимидаолов в растворителе с использованием вычислений методом теории функционала плотности. Дальнейшая тренировка потенциала проведена при помощи процедуры активного обучения.

Полученный межатомный потенциал использован для молекулярно-динамического моделирования структуры и свойств ZIF-8, а также начальных стадий его кристаллизации.

Литература

1. Allegretto J.A., Onna D., Bilmes S.A., Azzaroni O., Rafti M. Chem. Mater. 2024, **36**, 5814.
2. Shapeev A.V., Multiscale Modeling & Simulation 2016, **14**, 1153.
3. Novikov I.S., Gubaev K., Podryabinkin E.V., Shapeev A.V. Mach. Learn.: Sci. Technol. 2021, **2**, 025002.

НАПРАВЛЕННЫЙ ДИЗАЙН АНТИМИКРОБНЫХ НАНОЧАСТИЦ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

**Филиппова Д.С., Шанявская В.О.,
Малаховский М.А., Джякхво С.**

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

Антибиотическая резистентность определяется Всемирной Организацией Здравоохранения как одна из ключевых угроз здоровью населения. Бактерии вырабатывают резистентность к антибиотикам в результате нарушения схем лечения, что приводит к критическому снижению эффективности действия антибиотиков¹. В настоящий момент идет разработка альтернативных подходов лечения бактериальных инфекций, одним из которых является применение наночастиц металлов.

Для приближения к решению проблемы антибиотикорезистентности предложен инновационный подход к подавлению роста конкретных патогенных бактерий. Разработана платформа для скрининга наночастиц металлов, обладающих селективной антибактериальной активностью по отношению к патогенам. Платформа основана на комбинации генетического алгоритма с моделью машинного обучения (МО)².

Модель XGBRegressor была обучена на данных, включающих в себя условия эксперимента по оценке эффективности антибактериальных агентов, таксономические и геномные данные бактерий и молекулярные дескрипторы наночастиц. Коэффициент детерминации этой модели составил 0.82, среднеквадратичная ошибка равна 0.94, что говорит о высоком качестве предсказания модели.

Платформа позволяет генерировать параметры металлических наночастиц, которые селективно поражают конкретную патогенную бактерию, и при этом безопасны для полезных бактерий.

Определена селективная токсичность сферической наночастицы ZnO размером 30 нм и полученной химическим синтезом в отношении *S. aureus*. Наночастица избирательно поражает *S. aureus* при концентрации 2.39 мкг/мл и остается минимально токсичной для непатогенной бактерии *B. subtilis* при концентрации до 15.53 мкг/мл.

Литература

1. Antimicrobial Resistance Collaborators. *The Lancet*, 2022, 399(10325): P629-655.
2. S. Jyakhwo, V. Bocharova, N. Serov, A. Dmitrenko, V. V. Vinogradov, *Advanced Material Technology*, 2025, 10, 2400458.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы "Приоритет 2030".

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОАКЦЕПТОРНЫХ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ НА КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Au/BIAN-NHC КОМПЛЕКСОВ

**Ханипова А.М.^{a,b}, Паньков Р.О.^b, Сон А.Г.^b,
Прима Д.О.^b, Колесников А.Э.^b, Иванова Н.М.^b, Фахрутдинов А.Н.^b,
Миняев М.Е.^b, Анаников В.П.^b**

^aНациональный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
101000, Москва, Мясницкая, 20

^bИнститут органической химии имени Н.Д. Зелинского Российской академии наук,
11999, Москва, Ленинский проспект, 47

^bИнститут общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова Российской академии наук,
119071, Москва, Ленинский проспект, 31

Катализ является ключевым инструментом органического синтеза, обеспечивающим возможность протекания многих реакций. N-гетероциклические карбены (NHC) относятся к числу наиболее эффективных лигандов в металлоорганическом катализе благодаря возможности тонкой регуляции их электронных и стерических характеристик. В данной работе рассматриваются изменения электронных и стерических характеристики лиганда за счёт конденсации бис(имино)аценафтенового (BIAN)-фрагмента и введения электроноакцепторных заместителей в арильные кольца. Выбор в пользу золота(I) обусловлен уникальным сочетанием каталитической активности и избирательного воздействия на раковые клетки комплексов Au/NHC.

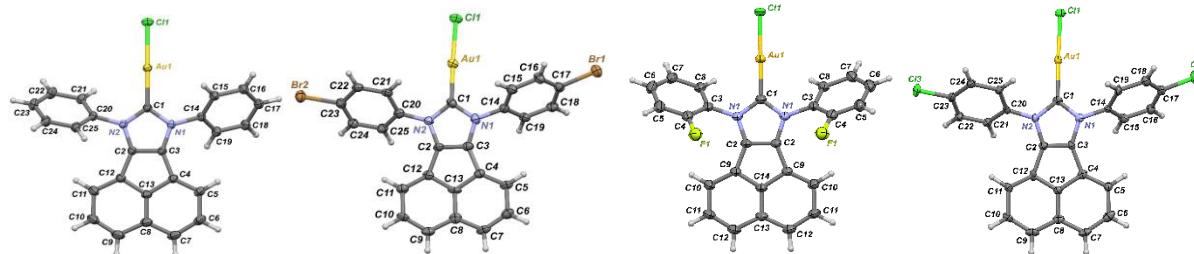


Рисунок 1. Структуры полученных соединений.

Целевые комплексы Au/BIAN-NHC были подробно изучены на всех этапах - от синтеза до каталитической активности и оптических свойств, благодаря чему выявлены закономерности влияния структурных изменений на свойства комплексов.¹

Литература

- Pankov R.O., Khanipova A.M., Son A.G., Prima D.O., Kolesnikov A.E., Ivanova N.M., Fakhruddinov A.N., Minyaev M.E., Ananikov V.P. Hybrid Tuning in NHC Ligands: Synergistic Effects of BIAN π -Conjugation and Aryl σ -Modulation in Gold(I) Complexes // Chemistry – A European Journal. – 2025. – P. e202501647.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-43-02042.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ СТЕКЛЯННЫХ МАТРИЦ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Ходько Н.С., Смирнова А.А., Митрофанов А.А.

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический
факультет, 119991, Москва, Ленинские горы д.1 стр.3*

Радиоактивные отходы (РАО) – это не подлежащие дальнейшему использованию вещества в любом агрегатном состоянии, материалы, изделия, оборудование, объекты биологического происхождения, радионуклидные источники, загрязненные объекты внешней среды, загрязненный грунт, в которых содержание радионуклидов превышает установленные нормами радиационной безопасности уровни. На сегодняшний день не существует способа полной ликвидации радиоактивных отходов поэтому обращение с ними является одной из самых важных проблем в области работы с радионуклидами.

Даже самые высокоеффективные методы концентрирования не позволяют полностью выделить все радионуклиды из РАО, что заставляет задумываться о создании иммобилизирующих матриц для безопасного хранения токсичных отходов. Перспективным материалом для этой роли являются стекла благодаря своей высокой физико-химической устойчивости. Однако процесс поиска подходящего состава классическими экспериментальными методами может оказаться недостаточно эффективным, поэтому в данной задаче можно воспользоваться методами машинного обучения.

Ввиду высокой радиоактивности отходов экспериментальная часть работы включает в себя исследование составов с использованием химических аналогов радионуклидов, в частности, Ce (IV) является химическим аналогом изотопов плутония.

В рамках проделанной работы были разработаны предиктивные модели, позволяющие прогнозировать температуру синтеза стеклянных матриц, значения динамических вязкостей расплава стекла при различных температурах, а также показатели выщелачивания для обширного класса кремниевых стекол. На их основе был создан генеративный алгоритм, подбирающий оптимальный состав с заданными характеристиками.

МАСКИРОВАННЫЕ АВТОЭНКОДЕРЫ КАК БАЗОВЫЕ МОДЕЛИ ИМДЖЕОМИКИ В СКАНИРУЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

**Холичева А.А.,^{a,b} Бойко Д.А.,^a Кашин А.С.,^a
Коломоец Н.И.,^a Анаников В.П.^{a,b}**

^a*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН,
119991, Москва, Ленинский проспект, 47*

^b*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
109028, Москва, Покровский бул., 11, с. 10*

*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
119234, Москва, ул. Ленинские Горы, д.1*

Электронная микроскопия – один из основных методов изучения объектов на микро- и наномасштабах, который применяется в химии, биологии и других областях естественных наук. Современные технологии позволяют накопить достаточно большой объём данных микроскопии, а развитие вычислительных методов дает возможность значительно ускорить их анализ.

Например, с помощью нейросетевых алгоритмов можно проводить классификацию изображений, искать на них объекты определенного типа, то есть решать задачи сегментации и детекции. В большинстве случаев, для решения каждой отдельной задачи требуются довольно большие наборы качественных размеченных данных. Однако, существует другой подход, который фокусируется на изучении общих свойств изображений, принадлежащих определенному домену, с помощью так называемых базовых моделей. Такая модель, обучившись на достаточно большом и разнообразном наборе данных, хранит внутри себя общие знания и паттерны о них, что дает возможность использовать ее для извлечения информативных признаков из изображений.

В данной работе представлен метод, основанный на использовании предобученного энкодера для получения высокоуровневых представлений данных и обучении на них простых и легковесных моделей для решения последующих задач. В качестве архитектуры для обучения был выбран маскированный автоэнкодер¹, который не требует наличия размеченных данных и повышает эффективность и масштабируемость моделей машинного обучения.

Литература

1. Kaiming He et al. Masked Autoencoders Are Scalable Vision Learners, *arXiv*, 2021. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2111.06377>

СИНТЕЗ СТРУКТУРНЫХ АНАЛОГОВ ФАЛЬКАРИНДИОЛА

**Хоружик С.А.^{a,b}, Козлов К.С.^b,
Ромашов Л.В.^b, Анаников В.П.^b**

^aМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр. 3

^bИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, 119991, Москва, Ленинский проспект, д. 47

Фитопатогенные грибы наносят значительный ущерб сельскому хозяйству. Применяемые в настоящее время фунгициды сталкиваются с проблемами роста устойчивости патогенов, загрязнения окружающей среды и потенциальных рисков для здоровья человека. Фалькариндиол является известным фунгицидом, проявляющим активность против грибков, поражающих морковь. В литературе описан синтез его структурного аналога, содержащего винильный и тиофеновый фрагменты. [1] В данной работе представлен синтез нового структурного аналога Фалькариндиола [2], в котором тиофеновый фрагмент заменён на фурановый. Кроме того, были получены производные, содержащие второй фурановый фрагмент вместо винильной группы (рисунок 1).

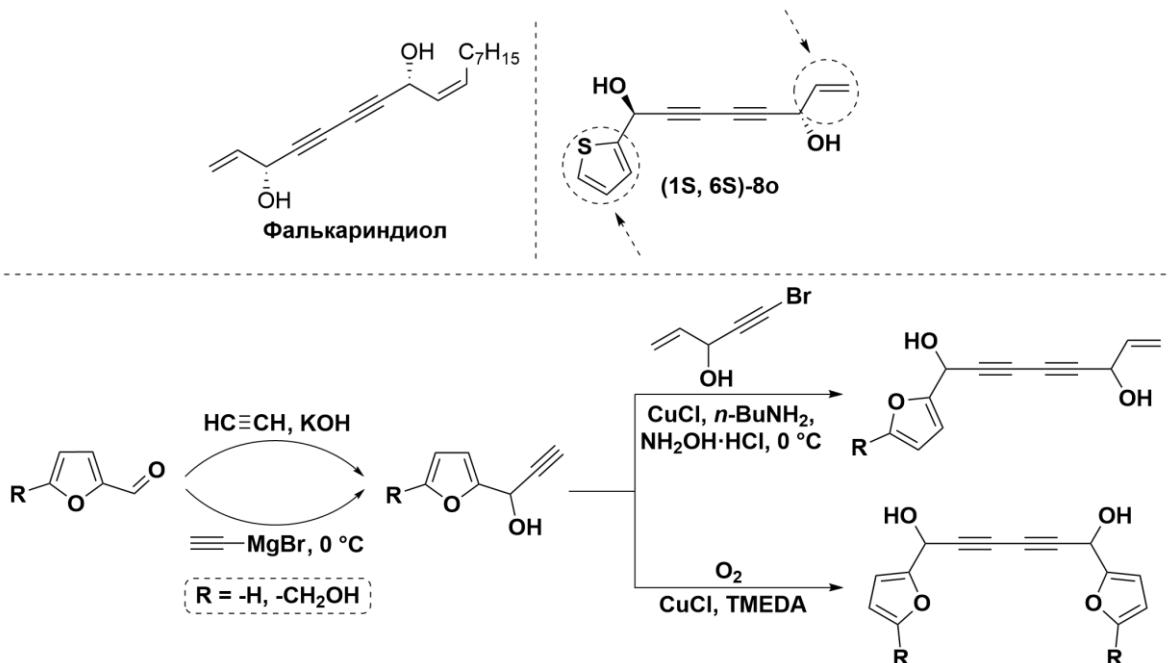


Рисунок 1. Схема синтеза.

Литература

- Zhao L. et al., Journal of Agricultural and Food Chemistry., **2023**, Т. 71., С. 9753-9761.
- Tomilin D. N. et al., Chemistry of Heterocyclic Compounds, **2013**, Т. 49., С. 341-344.

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ ПОДХОД К ПОИСКУ ОШИБОК В БАЗАХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ МЕТОДАМИ МАШИННОГО И ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ

**Хрисанфов М.Д.,^{a,б} Матюшин Д.Д.,^а
Самохин А.С.^{а,б}**

^а ИФХЭ РАН

Россия, 119071, г. Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4

^б МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет

Россия, 119991, г. Москва, Ленинские горы, д.1, стр. 3

В последнее время очистке данных уделяется все больше внимания, в том числе с использованием методов машинного и глубокого обучения. Ранее нами был предложен подход к обнаружению ошибочных записей в базах хроматографических данных, основанный на объединении предсказаний нескольких моделей путем голосования. Каждая из N моделей обучается на k -fold разбиении данных, где $k-1$ частей используют для обучения, одну - для предсказания. Эту процедуру проводят для каждой модели, чтобы получить N предсказанных копий исходного набора данных. В каждой копии выбирают определенную долю записей (например, 5%), предсказанных хуже всего, и отмечают их «желтой карточкой». Записи, получившие «желтые карточки» от каждой из моделей, потенциально являются ошибочными.

Подход применили к двум базам данных: экспериментальных времен (METLIN Small Molecule Retention Times)¹ и индексов удерживания (NIST Retention Index)². Для оценки эффективности предложенного подхода к фильтрованию сгенерировали две группы тестовых наборов данных – на основе автокорреляционных дескрипторов и квантовохимического набора QM9, в которые контролируемым образом добавили ошибки. Во всех рассмотренных случаях³ предложенный подход превзошел более простые способы фильтрования, например, основанные на использовании граничного значения абсолютной ошибки предсказания.

Литература

1. Khrisanfov M.D., Matyushin D.D., Samokhin A.S. A general procedure for finding potentially erroneous entries in the database of retention indices // Anal. Chim. Acta. 2024. Т. 1297. С. 342375.
2. Khrisanfov M., Matyushin D., Samokhin A. Finding potentially erroneous entries in METLIN SMRT // J. Chromatogr. A. 2025. Т. 1745. С. 465761.
3. Khrisanfov M., Matyushin D., Samokhin A. Towards robust databases: an ensemble-based workflow for error detection applied to chemical data. ChemRxiv, 2025.

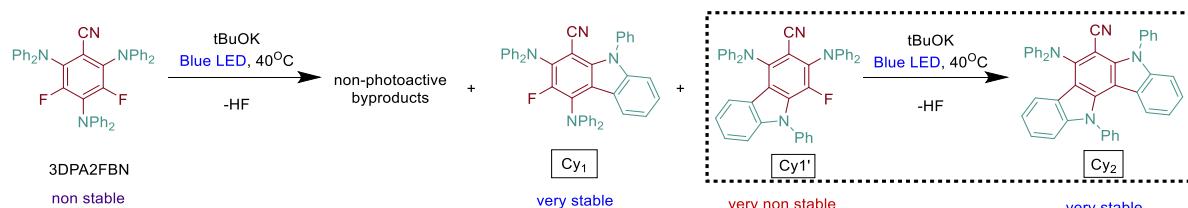
Данная работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках госбюджетной темы № 124041900012-4.

ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНАЯ ЦИКЛИЗАЦИЯ ЦИАНАРЕННОВОГО ФОТОКАТАЛИЗАТОРА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВИДИМОГО СВЕТА

**Чадин А.А., Шлапаков Н.С.,
Путилин К.В., Анаников В.П.**

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

Фоторедокс катализ – явление, позволяющее проводить селективно и эффективно химические превращения, недостижимые или труднодостижимые методами классической химии. Данное явление требует наличия в реакционной среде фотокатализатора – соединения, поглощающего излучение видимого света и переходящего в возбужденное состояние, частица которого обладает выраженнымми окислительными или восстановительными свойствами. Среди наиболее широко используемых фотокатализаторов выделяется группа цианареновых фотокатализаторов [1], среди которых можно выделить фотокатализатор 3DPA2FBN, обладающего повышенными восстановительными свойствами. Данные соединения в условиях фоторедокс каталитической реакции способны претерпевать реакции радикального замещения с образующимися в реакционной смеси радикалами, с образованием новых частиц, обладающих отличными от исходного фотокатализатора, свойствами.



Нами было обнаружено, что основным путем превращения в реакционной среде, для фотокатализатора 3DPA2FBN является внутримолекулярная циклизация, с образованием трех продуктов циклизации, отличающихся по своей стабильности в условиях фоторедокс каталитической реакции, по своим окислительно-восстановительным и спектральным свойствам. Методами времязарезенной UV-Vis спектроскопии и квантово-химическими расчетами было показано, что описываемая циклизация происходит из триплетных возбужденных состояний молекул [2].

Литература

1. Speckmeier, E.; Fischer, G.; Zeitler, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 15353-15365.
2. Shlapakov, N.; Chadin, A.; Kobelev, A.; Putilin, K.; Korshunov, V.; Kostyukovich, A.; Syroeshkin M.; Shaydullin R.; Burykina J.; Taydakov I.; Ananikov V. in preparation.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 24-13-00099.

РАЗРАБОТКА МАШИННО-ОБУЧАЕМЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ, ЯВНО УЧИТЫВАЮЩИХ ДИСПЕРСИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Чалых О.К.^а, Корогод Д.В.^{а,б,д}, Новиков И.С.^в,
Ходапп М.^г, Рыбин Н.Е.^{а,д}, Шапеев А.В.^{а,д}

^аСколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, территория инновационного центра “Сколково”, Большой бульвар, д. 30, стр. 1

^бМосковский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141701, Московская Область, Долгопрудный, Институтский переулок, д.9

^вНациональный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000, Москва, ул. Мясницкая, д. 20,

^гMaterials Center Leoben Forsching GmbH (MCL), Austria

^дЦифровые Материалы, 143001, Московская область,
Одинцово, ул. Кутузовская, д. 4A

Машинно-обучаемые потенциалы (MLIP-ы) позволяют проводить многомасштабное моделирование с точностью *ab initio* методов и с эффективностью (полу-)эмпирических силовых полей. Однако, их применимость к системам с сильными дальнодействующими взаимодействиями ограничена из-за использования радиуса отсечки.

В представленном исследовании¹ проводится анализ влияния явного учета дисперсионных взаимодействий в функциональную форму Moment Tensor Potential² и Equivariant Tensor Network³ для моделирования жидких тетрахлорметана, метана и толуола.

Полученные результаты показывают улучшение точности MLIP-ов при явном учете дисперсионных взаимодействий при радиусе отсечки потенциала 5–6 Å. Однако, для тетрахлорметана и метана улучшения точности можно достичь и при увеличении радиуса отсечки до 7.5 Å, в то время как для моделирования толуола учет дисперсионных взаимодействий остается важным. Точность MLIP-ов была проверена на диссоциационных кривых димеров, плотностей и функций радиального распределения.

Литература

1. Chalykh O., Korogod D., Novikov I.S., Hodapp M., Rybin N., Shapeev A.V. arxiv preprint arXiv:2504.15760
2. Shapeev A.V. *Multiscale Modeling & Simulation*, 2016, **14**, no.4, 1153
3. Hodapp M., Shapeev A.V. *Machine Learning: Science and Technology*, 2024, **5**, no.3, 035075

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РНФ, проект 23-13-00332 и COMET, проект 886385.

ДОСТУПНЫ ЛИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ БАРЬЕРЫ В 50–70 ККАЛ/МОЛЬ ДЛЯ РЕАКЦИЙ В ОРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ В РАСТВОРЕ

**Шайдуллин Р.Р., Галушко А.С.,
Анаников В.П.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, 119991, Россия*

Высокотемпературная органическая химия открывает перспективный подход к реализации реакционных путей, которые ранее считались недостижимыми в стандартных условиях.^{1,2} В данном исследовании представлен метод высокотемпературного синтеза, позволяющий проводить реакции в растворе при температурах до 500 °C.

На примере изомеризации N-замещенных пиразолов мы продемонстрировали возможность преодоления энергетических барьеров активации в 50–70 ккал/моль, достигая выхода продуктов до 50% всего за пять минут. Предлагаемая методология является экологически безопасной, так как использует стандартные стеклянные капилляры и п-ксилол в качестве растворителя.

Энергия типичной связи C–C оценивается примерно в 87 ккал/моль, причем другие связи C–C, как правило, являются еще более прочными.³ Однако попытки превзойти столь высокие барьеры могут столкнуться с ограничениями, обусловленными стабильностью органических молекул, поскольку они могут подвергаться частичной деградации в экстремальных условиях. Эта проблема требует дальнейшего изучения в будущих работах для лучшего понимания стабильности и применимости высокотемпературных органических реакций.⁴

Литература

1. Gordeev E. G., Pentsak E. O., V. P. Ananikov, *J. Am. Chem. Soc.*, **2020**, 142 (8), 3784–3796.
2. Ananikov V. P., Gordeev E. G., *Chem. Sci.*, **2011**, 2, 2332–2341.
3. Ananikov V. P., Musaev D. G., Morokuma K., *Organometallics*, **2005**, 24, 715–723.
4. Shaydullin R. R., Galushko A. S., Il'yushenkova V. V., Vlasova Yu. S., Ananikov V. P., *Chem. Sci.*, **2025**, 16, 12, 5289–5298.

АСПЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ РЯДА ПРОИЗВОДНЫХ ФУРАНА С ПИРАНОНОВЫМ ФРАГМЕНТОМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПО CrystalExplorer

**Шемет А.К., Самигуллина А.И.,
Милютин К.В., Комогорцев А.Н.**

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

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Исследование супрамолекулярной организации молекулярных кристаллов открывает широкие возможности для дизайна кристаллов с заданными физико-химическими свойствами. Одним из доступных методов исследования является анализ поверхностей Хиршфельда¹. В докладе представлены результаты анализа кристаллического строения ряда молекул^{2,3} (рис. 1,а), проведенного с использованием ПО CrystalExplorer⁴.

Показано, что на поверхностях Хиршфельда молекул есть зоны, соответствующие сильным водородным связям и процентный вклад различных типов взаимодействий в поверхность практически не меняется для молекул с одинаковыми активными центрами и не зависит от типа заместителя R₁ (рис 1,б). Двумерные графики (d_i-d_e) характеризуются двумя или четырьмя остроконечными пиками, которые соответствуют коротким расстояниям H...O(N) H-связей (рис 1,в). В силу близкой супрамолекулярной организации в кристаллах энергии связывания (CE-B3LYP) в основных мотивах лежат в узком диапазоне величин и не зависят от числа неэквивалентных молекул, участвующих в формировании ассоциата.

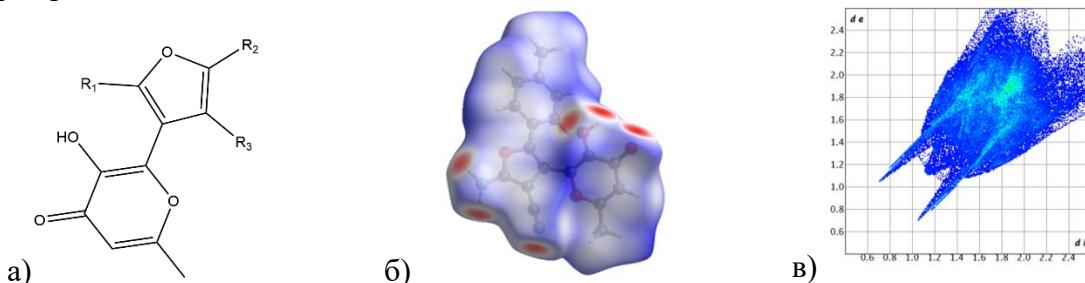


Рис. 1. а) Общая структурная формула производных фурана с пирановым фрагментом; б) Поверхность Хиршфельда (d_{norm}) молекулы 1 в кристалле; в) Двумерный график ($d_i - d_e$) для молекулы 1 в кристалле.

Литература

1. Spackman, P.R., Turner, M.J., McKinnon, J.J., Wolff, S.K., Grimwood, D.J., Jayatilaka D., & Spackman, M. A., *Journal of Applied Crystallography*, **2021**, 54(3), 1006–1011.
2. A.N. Komogortsev, V.G. Melekhina, B.V. Lichitsky, M.E. Minyaev, *Tetrahedron Letters*, **2020**, 61, 15-2384.
3. C.V. Milyutin, A.N. Komogortsev, B.V. Lichitsky, V.G. Melekhina, *Tetrahedron*, **2022**, 124, 13-3012.
4. Spackman M.A., Jayatilaka D., *CrystEngComm.*, **2008**, 11(1), 19-32.

СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ АЛЛИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПАЛЛАДИЯ С ННС-ЛИГАНДАМИ, СОДЕРЖАЩИМИ ЭЛЕКТРОНОАКЦЕПТОРНЫЕ ЗАМЕСТИТЕЛИ

Шпак А.О.¹, Паньков Р.О.², Прима Д.О.²

¹*МГУ им. М.В.Ломоносова, 119234 Москва, ул. Колмогорова, 1, стр.3*

²*ИОХ РАН, 119991 Москва, Ленинский пр-т., 47*

Металлокомплексные катализаторы, содержащие ННС-лиганды, внесли значительный вклад в развитие науки и химической промышленности. Для создания более эффективных каталитических систем в настоящее время активно проводятся исследования направленные на модификацию структуры ННС-лигандов. Особый интерес представляет изучение каталитической активности Pd/NHC с акцепторными заместителями, так как их уникальные электронные свойства оказывают влияние на каталитические характеристики комплекса. Проведение таких исследований позволит лучше понять возможности регулирования свойств M/NHC комплексов путём изменения электронных характеристик ННС-лигандов.

Целью работы является установление влияния заместителей на электронные свойства ННС-лигандов и синтез серии катализаторов на основе комплексов Pd/NHC, содержащих аллильные лиганды и электроноакцепторные заместители в фенильных кольцах.

На первой стадии был синтезирован бис(η^3 -аллил)ди(μ -хлор)дипалладий (II) **1** из $PdCl_2$, KCl и аллилхлорида с выходом 93%, который затем ввели в реакцию с имидазолиевой солью для получения Pd/NHC комплекса с аллильным лигандом **2**. Селеноны **3** были синтезированы согласно схеме 1.

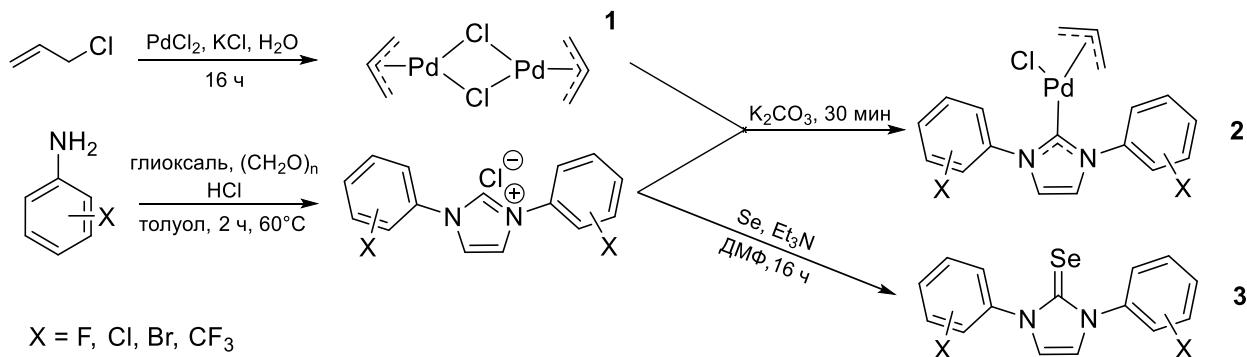


Схема 1. Синтез Pd/NHC комплексов с аллильными лигандами и селеновых производных имидазолиевых солей.

Дальнейшие исследования будут направлены на синтез орто-замещённых электроноакцепторными группами Pd/NHC комплексов и селенонов и оценку их каталитической активности в реакциях полимеризации с целью разработки методов управления каталитическими свойствами путём изменения, как электронных параметров ННС-лиганда, так и лабильных лигандов.

СИСТЕМА ДЛЯ ФИКСАЦИИ МЕЛКИХ ЛАБОРАТОРНЫХ ЖИВОТНЫХ С МОНИТОРИНГОМ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ «АНТИКУСЬ»

Эрлих Т.В.

*Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет), Россия*

Современная экспериментальная медицине нужна надёжная система фиксации лабораторных животных для проведения хирургических и физиологических исследований [1–3]. Традиционные устройства ограничивают доступ к зонам манипуляций и повышают риск инфицирования [4, 5]. Разработанная система «Антикусь» обеспечивает иммобилизацию мелких грызунов, свободный доступ к операционному полю и мониторинг основных физиологических параметров.

Целью работы было создание эргономичного устройства, позволяющего фиксировать животное без чрезмерного стресса, проводить хирургические вмешательства и одновременный сбор данных пульса и температуры, также подключать электроэнцефалографические электроды.

Корпус изготовлен из биосовместимого полилактида; так же есть разъемы для вариабельного подключения датчиков. В стенках предусмотрены отверстия для сенсоров частоты сердечных сокращений и температуры, а разъёмы обеспечивают подключение электродов для нейрофизиологического мониторинга. Испытания на 200 мышах (28–35 г) показали надёжную фиксацию в позициях на животе и спине, хороший доступ к областям операций и отсутствие выпадения из устройства. Интегрированные сенсоры позволяли непрерывно регистрировать сердечную активность без нарушения процедуры. Сравнение с известными аналогами [1–5] показало улучшенную эргономику и расширенный спектр манипуляций.

Таким образом, система «Антикусь» обеспечивает безопасность и удобство при проведении инвазивных и нейрофизиологических исследований на мелких лабораторных животных, сокращает риск инфекции и стресс у животных, расширяет возможности экспериментальной хирургии, фармакологии и нейронаук.

Литература

1. Патент 2284167. Устройство для фиксации мелких лабораторных животных. 2006.
2. Патент 216185. Устройство для фиксации лабораторных животных. 2023.
3. Pritchard W.R., Burgess R.G. Small Animal Restraining Device with Physiologic Sensor Mount: патент 20080168951. 2008.
4. Хоменко Р.М. и др. Устройство для проведения экспериментов на мелких животных. Патент 219018. 2023.
5. Бекетов Е.Е. и др. Компактное модульное устройство для фиксации мелких экспериментальных животных без наркоза. Патент 209728. 2022.



ЗАЧНЫЕ ДОКЛАДЫ

РЕАКЦИЯ ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА В СИНТЕЗЕ ТЕТРАЗАМЕЩЕННЫХ ФУРАНОВ

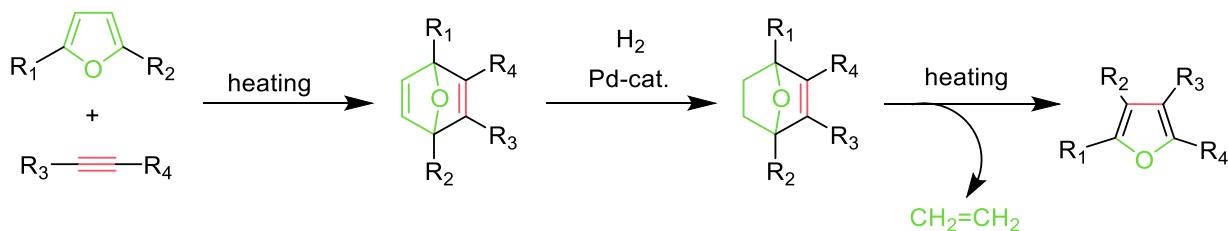
**Зарецкая У.И., ^{a, б} Евстигнеева. П.Ю., ^{a, в}
Галкин К.И., ^a Анаников В.П. ^a**

^aИОХ РАН им. Н.Д.Зелинского, 119991, г. Москва, пр-кт Ленинский, д.47

^бНИУ ВШЭ, 109028, г. Москва, Покровский бульвар, д. 11

^вМГУ имени М.В. Ломоносова, 11999, г. Москва, Ленинские горы, д.1

Фурановые соединения-платформы, такие как 5-(гидроксиметил)фурфурол (HMF), получаемые из возобновляемого сырья, представляют большую ценность для тонкого органического синтеза и полимерных материалов. Однако синтез из HMF тетразамещенных фуранов, которые являются перспективными билдинг-блоками и мономерами, не описан в научной литературе. В данной работе использован новый синтетический подход к получению полизамещенных фуранов из HMF. Ключевыми стадиями предложенной стратегии являются: 1) реакция Дильса-Альдера¹ между фурановым субстратом и электроноакцепторными алкинами (например, DMAD, DEAD) с образованием циклааддукта; 2) его селективное гидрирование; 3) ретро-реакция Дильса-Альдера, приводящая к целевому тетразамещенному фурану (Схема 1).



Предложенный метод позволяет селективно синтезировать тетразамещенные фураны с высоким выходом, открывая путь к новым перспективным продуктам из возобновляемого сырья.

Литература

- Bur S., Padwa A. [4+2] Cycloaddition Chemistry of Substituted Furans // Methods and Applications of Cycloaddition Reactions in Organic Syntheses. 2014. P. 355–406.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-73-00003.

ПРИМЕНЕНИЕ КАСКАДНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ДЕТОНАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Кузьмин С.С., Ануфриева Д.А., Абруков В.С.

*Чувашский государственный университет,
428015, Чебоксары, Московский пр., 15*

Разработан каскадный нейросетевой подход для прогнозирования скорости детонации и характеристик чувствительности индивидуальных и композитных взрывчатых веществ. На основе анализа 11 физико-химических параметров для 32 соединений [1-3] построены модели, демонстрирующие высокую точность прогноза для детонационных характеристик: скорость детонации ($R^2 = 0,996$, коэффициент детерминации), давление детонации ($R^2 = 0,993$), чувствительность к удару ($R^2 = 0,862$) и чувствительность к трению ($R^2 = 0,877$).

Проведенный анализ выявленных физических зависимостей подтвердил адекватность моделей. Установлена положительная корреляция между чувствительностью к удару и энталпийей образования соединений: материалы с высокой положительной ΔH_f требуют меньшей энергии инициирования. Модели корректно воспроизводят фундаментальные закономерности физики взрывчатых веществ, включая квадратичную зависимость давления детонации от плотности и наличие оптимума кислородного баланса в области -30...-10%.

На примере композитов показана возможность использования подхода для направленного дизайна материалов. Установлено, что введениеnanoуглеродных добавок приводят к росту плотности композита, скорости детонации и давления детонации.

Литература

1. Brown T.M., Smith J.K., Johnson A.L. Predictive modeling of explosive properties // Journal of Energetic Materials. 2020. Vol. 38. No. 2. P. 123-145.
2. Petrov A.V., Volkov K.N., Ivanova O.A. Generalized multifactor computing models of condensed systems detonation // Journal of Applied Physics. 2022. Vol. 131. P. 154901.
3. Петров Е.А. Детонационные характеристики композитных ВВ с углеродными нанодобавками // Химическая физика. 2021. Т. 40. № 4. С. 78-92.

СОЗДАНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ НА ИСТОРИЧЕСКИХ ДАННЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Певнев А.Н. ^a, **Андреев О.В.** ^б

^aТюменский государственный университет ул. Семакова, 18, Тюмень, 625003

^бТюменский государственный университет ул. Семакова, 18, Тюмень, 625003,
Институт химии твердого тела УрО РАН, Россия ул. Первомайская, 91,
Екатеринбург, Свердловская обл., 620990

Представлена программная система для прогнозирования и оптимизации производства полимеров, реализующая модели на основе рекуррентных нейронных сетей (LSTM/GRU). Ключевая функция — создание виртуальных анализаторов для косвенной оценки качества продукции по технологическим параметрам, что особенно актуально для непрерывных процессов^{1,2,3}. Система обеспечивает загрузку данных из Excel, выбор архитектуры сети, настройку гиперпараметров и построение прогнозных моделей ключевых характеристик (индекс расплава, плотность). Апробация подтвердила высокую точность прогнозирования ($R^2 \geq 0.94$). Результаты работы включают метрики качества (MSE, R^2) и визуализацию: графики динамики потерь, сопоставления предсказанных и фактических значений, временной ряд сравнения показателей и гистограмму ошибок, что позволяет комплексно оценить адекватность модели и верифицировать точность прогноза.

Литература

1. Yaoqian Zhu, Cheng Zhang, Ridong Zhang, Furong Gao, Design of model fusion learning method based on deep bidirectional GRU neural network in fault diagnosis of industrial processes, Chemical Engineering Science, Volume 302, Part A, 2025, 120884, ISSN 0009-2509, <https://doi.org/10.1016/j.ces.2024.120888>
2. Blazzio, Yashmin & Norsic, Sebastien & Sheibat-Othman, Nida & McKenna, Timothy. (2022). Polymerization of Ethylene in the Gas Phase - A new combined hardware and software tool. The Canadian Journal of Chemical Engineering. 100. 10.1002/cjce.24412.
3. Measurement and Instrumentation, Volume 104, 2025, 102908, ISSN 0955-5986, <https://doi.org/10.1016/j.flowmeasinst.2025.102908>

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта "Фундаментальные проблемы методики разработки и связанного с ней правового и этического регулирования в сфере применения систем и моделей искусственного интеллекта" (FEWZ-2024-0052)

ПОСТРОЕНИЕ ГРУПП РАДИКАЛЬНЫХ РЕАКЦИЙ СЕРОСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ СЕТЬЮ КОХОНЕНА

Туманов В.Е.^{а,б}

^а*Федеральный исследовательский центр Проблем химической физики и медицинской химии РАН в Черноголовке, 142432, Черноголовка, пр-т ак. Семенова 1*

^б*ГБПОУ Московский областной медицинский колледж,
142410, Ногинск, Электростальское шоссе, 1*

Систематизация данных о реакционной способности серосодержащих соединений в химических реакциях является актуальной научно-практической задачей.

Целью настоящего исследования является использование нейронных сетей Кохонена¹ для автоматического построения групп радикальных реакций отрыва атома водорода от серосодержащих органических соединений, обладающих сходной реакционной способностью, по экспериментальным выборкам из нескольких баз данных.

Метрическим пространством признаков для разбиения исходного набора радикальных реакций на группы (клUSTERы) было выбрано пространство: классический потенциальный барьер реакции, классическая энталпия реакций и параметр, связанный с силовыми постоянными химических связей. В качестве меры расстояния в пространстве признаков была использована евклидова метрика.

Экспериментальный материал представлял выборку из базы данных по константам скорости радикальных жидкофазных реакций и по энергиям диссоциации связей органических молекул² (102 реакции).

В результате было получено 5 кластеров, из которых 3 соответствовали $R_1 + RSH$ (где R, R_1 – алкильные радикалы, $R_3 + ArSH$ (где R_3 – алкилароматический радикал), $R + R_1CHSH_2$ и еще были построены 2 группы, которые однозначно описать не представлялось возможным.

Применение методов в выбранном метрическом пространстве позволяет построить кластеризацию радикальных реакций отрыва атома водорода от серосодержащих органических соединений.

Литература

1. Кохонен Т. Самоорганизующиеся карты. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. — 655 с.
2. Туманов В.Е., Прохоров А.И., Лазарев Д.Ю., Соловьева М.Е. *Информационные ресурсы России*, 2010, № 5, 16.

ГЕНЕРАТИВНЫЙ ДИЗАЙН БИОПОЛИМЕРОВ *DE NOVO* НА ОСНОВЕ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Ялеев И.И.

Альметьевский государственный технологический университет "Высшая Школа Нефти", 423462, респ. Татарстан, г. Альметьевск, Советская 18б

Современные генеративные методы машинного обучения позволяют существенно ускорить переход от постановки целевой реакции к получению активных и селективных ферментов [1-2]. В работе обоснована замена трудоёмких эволюционных подходов (типа SLiDE) на ML-пайплайн: генерация последовательностей под заданную задачу, предсказание складки и ранняя механистическая проверка *in silico* (анализ активного центра, докинг, короткая МД). Такой подход снижает стоимость итераций и даёт контролируемую валидацию гипотез до «мокрой» стадии, что особенно важно для ферментов с новыми свойствами.

Сформирован и унифицирован корпус данных: последовательности ферментов с EC-классификацией и условиями экспериментов (UniProt, BRENDA), описания реакций, а также структуры белков, включая предсказанные модели. Для оценки применены логистическая регрессия, деревья решений/Random Forest, градиентный бустинг, модели на эмбеддингах последовательностей и 3D-CNN по активному центру.

Ретроспективная оценка по наборам, разделённым по семействам, показала наилучшие результаты у 3D-сверточной сети: macro-AUC-ROC $\approx 0,67$, PR-AUC выше базовой линии. Кривые обучения подтверждают устойчивое улучшение качества на этапе обучения. В дальнейшей работе планируется уточнить используемые признаки и настроить оценку уверенности модели, чтобы повысить точность отбора кандидатов.

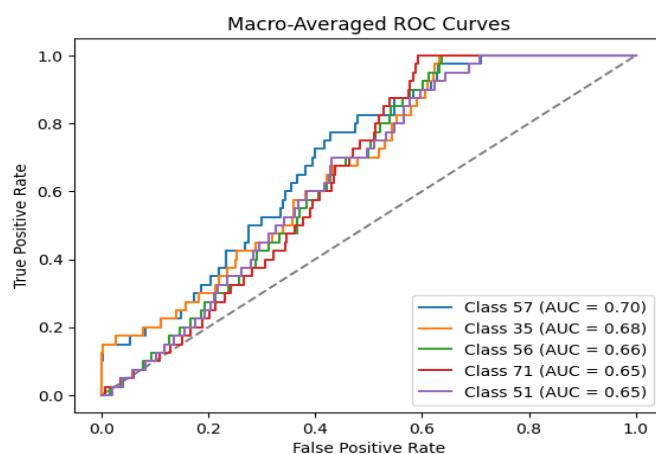


Рис. 1. Кривые Macro-Averaged AUC-ROC для обученной модели.

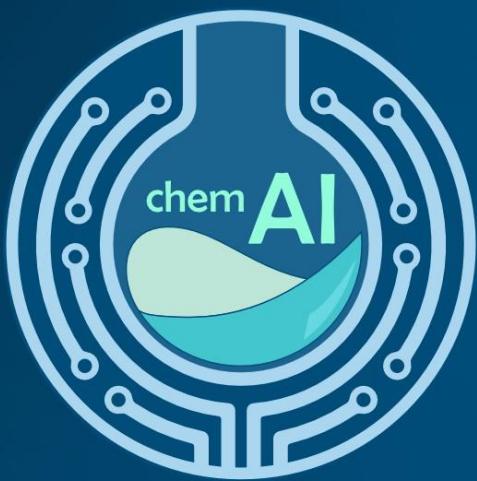
Литература

1. Jumper J. et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* (2021).
2. Madani A. et al. Large language models generate functional protein sequences (ProGen). *Nat Biotechnol* (2023).

- Абдульмянов А.Р., 153
 Аброков В.С., 26
 Аверочкин Г.М., 63
 Аветисян А.И., 11
 Агина Е.В., 27
 Акентьева Т.А., 154
 Александров Е.В., 28
 Анаников В.П., 12
 Ананьев И.В., 29
 Андреев Д.М., 155
 Ануфриева Д., 156
 Ануфриева П., 157
 Арабов Р.И., 158
 Аракелян Л.А., 64
 Архипова Д.М., 65
 Афанасьев О.И., 30
 Баландинский Д.А., 159
 Барановский А.Д., 160
 Барсуков А.Н., 66
 Бегларян Б.Г., 67
 Беляев С.А., 68
 Беспалов И.А., 69
 Бойко Д.А., 31
 Бойченко Е.С., 70
 Бринк И.Ю., 71
 Буданов М.Я., 72
 Бурмистров В.В., 73
 Бурнаев Е.В., 17
 Буряк А.К., 18
 Бухтеева Е.О., 74
 Быков А.В., 75
 Василевская В.В., 32
 Верещагин А.Н., 76
 Виль В.А., 77
 Вобликова Т.В., 78
 Волкова О.О., 161
 Володина Н.О., 162
 Волошин В.М., 163
 Ворожцов А.П., 79
 Восков А.Л., 33
 Врублевский Д.Б., 164
 Гашимова Э.М., 165
 Герbst А.Г., 80
 Глазкова Д.А., 81
 Голов И.В., 82, 166
 Голубев А.А., 167
 Гуревич П.Е., 168
 Данилов С.Е., 169
 Даулбаев Т.К., 83
 Демина С.В., 170
 Добрица И.И., 171
 Домнин А.В., 84
 Дубиняк А.М., 85
 Дудаков И.В., 86
 Екимова Т.А., 172
 Еремин Р.А., 87
 Жердев А.В., 88
 Закиев С.Е., 173
 Заправдина Д.М., 174
 Зарецкая У.И., 240
 Зарипов Р.А., 175
 Зимина А.Д., 176, 177
 Злобин И.С., 34
 Злобина И.В., 89
 Зонов Р.В., 178
 Зубков М.О., 90
 Иваненко Т.Ю., 179
 Иванова А.А., 91
 Иванова Н.М., 180
 Иванова Ю.Ф., 181
 Исламов Д.Н., 182
 Исхаков А.Ф., 183
 Каликин Н.Н., 92
 Камалова А.В., 184
 Капранова К.А., 185
 Карапдеева А.С., 93
 Карапурова А.Н., 186
 Кашин А.С., 94
 Квашнин А.Г., 95
 Квашнин Д.Г., 96
 Кирпаль Ю.Г., 187
 Кирсанов Д.О., 35

- Киселев В.Г., 36
 Клименко М.М., 188
 Козлов К.С., 37
 Комаров П.В., 97
 Коняхина А.Ю., 98
 Коровин А.Н., 99
 Корогод Д.В., 189
 Котлов Е.С., 190
 Кошелев Д.С., 100
 Кравцов А.В., 191
 Краснов Л.В., 38
 Крылов И.Н., 101
 Кузьмин С.С., 241
 Кулаев К.Д., 102
 Кулаев К.К., 192
 Куприянова Г.С., 103
 Куриганова А.Б., 104
 Курочкин И.Н., 19
 Кустова Т.В., 193
 Лепешкин С.В., 105
 Лесников В.К., 194
 Лобова Н.А., 106
 Ломова М.В., 195
 Луканов М.М., 196
 Лысенко М.Р., 197
 Люлин С.В., 20
 Макаров Д.М., 107
 Мануковская Д.В., 198
 Мареев Е.И., 108
 Мартыненко П.А., 199
 Мартынов И.В., 109
 Махилев Р.А., 201
 Медведев М.Г., 39
 Мерзликин А.М., 21
 Мешина К.И., 202
 Митрофанов А.А., 40
 Михайлова А.А., 110
 Мотаев К.А., 111
 Муравлева Е.А., 41
 Набиев И.М., 112
 Назарова В.В., 203
 Назарычев В.М., 204
 Нам Е.В., 205
 Нартова А.В., 42
 Насырова Д.И., 206
 Наумович В.О., 207
 Никитин Н.Ю., 113
 Никифоров Д.Н., 114
 Новицкий Г.О., 115
 Оганов А.Р., 13
 Осипов В.Т., 116
 Остарков С.Н., 117
 Павельев С.А., 118
 Павлов А.А., 43
 Паршин Т.В., 208
 Певнев А.Н., 242
 Пескова Е.Е., 119
 Позов Б.Е., 209
 Поликовский Т.А., 120
 Поляков И.В., 44
 Попов З.И., 121
 Поройков В.В., 14
 Потапов А.С., 122
 Проломов И.В., 210
 Проценко Б.О., 123
 Пустовалова Т.В., 124
 Пустолайкина И.А., 211
 Путилин К.В., 212
 Радулов А.С., 125
 Разумова Я.Е., 213
 Раскильдина Г.З., 214
 Редьков А.В., 45
 Рубцов И.Д., 126
 Рыжов А.П., 215
 Рылов А.В., 127
 Рыльцев Р.Е., 46
 Рябченко Д.А., 128
 Сабиров Д.Ш., 47
 Самолыга А.А., 216
 Самороднова А.П., 217
 Самсоненко А.А., 129
 Свердлов Ю.В., 130

- Свитанько И.В., 131
Серов Н.Ю., 132
Сидорова Э.С., 218
Скорб Е.В., 48
Скуратович В.А., 219
Смирнов М.В., 133
Смирнов С.А., 134
Смирнова А.А., 135
Смирнова Н.В., 220
Смолянинов С.К., 221
Смурова А.А., 136
Снытников В.Н., 49
Солдатов А.В., 137
Ставрианиди А.Н., 50
Столбов Л.А., 138
Султанова Р.М., 139
Суслов Е.В., 140
Суханова Е.В., 222
Сысоев Е.И., 141
Сычев М.М., 51
Таракановская Д.Д., 223
Тарасова О.А., 52
Терентьева Д.В., 224, 225
Тер-Оганесян Н.В., 226
Третьяков Е.В., 142
Туманов В.Е., 243
Тупикина Е.Ю., 22
Унанян Л.С., 53
Ушенин К.С., 54
Файзуллина Л.Х., 55
Федяева М.А., 143
Филиппова Д.С., 227
Фомин Е.В., 144
Фролов Н.А., 145
Ханипова А.М., 228
Ходько Н.С., 229
Холичева А.А., 230
Хоружик С.А., 231
Хохлов А.Р., 23
Хренова М.Г., 56
Хрисанфов М.Д., 232
Чадин А.А., 233
Чалый В.А., 146
Чалых О.К., 234
Черниговская Т.В., 15
Чусов Д.А., 57
Шайдуллин Р.Р., 235
Шандыбо М.А., 147
Шапеев А.В., 58
Шемет А.К., 236
Широбоков В.П., 148
Шмидт А.Ф., 24
Шолохова А.Ю., 59
Шпак А.О., 237
Щегольков Е.В., 149
Щелкачев Н.М., 150
Эварестов Р.А., 60
Эрлих Т.В., 238
Юськина Е.А., 151
Ялеев И.И., 244
Яньшоле В.В., 61



ai2025.zioc.ru



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



Минпромторг
России

