



ITMO UNIVERSITY



SCAMT



TATNEFT

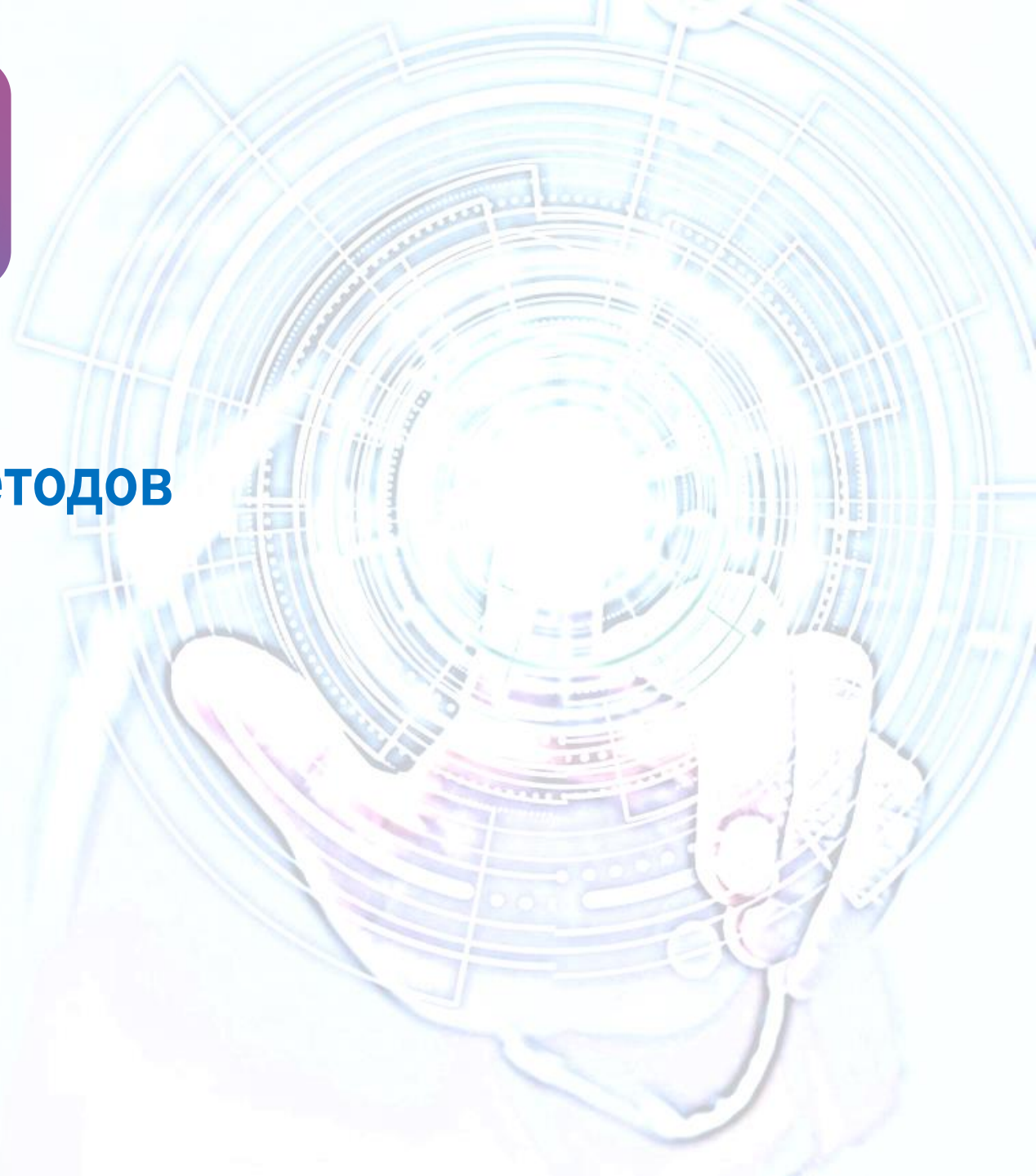


АГНИ

Лаборатория сорбционных методов молекулярной диагностики

Конкурс при поддержке Биотех центра АГНИ

2022



Научный руководитель



Марина Князева

Образование

2020 – ИФХЭ РАН

Физическая химия

Аспирантура (ожидаемая защита в 2023)

2016 – РХТУ

Химия, Магистр (с отличием)

2014 – РХТУ

Химическая технология, Инженер

- Научный сотрудник ИФХЭ РАН, Лаборатория сорбционных процессов им. М.М. Дубинина
- Заместитель руководителя (направление МОК), Научно-технический центр "Адсорбционные технологии"

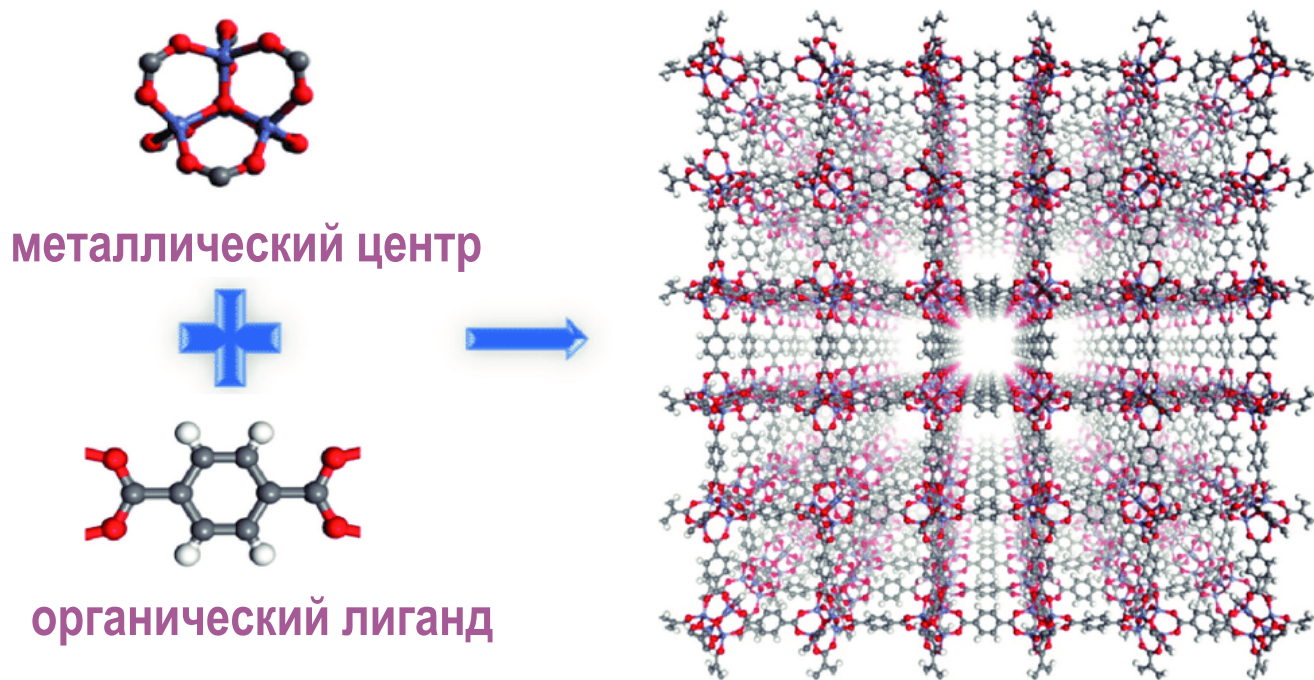
Ключевые индикаторы

- 10+** Статей WOS , h -индекс 5
- 30+** Тезисов докладов и участия в конференциях и конкурсах
- 10+** Разработанных методик синтеза новых МОК
- 7** Заявок на международные и российские патенты
- 5** Студентов, аспирантов и сотрудников лаборатории обучены методам синтеза МОК

Навыки и обязанности

- Фундаментальные и прикладные научные исследования (адсорбция, пористые материалы, металлоорганические каркасы, сенсоры)
- Руководство научной группой синтеза МОК
- Обучение младших сотрудников
- Написание статей, участие в конференциях, семинарах
- Член оргкомитета конференции "Актуальные проблемы адсорбции и пористых материалов"

Металлоорганические каркасы (МОК) и их свойства



Области применения МОК

адсорбция

катализ

медицина

нефтехимия

биотехнология

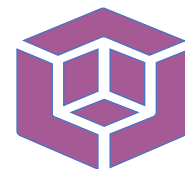
оптика

магнетизм

и др.

Свойства пористых металлоорганических каркасов (МОК)

ТОПОЛОГИЯ



Разнообразие химического состава и геометрии структур

ВЫДАЮЩИЕСЯ СВОЙСТВА



Высокая удельная площадь поверхности $S_{\text{ВЕТ}}$
Объем микропор W_0
Энергия адсорбции E_0

РЕГУЛЯРНОСТЬ



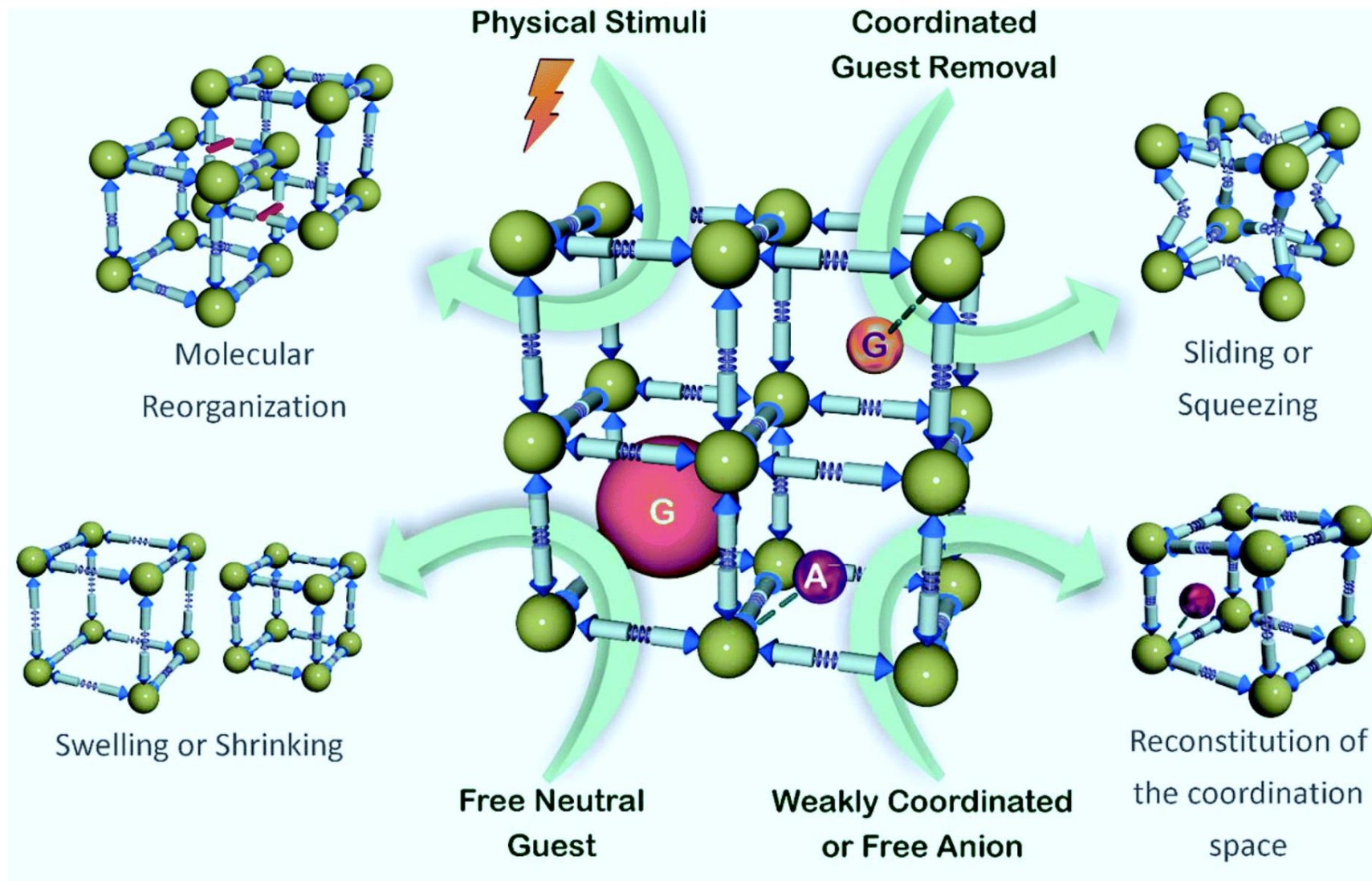
Узкое распределение пор по размерам

ПОДВИЖНОСТЬ



Гибкость и адаптивность каркасной конструкции

Материалы на основе МОК в качестве новых адсорбционных сенсоров

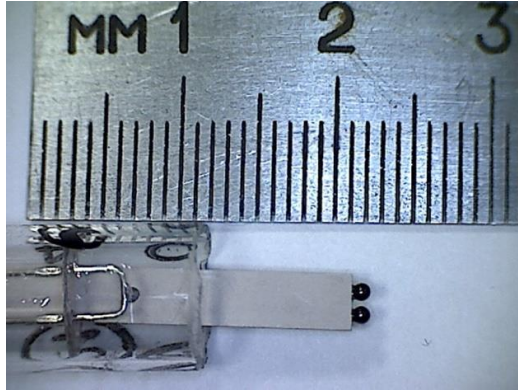
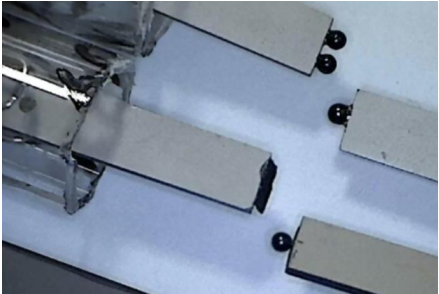


Эффекты в сенсорах МОК при адсорбции анализируемых веществ

Реализация технологии адсорбционных сенсоров



Сорбционные сенсоры для портативного анализа сахарного диабета



Преимущества

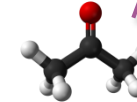
- ✓ Неинвазивный метод подразумевает анализ выдыхаемого пациентом воздуха
- ✓ Возможность отслеживать динамику течения заболевания
- ✓ Электронная обработка – формирование цифровых баз данных диабетиков
- ✓ Перспективы распространения технологий в области других социально значимых заболеваний



Принцип действия

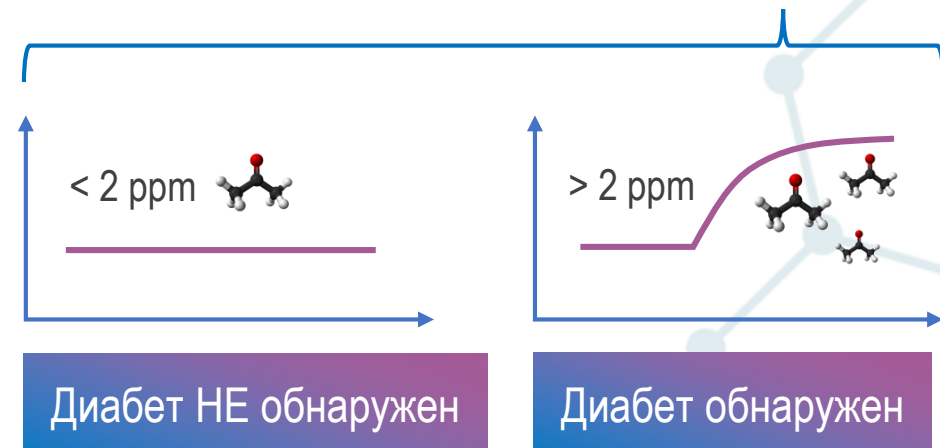


ацетон



пьезорезонатор

- Обработка сигналов
- Частота = f (концентрация)



Проект лаборатории



Направление и главные задачи

Цель

Разработка адсорбционных методов молекулярной диагностики для создания новых сенсорных элементов с высокой чувствительностью к маркерам социально значимых заболеваний с использованием управляемых данными и численных квантовых подходов к организации научной деятельности

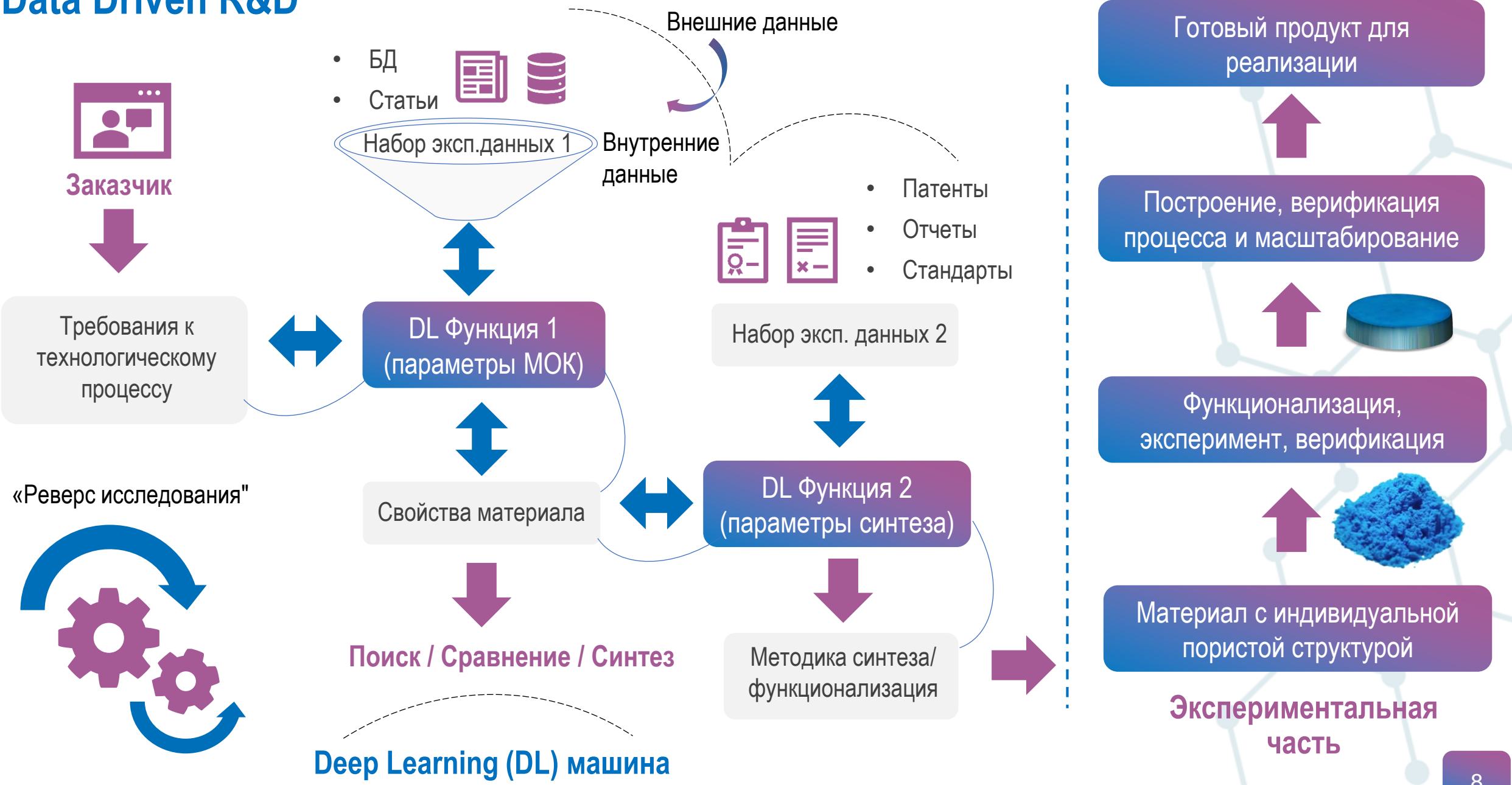
Задачи лаборатории

- Разработка требований к структуре и методам работы с реляционными базами данных, содержащими информацию о МОК, методах их синтеза и сенсорных свойствах.
- Наполнение баз данных, их масштабирование и вовлечение новых участников в их разработку
- Разработка безмодельных алгоритмов прогнозирования на основе методов машинного обучения с использованием сгенерированных баз данных
- Разработка прогностических моделей проявления сенсорных свойств МОК на основе численных методов молекулярной динамики и квантово-химических методов
- Синтез и функционализация МОК с заданными свойствами для задач point-of-care молекулярной диагностики.

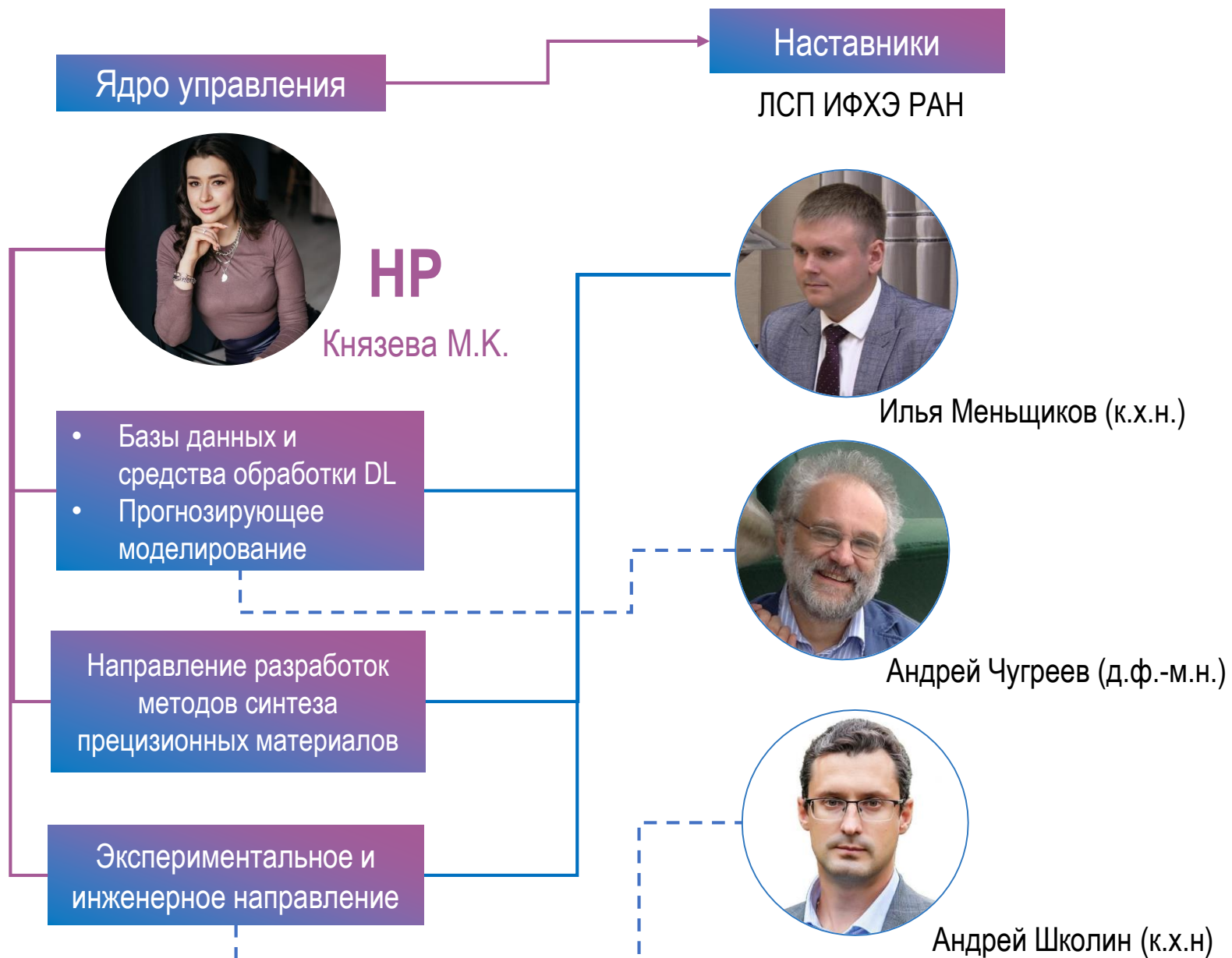
Ожидаемый результат

- Ускорение процесса получения МОК с заданными свойствами
- Возможность масштабирования накопленного опыта для других научных областей
- Создание нового рынка сенсорных элементов

Data Driven R&D



Проектная группа и кадровая политика



Принципы и политика в области управления персоналом

- Меритократия идей
- Максимальная мобильность персонала
- Мониторинг развития
- Поощряется рост и выделение дополнительных средств
- Ротация в отрасли и наоборот
- Новые лица в качестве студентов/стажеров

План проекта



Команда

4 – основных исполнителя (НР + 3 студента) 3 – наставника	5 – основных исполнителя (НР + 4 студента) 2 – наставника	6 – основных исполнителя (НР + 4 студента + 1 инженер) 2 – наставника
---	---	---

Задачи

<ul style="list-style-type: none">Разработка баз данных и методов deep learning (DL)Квантовая химия, методы молекулярной динамики (МД) для определения свойств МОК (DL Функция 1)	<ul style="list-style-type: none">Методы искусственного интеллекта (ИИ) (DL Функция 2)Синтез МОК с чувствительными свойствамиЭксп. исследования сенсорных свойств МОК	<ul style="list-style-type: none">Выбор МОК для MVPФункционализация МОКРазработка первого прототипа адсорбционного сенсора
--	--	--

Инфраструктура

2 оборудованных постоянных рабочих места, компьютеры	<ul style="list-style-type: none">+1 экспериментальная установка на рабочем месте (синтез МОК)	<ul style="list-style-type: none">+1 рабочее местоэксп. установка + инжиниринг
--	--	---

КПЭ

<ul style="list-style-type: none">публикацииконференциипрочее	<ul style="list-style-type: none">2 (Q1-Q2)2База данных, методы обработки данных (квантовая химия, МД + ИИ), заявка на БД	<ul style="list-style-type: none">3 (Q1-Q2)3Новые методы искусственного интеллекта для технологии МОК, заявка на программу БД	<ul style="list-style-type: none">3 (Q1-Q2)3MVP (сенсоры на основе МОК), заявка на изобретение
---	---	---	--

Финансы

<ul style="list-style-type: none">грантыгос. грантыкоммерческие	<ul style="list-style-type: none">4 млн. руб.--	<ul style="list-style-type: none">6 млн. руб.--	<ul style="list-style-type: none">6 млн. руб.2 млн. руб. (в целом, например, грант РНФ, комм. проект)
---	---	--	--

Сотрудничество

ИФХЭ РАН	ИФХЭ РАН	ИФХЭ РАН + 1 новая (биомедицинская отрасль)
----------	----------	---

Дорожная карта на 1-й год реализации проекта



**Алтайский
государственный
нефтяной институт**

Старт проекта!

- организация рабочих мест
- постановка задач
- распределение обязанностей
- стажировка в ЛСП ИФХЭ РАН для студентов АГНИ

**Октябрь-Ноябрь
2022**

Изучение, применение и разработка новых методов скрининга МОК (применительно к задачам биомедицины)
Разработка протоколов синтеза и измерения свойств МОК

**Декабрь
2022**

Презентация Proof of Concept в рамках Rock Science Conference

**Январь-Февраль
2023**

Разработка методов молекулярной динамики для определения сорбционных свойств МОК

**Март-Апрель
2023**

Развитие проекта!

- создание уникальной базы данных
- методы обработки данных

**Май-Июнь
2023**

Моделирование сорбционных свойств МОК

Квантово-химическое моделирование магнитных и оптических свойств МОК

**Июль-Август
2023**

- подготовка научных статей в журналы Q1-Q2
- отчет по первым результатам группы

Завершение 1 года проекта!



**Институт физической
химии и электрохимии
имени А. Н. Фрумкина РАН**

Образ результата/proof of concept к декабрю 2022 года

- ☐ Запуск проекта и организация работы команды Лаборатории сорбционных методов молекулярной диагностики
- ☐ Разработка протоколов синтеза и измерения свойств МОК
- ☐ Начало формирования базы данных (БД)
- ☐ Проверка работы БД в первом приближении, определение проблем и пути решения при их наличии
- ☐ Освоение методов скрининга и моделирования (первичные результаты)
- ☐ План публикаций и участия в конференциях



☒ Экспериментальный выбор



☒ Цифровая машина (DL)

Три фактора определяют будущее – искусственный интеллект, биотехнологии и нанотехнологии.

М. Каку

Стань частью лаборатории будущего!

Контакты

Email: knyazeva.mk@phych.e.ac.ru

Web: <http://sorptionlab.ru/> - M.M. Dubinin Laboratory of sorption processes

<https://adsorbtech.ru/> - Engineering & Technical Center