

PR-17**АНАЛИЗ ДИНАМИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ ЭПР pH-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ НИТРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ**

Давыдов Д. Р.¹, Антонов Д. О.¹, Ковалева Е. Г.¹

¹Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19
E-mail: danil.davydov@urfu.me

Стабильные нитроксильные (имидоксильные) радикалы стали модельными объектами в исследованиях химии и физики свободных радикалов методом ЭПР. Они нашли широкое применение в молекулярной физике, химии и биологии в качестве спиновых зондов и меток¹.

На широкое распространение машинного обучения в обработке данных большое влияние оказало значительное сокращение вычислительных мощностей и затрачиваемого времени на обработку данных по сравнению с традиционными численными методами анализа^{2,3}. Однако пока нет примеров применения методов машинного обучения в области ЭПР-спектроскопии, в частности, в анализе динамических спектров ЭПР pH-чувствительных нитроксильных радикалов, спектры которых имеют сложную форму и для получения из них важных параметров для анализа исследуемых систем. Причиной тому являются как большие вычислительные мощности, так и временные затраты на анализ спектров ЭПР pH-чувствительных нитроксильных радикалов.

В данной работе проведен поиск архитектур нейронных сетей и их обучение с целью определения наиболее подходящей для получения характеристик исследуемой системы с помощью симулирования экспериментальных спектров ЭПР pH-чувствительных нитроксильных радикалов в твердофазных материалах.

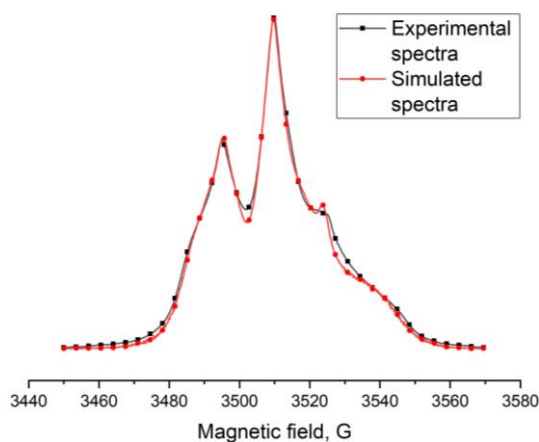


Рисунок 1 – Типичный спектр поглощения ЭПР pH-чувствительных радикалов в минерале галлазит при pH = 9,66.

Библиографический список

1. Лихтенштейн Г. И. Применение спиновых меток в биологии / Г. И. Лихтенштейн – Москва: Наука, 1972, – 256 с.
2. Lussier F., Thibault V., Charron B. et al. Deep learning and artificial intelligence methods for Raman and surface-enhanced Raman scattering. Trends in Analytical Chemistry, 2020, vol. 124.
3. Gastegger M., Behler J., Marquetand P. Machine learning molecular dynamics for the simulation of infrared spectra. Chemical Science, 2017, Iss. 10, pp. 6924–6935.