

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
ИНСТИТУТ БИООРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ
ИМ. АКАДЕМИКОВ М.М. ШЕМЯКИНА И Ю.А. ОВЧИННИКОВА
Российской академии наук**

УЧЕБНО-НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

**ОБЩЕСТВО БИОТЕХНОЛОГОВ РОССИИ
ИМ. Ю.А. ОВЧИННИКОВА**

**XXXV ЗИМНЯЯ МОЛОДЁЖНАЯ НАУЧНАЯ ШКОЛА
"ПЕРСПЕКТИВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ФИЗИКО-
ХИМИЧЕСКОЙ БИОЛОГИИ И БИОТЕХНОЛОГИИ"**

Москва, 7-10 февраля 2023 г.



СБОРНИК ТЕЗИСОВ

**Под редакцией
д.х.н. Т.В. Овчинниковой**

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
ИНСТИТУТ БИООРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ
ИМ. АКАДЕМИКОВ М.М. ШЕМЯКИНА И Ю.А. ОВЧИННИКОВА
Российской академии наук**

УЧЕБНО-НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

**ОБЩЕСТВО БИОТЕХНОЛОГОВ РОССИИ
ИМ. Ю.А. ОВЧИННИКОВА**

**XXXV ЗИМНЯЯ МОЛОДЁЖНАЯ НАУЧНАЯ ШКОЛА
"ПЕРСПЕКТИВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ФИЗИКО-
ХИМИЧЕСКОЙ БИОЛОГИИ И БИОТЕХНОЛОГИИ"**

Москва, 7-10 февраля 2023 г.

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

**Председатель Программного комитета:
академик А.Г. Габиров**

**Председатель Организационного комитета:
д.х.н. Т.В. Овчинникова**

Составители:

Овчинникова Т.В., Шереметьева Э.В.

Компьютерная верстка: Яковлева Т.И.

Отпечатано на полиграфическом участке ИБХ РАН

Печать офсетная. Печ. л. 16,8. Тираж 100 экз.

© Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина
и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук, Москва, 2023 г.

1.26. МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ДЕСКРИПТОРЫ И МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ВОЗМОЖНОСТИ ПРОТЕКАНИЯ РЕАКЦИИ ГЕТЕРОГЕННОГО КАТАЛИЗА

Петрова В.В.^{1,2}, Соловьев Я.В.¹

¹Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
v.k.1510121@gmail.com

Изучение элементарных стадий каталитических реакций является одной из наиболее актуальных задач современной химии. Сегодня, наряду с экспериментальными методиками, активно развиваются подходы компьютерного моделирования, в частности алгоритмы *ab initio* метадинамики. Однако *ab initio* метадинамика - это крайне ресурс- и времязатратный расчет. Кроме того, поскольку он является стохастическим, требуется проведение повторных экспериментов, особенно в случае негативных контролей.

Применение машинного обучения для предварительной оценки возможности протекания реакции может существенным образом сократить времязатраты. Базовыми условиями его эффективности являются релевантность обучающей выборки, выбор дескрипторов (метрик) и сам алгоритм. Целью нашей работы был подбор физических дескрипторов, отражающих ключевые стадии гетерогенного катализа в системе вода-фермент - сорбции реагента и его химическое превращение на примере реакции ковалентной модификации антитела A17 L47K 87 модельными фосфорорганическими соединениями и пестицидами. Барьер реакции предварительно вычислялся методами *ab initio* метадинамики в программах DFTB+/Plumed [1,2]. Процесс сорбции был аппроксимирован COSMO (Conductor-like Screening Model) поверхностью молекул, отражающих эффективность взаимодействия молекул воды с каждым участком молекулы-сольвата, созданных в программе MOPAC2016 [3]. Для описания химических связей использовалась теория Бейдера, в частности, параметры электронной плотности и электронной энергии в критических точках второго типа. На следующем этапе подбирались методы машинного обучения, опирающиеся на большое число метрик и не приводящие к переоценке одной из них. Данный подход позволяет не только оценить возможность протекания реакции для выбранного вещества, но и установить ключевые параметры поверхности и электронной плотности, влияющие на ее эффективность.

Литература

1. DFTB+, a software package for efficient approximate density functional theory based atomistic simulations; J. Chem. Phys. 152, 124101 (2020)
2. The PLUMED consortium. Promoting transparency and reproducibility in enhanced molecular simulations, Nat. Methods 16, 670 (2019)
3. MOPAC2016, James J. P. Stewart, Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs, CO, USA, HTTP://OpenMOPAC.net (2016)