

УДК 004.896

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЙ РОБОТ-ХИМИК: НА ПУТИ К АВТОНОМНОЙ ЛАБОРАТОРИИ

М. Ш. Адыгамов¹ [0009-0006-2364-9867], А. О. Голубь² [0009-0004-0090-0292],
Э. Р. Сайфуллин³ [0000-0003-0823-9051], Т. Р. Гимадиев⁴ [0000-0001-5012-0308],
Н. Ю. Серов⁵ [0000-0002-5772-8399]

^{1,3-5}Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук», г. Казань, Россия

¹⁻⁵Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия

¹musa20930@gmail.com, ²toxa.mix7@gmail.com, ³mr.emilsr@gmail.com,

⁴Timur.Gimadiev@gmail.com, ⁵Serov.Nikita@gmail.com

Аннотация

Представлена программно-аппаратная платформа, которая позволяет проводить химические синтезы в автоматическом режиме, включая приготовление реакционных смесей, их нагрев и перемешивание, а также отбор проб с разбавлением после синтеза и отправку на анализ методом высокоеффективной жидкостной хроматографии с последующей автоматической обработкой результатов. Для управления отдельными элементами роботизированной установки создана собственная библиотека ChemBot на языке Python, а для управления всей системой – клиентский веб-сервер; для просмотра состояния установки и хода выполнения синтезов разработан веб-интерфейс. Работа всей платформы по выполнению экспериментов протестирована при выполнении синтезов по альдольной конденсации, где варьировались соотношение реагентов, катализатор и его количество, температура и время синтеза. Написание собственного кода для контроля и управления всей системой стало важным шагом на пути интеграции роботизированной установки и искусственного интеллекта (ИИ), что в перспективе позволит осуществить переход к автономной лаборатории, когда предсказание целевой молекулы и ее синтеза, экспериментальное осуществление и анализ, а также, при необходимости, уточнение или изменение использованной модели будут осуществляться в автоматическом режиме, без вмешательства человека.

Ключевые слова: искусственный интеллект, роботизация, химический синтез, автономная лаборатория, хемоинформатика.

ВВЕДЕНИЕ

Современные химические исследования столкнулись с парадоксом: растущая сложность задач (синтез новых материалов, лекарственных соединений, оптимизация процессов) требует экспоненциального повышения количества и сложности экспериментов, в то время как традиционные лабораторные методы остаются ресурсоемкими и длительными. Решением этой проблемы стали автоматизированные лаборатории (англ. self-driving labs, SDLs [1]), интегрирующие аппаратные платформы, методы машинного обучения (МО), искусственного интеллекта (ИИ) и облачные технологии. Их развитие трансформирует научный процесс, что обеспечивает:

- высокую пропускную способность (параллельное проведение сотен реакций);
- воспроизводимость (исключение «человеческого фактора»);
- автономность (круглосуточная работа без вмешательства оператора);
- интеллектуальную оптимизацию (адаптивное планирование экспериментов на основе данных, полученных на экспериментальной установке).

Однако, несмотря на очевидные преимущества, внедрение автоматизированных систем в область химического синтеза сопряжено с рядом серьезных вызовов [2]. Среди них можно выделить отсутствие аппаратной гибкости некоторых коммерческих роботизированных установок, их высокую стоимость [3, 4], а также сложность разработки и объединения всех процессов: предсказание эксперимента, его проведение и анализ – в автономную систему, в которой все процессы последовательно выполняются без участия человека, а полученные данные используются для дообучения моделей МО и ИИ [5]. Стоит отметить, что некоторые научные группы занимаются разработкой открытых и более доступных решений для автоматизации синтезов [6, 7], но, как правило, подобные системы не являются коммерчески доступными и имеют некоторые конструктивные ограничения (например, установка [6] имеет ограниченное число реакторов, а устройство в [7] создавалось под определенный узкий круг задач).

Для создания полностью автономной платформы автоматизации необходимо интегрировать три программных пакета, работающих в режиме «закрытого цикла»: ПО для поиска целевых молекул и оптимального пути их синтеза, ПО для проведения эксперимента и ПО для обработки экспериментальных данных [5]. В традиционном подходе, в отличие от систем «закрытого цикла», модели планирования синтезов обучаются на ограниченном наборе данных, после чего их предсказания проверяются экспериментально (вручную или автоматизированным способом). В подходе «закрытого цикла» модели продолжают дообучаться за счет новых данных, полученных на автоматизированных установках (при этом автоматизируется и синтез, и анализ). Подобные решения позволяют быстрее получать результаты более высокого качества по сравнению с традиционным подходом к дизайну новых соединений.

В настоящей работе представлена программно-аппаратная платформа для автономного проведения химических синтезов, их анализа и планирования. В текущей версии программный пакет ChemBot включает ПО для проверки возможности приготовления синтезов, приготовления реакционных смесей на описанной далее установке, проведения и планирования параллельных синтезов, отбора образцов на анализ и автоматического запуска анализов на системе высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ). Система была использована для проведения реакций альдольной конденсации в присутствии аминокислотных комплексов цинка и хорошо показала себя при осуществлении синтезов с различными условиями такими, как варьирование реагентов и их соотношений, катализатора и его количества, а также условий – температуры, кислотности среды за достаточно короткое время.

УСТРОЙСТВО РОБОТИЗИРОВАННОЙ УСТАНОВКИ

Установка, используемая для проведения синтезов, сделана на базе автоматизированной системы LifeBot для ПЦР-тестов (ООО «Эвотэк-Мирай Геномикс» г. Иннополис, Россия) [8]. С учетом внесенных модификаций робот способен параллельно проводить до 48 химических синтезов при нагревании и перемешивании в реакционной зоне. Роботизированная установка работает в сочетании с

ВЭЖХ-системой Smartline (фирма Knauer, Германия) [9] с возможностью автоматического отбора проб и запуска анализа. Общий вид установки представлен на рис. 1.

Часть исходных элементов установки была заменена на собственные разработки, среди которых можно отметить включение в рабочее поле реакторных зон, приемника для отбора проб, создание нового держателя пипеток. Все модификации робота сделаны с использованием коммерчески доступной электроники и деталей, напечатанных на 3D-принтере, что в перспективе позволит удешевить подобные установки, сделать их более доступными для научного сообщества и популяризовать роботизированные установки в химических лабораториях.



Рис. 1. Общий вид установки. По центру находится рабочее поле с манипулятором. Справа расположены хранилища растворителей с перистальтическими насосами. Слева на заднем плане виден хроматограф.

Для более понятного представления об устройстве установки на рис. 2 приведена ее блок-схема. Центральной частью установки является рабочее поле (обведено зеленым), в котором расположены различные устройства. Внутри поля движется манипулятор, подключенный к линиям растворителей, а также имеющий встроенную пипетку, благодаря чему может переносить жидкие реагенты или их растворы и дозировать растворители (переносы жидкостей показаны синими стрелками на рис. 2). Для исключения загрязнения реагентов и образцов предусмотрена смена наконечников пипетки – чистые наконечники берутся из хранилища наконечников, а для грязных предусмотрен сброс. Дополнительно на манипуляторе имеется устройство для открытия/закрытия реакторов и хранилищ, что необходимо для предотвращения испарения при выполнении синтезов и при длительном хранении.

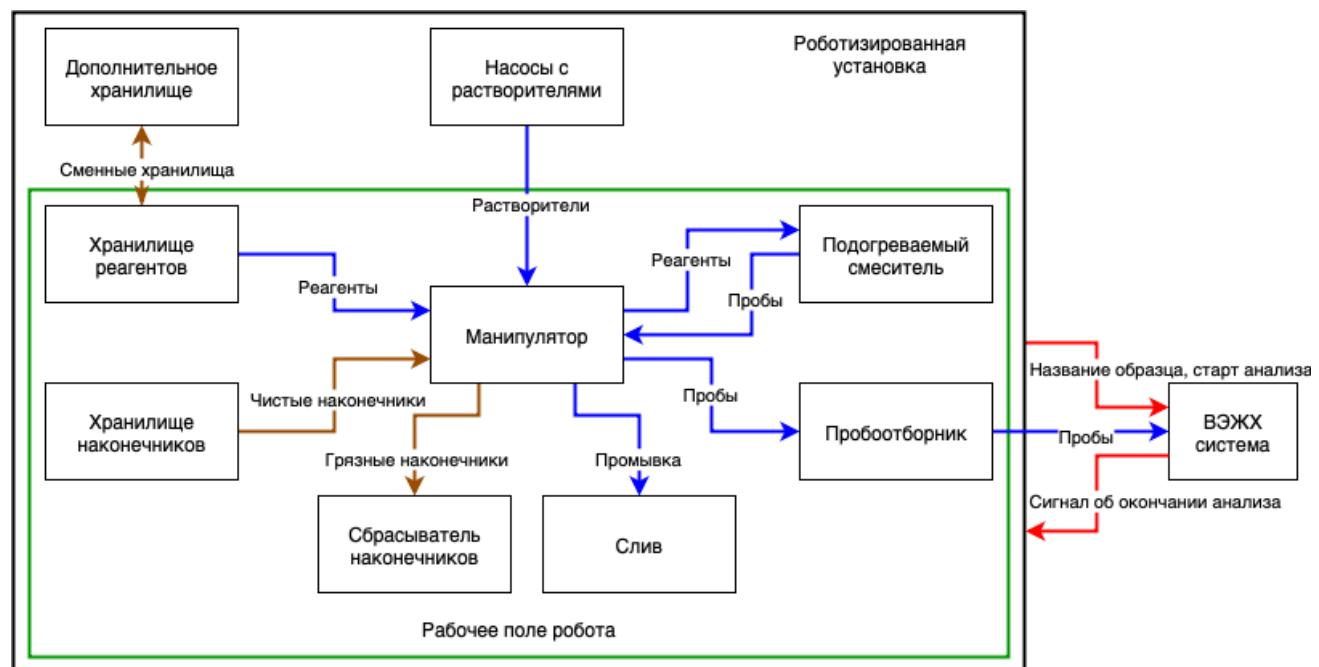


Рис. 2. Блок-схема установки.

Зеленым цветом выделено рабочее поле робота, синим – потоки жидкостей (растворителей, растворов реагентов и проб), коричневым – физически сменяемые части (наконечники, хранилища с реагентами), красным – обмен сигналов с внешним оборудованием (ВЭЖХ-система).

Реагенты хранятся в сменных хранилищах, вместимостью по 96 позиций, замена которых между рабочим полем и стойкой хранилища осуществляется с помощью самодельной роборуки. Для осуществления важного этапа любого синтеза – перемешивания с поддержанием определенной температуры – в рабочем поле находится подогреваемый смеситель. Для выполнения анализа имеется пробоотборник, в который переносится образец после синтеза, разбавляется растворителем и переносится в ВЭЖХ-систему. Кроме переноса самих образцов взаимодействие с хроматографической системой осуществляется и путем отправки названия образца и команды на старт анализа, а также получение обратных сигналов о готовности петли к внесению следующего образца и об окончании анализа.

Очень важной частью работы стало создание собственной библиотеки ChemBot для управления отдельными устройствами роботизированной установки на языке Python, а также клиентского веб-сервера для управления всей системой. Отметим, что контроль за роботизированной установкой и выполнение команд осуществляются с помощью одноплатного компьютера Raspberry Pi.

При «ручной» работе с установкой пользователь только вводит схемы реакций и конфигурацию хранилища робота, после чего робот автоматически пересчитывает объемы всех реагентов с учетом количества искомого вещества в хранилище, проводит приготовление реакционной смеси, проведение реакций и их анализ после завершения времени реакции.

Для просмотра хода выполнения нескольких синтезов и содержимого хранилищ и реакторных зон был создан веб-интерфейс, представленный на рис. 3. Интерфейс включает три колонки: слева представлены реакторные зоны (при нажатии на реакторы открывается карточка с синтезом, назначенным в этот реактор), в центре – информация по синтезам с графиком временной линии их выполнения, справа можно посмотреть расположение и количества веществ в хранилище. Разработанное интерактивное веб-приложение позволяет просматривать состояния смесителей нагревателей, ход выполнения всех синтезов (их запланированное время запуска, время, прошедшее с момента начала синтеза), содержимое хранилищ веществ, растворителей и держателя пипеток.

Программно-аппаратный комплекс также способен автоматически анализировать хроматограммы полученных реакционных смесей и передавать эти данные для обучения ИИ и/или активного обучения по ходу выполнения экспериментов. Однако в настоящей работе использовалось встроенное ПО хроматографа ClarityChrom [14] для обработки результатов хроматограмм выполненных синтезов, т. к. собственный подход автоматического анализа хроматограмм находится на этапе разработки. Преимуществами использования собственного подхода должны стать такие важные аспекты, как обнаружение зашкаливающих пиков и недостаточной интенсивности всех пиков, что позволит дать обратную связь на выполнение повторного анализа с меньшим или большим разбавлением образца для получения корректных результатов.

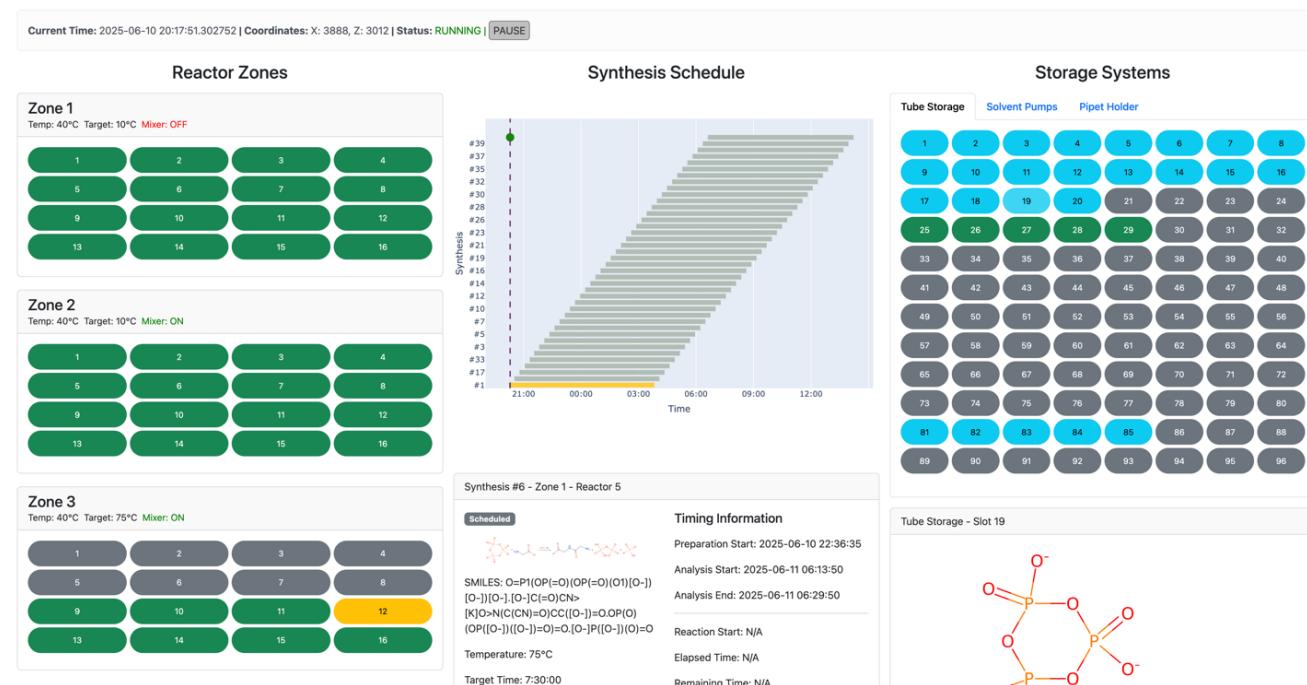


Рис. 3. Веб-приложение для отслеживания хода выполнения синтезов (по центру), просмотра конфигурации хранилищ (справа) и состояний реакторных зон (слева).

В качестве алгоритмов ИИ для предсказания путей синтеза могут быть использованы модели оптимизации отдельных типов реакций [10, 11], модели

предсказания оптимального пути синтеза целевых молекул [12] или модели поиска новых путей синтеза [13]. Кроме того, при наличии подходящих баз данных с помощью машинного обучения могут быть разработаны и новые модели.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

После настройки и контроля правильности функционирования отдельных узлов системы (такие, как работа с крышками и пипетками, правильность дозирования, перемешивание и поддержание температуры и т. д.) точность и воспроизводимость пробоподготовки были проверены путем автоматизированного приготовления и анализа образцов для построения калибровочной зависимости из одного концентрированного исходного раствора. Было приготовлено пять различных концентраций, каждая из которых воспроизводилась трижды. В результате установлено, что созданная установка обеспечивает достаточное для синтезов качество приготовления образцов – погрешность в приготовлении не превосходит 2%, что сопоставимо с точностью использованной для анализа обращенной-фазовой хроматографии с градиентным режимом (буферный раствор в воде – ацетонитрил).

Для проверки полной работоспособности робота-химика были проведены серии пробных синтезов альдольной конденсации (схема реакции представлена на рис. 4) с автоматизированным проведением анализа и ручной обработкой хроматограмм.

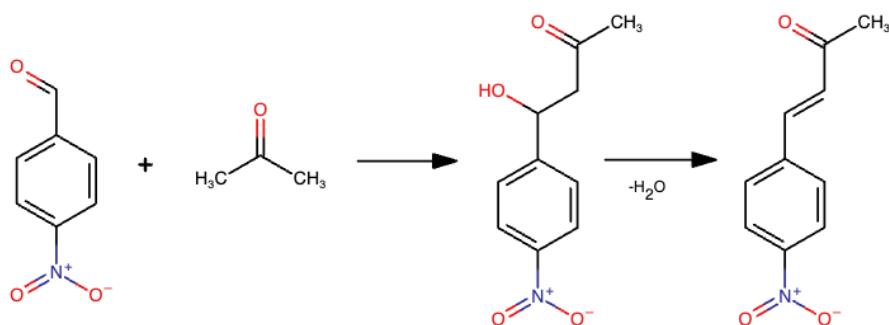


Рис. 4. Реакция альдольной конденсации нитробензальдегида и ацетона с участием аминокислотных комплексов цинка в качестве катализаторов.

В экспериментах варьировались количества катализатора и щелочи, а также температура. В качестве аминокислот в бис-комплексе цинка выступали: глицин,

пролин, глутаминовая кислота, аспарагин, глутамин, изолейцин, аргинин и гистидин. Примеры результатов осуществленных синтезов при одном из наборов экспериментальных условий представлены на рис. 5, из которого видно, что наиболее эффективным катализатором является бис-пролинат цинка.



Рис. 5. Влияние бис-аминокислотных комплексов цинка на конверсию. Условия: комнатная температура, 0.1 м. % катализатора, 0.05 м. % щелочи.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленная роботизированная установка позволяет осуществлять химические синтезы с последующим отбором проб и их анализом на хроматографе в автоматизированном режиме. Одним из важных ее достоинств является параллельное проведение синтезов, что с учетом времени ВЭЖХ-анализа (около 2–3 образцов в час в зависимости от методики разделения) позволяет осуществлять до 48 синтезов в сутки, что делает ее удобной платформой для проверки путей синтеза, а также для оптимизации условий реакции. В нашей научной группе в настоящее время активно разрабатываются методы предсказания путей синтеза целевых соединений и оптимизации реакционных условий с использованием машинного обучения и анализа больших данных. Следующим этапом исследований станет объединение всех разработок – роботизированной платформы, алгоритмов ИИ и систем адаптивной оптимизации – в единую интегрированную систему.

Такое сочетание роботизации и ИИ в перспективе позволит замкнуть цикл «предсказание – синтез и анализ – подтверждение или изменение модели» и продвинуться в сторону автоматизированных лабораторий.

Благодарности

Работа выполнена в рамках государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Tom G., Schmid S.P., Baird S.G., Cao Y., Darvish K., Hao H., Lo S., Pablo-García S., Rajaonson E.M., Skreta M., Yoshikawa N., Corapi S., Akkoc G.D., Strieth-Kalthoff F., Seifrid M., and Aspuru-Guzik A.* Self-Driving Laboratories for Chemistry and Materials Science // *Chemical Reviews*. 2024. Vol. 16, No. 124, P. 9633–9732.
<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.4c00055>
2. *Seifrid M., Pollice R., Aguilar-Granda A., Morgan Chan Z., Hotta K., Ser C.T., Vestfrid J., Wu T.C., Aspuru-Guzik A.* Autonomous Chemical Experiments: Challenges and Perspectives on Establishing a Self-Driving Lab // *Accounts of Chemical Research*. 2022. Vol. 55, I. 17. P. 2454–2466. <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.2c00220>
3. *Burger B., Maffettone P.M., Gusev V.V., Aitchison C.M., Bai Y., Wang X., Li X., Alston B.M., Li B., Clowes R., Rankin N., Harris B., Spick R.S., Cooper A.I.* A mobile robot chemist // *Nature*. 2020. Vol. 583. P. 237–241.
<https://doi.org/10.1038/s41586-020-2442-2>
4. *Martin K.N., Rubsamen M.S., Kaplan N.P., Hendrick M.P.* Method for Interfacing a Plate Reader Spectrometer Directly with an OT-2 Liquid Handling Robot // *ChemRxiv*. 2022. <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2022-6z4q1>
5. *Sanchez-Lengeling B., Aspuru-Guzik A.* Inverse molecular design using machine learning: Generative models for matter engineering // *Science*. 2018. Vol. 361, I. 6400. P. 360–365. <https://doi.org/10.1126/science.aat2663>
6. *Manzano J.S., Hou W., Zalesskiy S.S., Frei P., Wang H., Kitson P.J., Cronin L.* An autonomous portable platform for universal chemical synthesis // *Nature Chemistry*. 2022. Vol. 14. P. 1311–1318. <https://doi.org/10.1038/s41557-022-01016-w>
7. *Lee E.C., Salley D., Sharma A., Cronin L.* AI-Driven Robotic Crystal Explorer for Rapid Polymorph Identification // *arXiv*. 2024.
<https://doi.org/10.48550/arXiv.2409.05196>

8. Автоматизированная станция пробоподготовки LifeBot.

URL: <https://evotech-mg.com/products/avtomatizirovannaya-stanciya-probopodgotovki>

9. Separations. Analytical Instruments. Smartline HPLC Series.

URL: <https://separations.nl/en/products/detail/smartline-hplc-series-knauer>

10. Afonina V.A., Mazitov D.A., Nurmukhametova A., Shevelev M.D., Khasanova D.A., Nugmanov R.I., Burilov V.A., Madzhidov T.I., Varnek A. Prediction of Optimal Conditions of Hydrogenation Reaction Using the Likelihood Ranking Approach // International Journal of Molecular Sciences. 2022. Vol. 23, I. 1. P. 248.

<https://doi.org/10.3390/ijms23010248>

11. Ahneman D.T., Estrada J.G., Dreher S.D., Doyle A.G. Predicting reaction performance in C–N cross-coupling using machine learning // Science. 2018. Vol. 360, I. 6385. P. 186–190. <https://doi.org/10.1126/science.aar5169>

12. Kashafutdinova I.M., Poyezzaeva A., Gimadiev T., Matzhidov T. Active learning approaches in molecule pKi prediction // Molecular Informatics. 2024. Vol. 44, I. 1. Art. e202400154. <https://doi.org/10.1002/minf.202400154>

13. Bort W., Baskin I.I., Gimadiev T., Mukanov A., Nugmanov R., Sidorov P., Marcou G., Horvath D., Klimchuk O., Madzhidov T., Varnek A. Discovery of novel chemical reactions by deep generative recurrent neural network // Scientific Reports. 2021. Vol. 11. P. 3178. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-81889-y>

14. Knauer. ClarityChrom CDS.

URL: <https://www.knauer.net/software-claritychrom-cds>

INTELLIGENT CHEMIST ROBOT: TOWARDS AN AUTONOMOUS LABORATORY

M. S. Adygamov¹ [0009-0006-2364-9867], A. O. Golub² [0009-0004-0090-0292],

E. R. Saifullin³ [0000-0003-0823-9051], T. R. Gimadiev⁴ [0000-0001-5012-0308],

N. Yu. Serov⁵ [0000-0002-5772-8399]

^{1,3-5}*Federal Research Center “Kazan Scientific Center of Russian Academy of Science”, Kazan, Russia*

¹⁻⁵*Kazan Federal University, A.M. Butlerov Chemistry Institute, Kazan, Russia*

¹musa20930@gmail.com, ²toxa.mix7@gmail.com, ³mr.emilsr@gmail.com,

⁴Timur.Gimadiev@gmail.com, ⁵Serov.Nikita@gmail.com

Abstract

This paper describes a hardware and software platform that enables automated chemical syntheses, including the preparation, heating, and mixing of reaction mixtures, as well as post-synthesis dilution sampling and sending for high-performance liquid chromatography (HPLC) analysis, followed by automated processing of the results. A custom Python library, ChemBot, was developed to control individual robotic devices, and a client web server was created to manage the entire system. A web interface was created to view the system status and the progress of syntheses. The performance of the entire platform for performing experiments was tested by performing aldol condensation syntheses, where the ratio of reagents, the catalyst and its amount, the temperature and time of synthesis were varied. Writing custom code to monitor and control the entire system is an important step toward integrating the robotic system with artificial intelligence (AI), which will ultimately enable the transition to an autonomous laboratory, where target molecule prediction and synthesis, experimental execution and analysis, and, if necessary, refinement or modification of the model will be performed automatically, without the need for human intervention.

Keywords: *artificial intelligence, robotics, chemical synthesis, self-driving lab, chemoinformatics.*

REFERENCES

1. *Tom G., Schmid S.P., Baird S.G., Cao Y., Darvish K., Hao H., Lo S., Pablo-García S., Rajaonson E.M., Skreta M., Yoshikawa N., Corapi S., Akkoc G.D., Strieth-Kalthoff F., Seifrid M., and Aspuru-Guzik A.* Self-Driving Laboratories for Chemistry and Materials Science // *Chemical Reviews*. 2024. Vol. 16, No. 124, P. 9633–9732.
<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.4c00055>
2. *Seifrid M., Pollice R., Aguilar-Granda A., Morgan Chan Z., Hotta K., Ser C.T., Vestfrid J., Wu T.C., Aspuru-Guzik A.* Autonomous Chemical Experiments: Challenges and Perspectives on Establishing a Self-Driving Lab // *Accounts of Chemical Research*. 2022. Vol. 55, I. 17. P. 2454–2466. <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.2c00220>
3. *Burger B., Maffettone P.M., Gusev V.V., Aitchison C.M., Bai Y., Wang X., Li X., Alston B.M., Li B., Clowes R., Rankin N., Harris B., Spick R.S., Cooper A.I.* A mobile robot chemist // *Nature*. 2020. Vol. 583. P. 237–241.
<https://doi.org/10.1038/s41586-020-2442-2>
4. *Martin K.N., Rubsamen M.S., Kaplan N.P., Hendrick M.P.* Method for Interfacing a Plate Reader Spectrometer Directly with an OT-2 Liquid Handling Robot // *ChemRxiv*. 2022. <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2022-6z4q1>
5. *Sanchez-Lengeling B., Aspuru-Guzik A.* Inverse molecular design using machine learning: Generative models for matter engineering // *Science*. 2018. Vol. 361, I. 6400. P. 360–365. <https://doi.org/10.1126/science.aat2663>
6. *Manzano J.S., Hou W., Zalesskiy S.S., Frei P., Wang H., Kitson P.J., Cronin L.* An autonomous portable platform for universal chemical synthesis // *Nature Chemistry*. 2022. Vol. 14. P. 1311–1318. <https://doi.org/10.1038/s41557-022-01016-w>
7. *Lee E.C., Salley D., Sharma A., Cronin L.* AI-Driven Robotic Crystal Explorer for Rapid Polymorph Identification // *arXiv*. 2024.
<https://doi.org/10.48550/arXiv.2409.05196>
8. Автоматизированная станция пробоподготовки LifeBot.
URL: <https://evotech-mg.com/products/avtomatizirovannaya-stanciya-probopodgotovki>
9. Separations. Analytical Instruments. Smartline HPLC Series.
URL: <https://separations.nl/en/products/detail/smartline-hplc-series-knauer>

10. Afonina V.A., Mazitov D.A., Nurmukhametova A., Shevelev M.D., Khasanova D.A., Nugmanov R.I., Burilov V.A., Madzhidov T.I., Varnek A. Prediction of Optimal Conditions of Hydrogenation Reaction Using the Likelihood Ranking Approach // International Journal of Molecular Sciences. 2022. Vol. 23, I. 1. P. 248.
<https://doi.org/10.3390/ijms23010248>
11. Ahneman D.T., Estrada J.G., Dreher S.D., Doyle A.G. Predicting reaction performance in C–N cross-coupling using machine learning // Science. 2018. Vol. 360, I. 6385. P. 186–190. <https://doi.org/10.1126/science.aar5169>
12. Kashafutdinova I.M., Poyezzhaeva A., Gimadiev T., Matzhidov T. Active learning approaches in molecule pKi prediction // Molecular Informatics. 2024. Vol. 44, I. 1. Art. e202400154. <https://doi.org/10.1002/minf.202400154>
13. Bort W., Baskin I.I., Gimadiev T., Mukanov A., Nugmanov R., Sidorov P., Marcou G., Horvath D., Klimchuk O., Madzhidov T., Varnek A. Discovery of novel chemical reactions by deep generative recurrent neural network // Scientific Reports. 2021. Vol. 11. P. 3178. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-81889-y>
14. Knauer. ClarityChrom CDS.

URL: <https://www.knauer.net/software-claritychrom-cds>

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



АДЫГАМОВ Муса Шамильевич – учится на 1 курсе аспирантуры Казанского федерального университета в Институте геологии и нефтегазовых технологий по специальности 2.8.4 Разработка и эксплуатация нефтяных и газовых месторождений. В настоящее время работает младшим научным сотрудником в Федеральном исследовательском центре «Казанский научный центр Российской академии наук». Область научных интересов: машинное обучение, QSPR моделирование, автоматизация химических/биологических экспериментов.

Musa Shamilevich ADYGAMOV – a 1st-year postgraduate student at the Kazan Federal University, Institute of Geology and Petroleum Technologies, specialty 2.8.4 Development of oil and gas deposits. He currently works as a junior researcher at the Federal Research Center "Kazan Scientific Center of the Russian Academy of Sciences". Research interests: machine learning, QSPR modelling, chemical/biological experiments automation.

email: musa20930@gmail.com

ORCID: 0009-0006-2364-9867



ГОЛУБЬ Антон Олегович – учится на 2 курсе магистратуры Казанского (Приволжского) федерального университета на кафедре органической и медицинской химии по специальности 04.04.01 «Химия» и профилю «Хемоинформатика и молекулярное моделирование». Область научных интересов: машинное обучение, программирование.

Anton Olegovich GOLUB – Second-year Master's student at Kazan Federal University. Specializing in Chemoinformatics and Molecular Modeling (Chemistry degree 04.04.01) at the Department of Organic and Medicinal Chemistry. Research interests: machine learning and programming.

email: toxamix7@gmail.com

ORCID: 0009-0004-0090-0292



САЙФУЛЛИН Эмиль Ринатович – закончил Казанский федеральный университет. В 2019 году защитил диссертацию на соискание степени кандидата технических наук по специальности 01.04.14 «Теплофизика и теоретическая теплотехника». В настоящее время работает старшим научным сотрудником в Федеральном исследовательском центре «Казанский научный центр Российской академии наук», а также старшим научным сотрудником Казанского федерального университета. Область научных интересов: теплофизика, физхимия, нефтедобыча, хемоинформатика.

Emil Rinatovich SAIFULLIN – graduated from Kazan Federal University. In 2019, he defended his dissertation for the degree of Candidate of Technical Sciences in the specialty 01.04.14 "Thermal Physics and Theoretical Heat Engineering". He currently works as a senior researcher at the Federal Research Center "Kazan Scientific Center of the Russian Academy of Sciences" and as a senior researcher at Kazan Federal University. His research interests include thermal physics, physical chemistry, oil production, and chemoinformatics.

email: mr.emilsr@gmail.com

ORCID: 0000-0003-0823-9051

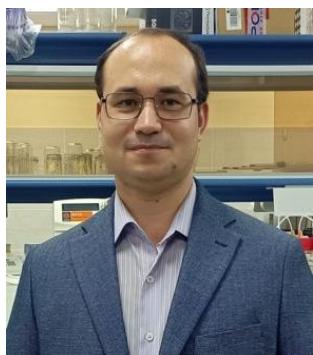


ГИМАДИЕВ Тимур Рустемович – закончил университет Страсбурга, Франция (UniStra, France). В 2018 получил степень доктора философии (PhD) в университете Страсбурга по направлению Хемоинформатика, химические науки. В настоящее время работает старшим научным сотрудником в Федеральном исследовательском центре «Казанский научный центр Российской академии наук», а также доцентом кафедры органической химии Химического института им. А.М. Бутлерова Казанского (Приволжского) федерального университета. Область научных интересов: роботизированные лаборатории, координационная химия, моделирование химических процессов, хемоинформатика, искусственный интеллект в химии и биохимии.

Timur Rustemovich GIMADIEV – graduated from the University of Strasbourg, France (UniStra, France). In 2018, he earned his PhD in Chemoinformatics and Chemical Sciences from the University of Strasbourg. Currently, he serves as a senior researcher at the Federal Research Centre “Kazan Scientific Center of the Russian Academy of Sciences” and as an Associate Professor at the Department of Organic Chemistry, A.M. Butlerov Institute of Chemistry, Kazan (Volga Region) Federal University. His research interests include robotic laboratories, coordination chemistry, chemical process modeling, chemoinformatics, and artificial intelligence in chemistry and biochemistry.

email: Timur.Gimadiev@gmail.com

ORCID: 0000-0001-5012-0308



SEROV Никита Юрьевич – закончил Казанский (Приволжский) федеральный университет (КФУ). В 2021 году защитил диссертацию на соискание степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01 «Неорганическая химия». В настоящее время работает ведущим научным сотрудником в Федеральном исследовательском центре «Казанский научный центр Российской академии наук», а также доцентом кафедры неорганической химии Химического института им. А.М. Бутлерова КФУ. Область научных интересов: роботизированные лаборатории, координационная химия, моделирование химических процессов, искусственный интеллект в химии и биохимии.

Nikita Yurievich SEROV – graduated from Kazan Federal University. In 2021, he defended his dissertation for the degree of Candidate of Chemical Sciences in the specialty 02.00.01 "Inorganic Chemistry". He currently works as a leading researcher at the Federal Research Center "Kazan Scientific Center of the Russian Academy of Sciences" and as an associate professor in the Department of Inorganic Chemistry at the A.M. Butlerov Chemical Institute of Kazan Federal University. Research interests: robotic laboratories, coordination chemistry, chemical process modelling, and artificial intelligence in chemistry and biochemistry.

email: Serov.Nikita@gmail.com

ORCID: 0000-0002-5772-8399

Материал поступил в редакцию 11 октября 2025 года