

Учёные из Москвы разработали новый метод, который помогает находить устойчивые формы молекул, не замечаемые даже самыми современными программами. Это важно для разработки лекарств и катализаторов, так как одна «пропущенная» форма может сильно исказить результаты моделирования.

Молекулы могут принимать разные пространственные формы (конформации), и каждая из них обладает уникальными свойствами. Современные методы не всегда находят все возможные варианты, особенно у крупных молекул.

Исследователи из Института органической химии им. Зелинского РАН и МГУ им. Ломоносова предложили метод, который сочетает квантовую химию и машинное обучение. Он помогает находить недостающие формы всего за 20–30 попыток.

Алгоритм использует байесовский подход — он может работать даже при небольшом объёме данных, что особенно полезно в химии, где эксперименты часто дорогие и сложные.

Метод протестировали на 60 молекулах, включая пептиды и лекарственные соединения. В 24 случаях он нашёл до 28 новых форм, которые не заметила система CREST — одна из самых надёжных на сегодня.