**Конформационный поиск для дизайна органических комплексообразователей радионуклидов в газовой и твердой фазе с помощью алгоритма пчелиной колонии**

***Яблонский М.Д.1***

*Студент, 5 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: maks618@mail.ru*

Комплексообразование – базовый процесс, лежащий в основе многих областях радиохимической технологии, таких как гидрометаллургия, переработка отработавшего ядерного топлива, создание радиофармпрепаратов. Разработка новых систем осложняется необходимостью работы с радиоактивными металлами. При этом важно минимизировать облучение персонала за счет увеличения доли автоматизации процессов. Для этого можно использовать методы вычислительной химии на базе квантовой химии и искусственного интеллекта.

Ввиду радиоактивности радионуклидов одним из требований к комплексообразователям является их радиационная стойкость. Данное свойство для органических молекул может быть рассчитано на основе квантово-химических вычислений и теории граничных орбиталей Фукуи, что продемонстрировано нами на примере широко используемых в радиохимической технологии дигликольамидов. Однако для того, чтобы описывать реальное поведение малых органических молекул в различных средах и условиях, зачастую необходимо знать набор присутствующих при этих условиях конформаций. В термодинамически равновесной системе молекулы располагаются в некотором наборе конформаций, соответствующих глобальному и локальным энергетическим минимумам. Поиск конформаций квантовохимическими методами вызывает значительные временные затраты. Перспективным является применение различных метаэвристических подходов – подходов, не имеющих строгого обоснования, но для поставленной задачи достигающих приемлемых результатов.

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

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

*Работа выполнена при финансовой поддержке Научно-образовательной школы МГУ «Мозг, когнитивные системы, искусственный интеллект» (проект 23-Ш03-04) с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М.В. Ломоносова.*