

Предсказание константы устойчивости комплексов металлов с помощью графовой нейронной сети

Пикулин Иван Сергеевич

Кафедра радиохимии, Москва

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

Соавторы: Карпов К.В.

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

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

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

Источники и литература

- 1) Chen C. et al. Graph Networks as a Universal Machine Learning Framework for Molecules and Crystals // Chemistry of Materials. American Chemical Society, 2019. Vol. 31, № 9. P. 3564–3572.
- 2) Korolev V. et al. Graph Convolutional Neural Networks as “general-Purpose” Property Predictors: The Universality and Limits of Applicability // J Chem Inf Model. American Chemical Society, 2020. Vol. 60, № 1. P. 22–28.

Иллюстрации

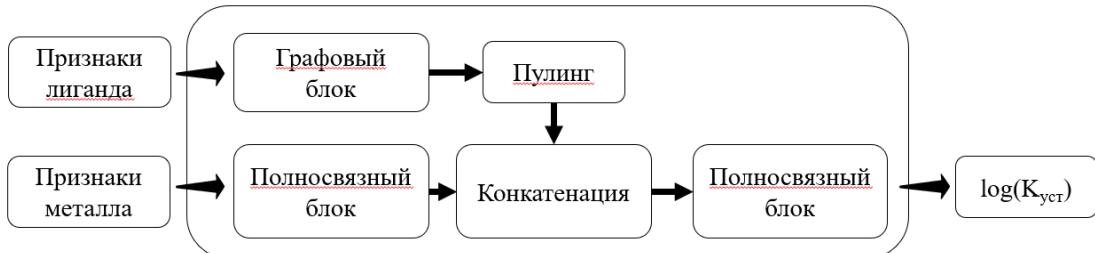


Рис. : 1. Предлагаемая архитектура нейронной сети