

В России разработана технология, которая упростит для учёных исследования процессов горения в астрохимии

Учёные из МГУ с помощью искусственного интеллекта научились предсказывать спектры сложных органических молекул, известных как полициклические ароматические углеводороды (ПАУ). Эти молекулы встречаются как в дыме костра на Земле, так и в далёком космосе. Исследование показывает, как ИИ помогает не только в экологии, но и в понимании химических процессов во Вселенной.

ПАУ — это органические соединения с несколькими бензольными кольцами, которые образуются при сжигании топлива и мусора, а также широко распространены в межзвёздной пыли и атмосферах планет. Учёные считают, что такие молекулы могли сыграть роль в зарождении жизни на Земле, участвуя в синтезе РНК в древних условиях. Поэтому изучение ПАУ важно и для экологии, и для астрохимии.

Раньше определение спектров ПАУ было сложной задачей из-за ограниченного числа экспериментальных данных и больших затрат на расчёты. Теперь учёные применили машинное обучение, чтобы предсказывать инфракрасные спектры таких молекул с учётом их заряда. Особое внимание уделили моделированию как нейтральных, так и заряженных ПАУ. По словам аспиранта МГУ Бабкена Бегляряна, пока сложно предсказывать спектры молекул с азотом и кислородом, но планируется использовать новые методы обучения, чтобы повысить точность. Другой участник исследования, Александр Закусин, отметил, что новая модель позволит точнее анализировать состав межзвёздной среды и атмосфер планет.