

Научная статья

УДК 544.169

[https://doi.org/10.14258/izvasu\(2026\)1-03](https://doi.org/10.14258/izvasu(2026)1-03)

## Применение машинного обучения в физикохимии активных веществ

Михаил Андреевич Зарудских<sup>1</sup>, Александр Сергеевич Безносюк<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия,  
zarudskih@yandex.ru

<sup>2</sup>Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия, bsa1953@mail.ru

Original article

## Application of Machine Learning in Physicochemistry of Active Substances

Mikhail A. Zarudskikh<sup>1</sup>, Sergey A. Beznosyuk<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Altai State University, Barnaul, Russia, zarudskih@yandex.ru

<sup>2</sup>Altai State University, Barnaul, Russia, bsa1953@mail.ru

**Аннотация.** Представлены последние достижения в области машинного обучения для решения актуальных задач физикохимии активных веществ. В статье рассмотрено, как интеллектуальный анализ данных и нейросетевые модели способствуют преодолению ограничений традиционных методов, обозреваются системы, способные обнаруживать неизвестные реакции в архивных данных масс-спектрометрии (MEDUSA), предсказывать молекулярные структуры по масс-спектрам (Spec2Mol) и генерировать спектры для новых соединений, что решает проблему дефицита эталонных образцов. В квантовой химии демонстрируется успех гибридных методов (AIQM1), которые объединяют квантово-механические расчеты с нейросетями для достижения высокой точности при значительном сокращении вычислительных затрат. Также рассмотрено применение машинного обучения в материаловедении для автоматического анализа микроскопических изображений с целью изучения дефектов и организации наночастиц. В контексте органического синтеза и дизайна лекарств представлены подходы, использующие машинное обучение для предсказания биологической активности молекул (MI-QSAR) и выходов химических реакций (Yield-BERT). В заключение подчеркивается, что машинное обучение является мощным инструментом, дополняющим классические подходы и ускоряющим научные открытия.

**Ключевые слова:** физикохимия, машинное обучение, масс-спектрометрия, базы данных, активное вещество

**Abstract.** The paper presents the latest advances in machine learning for solving pressing problems in the physicochemistry of active substances. It discusses how data mining and neural network models help overcome the limitations of traditional methods. It reviews systems capable of detecting unknown reactions in archived mass spectrometry data (MEDUSA), predicting molecular structures from mass spectra (Spec2Mol), and generating spectra for new compounds, thereby addressing the shortage of reference samples. In quantum chemistry, the success of hybrid methods (AIQM1) is demonstrated. These methods combine quantum mechanical calculations with neural networks to achieve high accuracy while significantly reducing computational costs. The application of machine learning in materials science for the automatic analysis of microscopic images to study defects and the organization of nanoparticles is also discussed. In the context of organic synthesis and drug design, approaches using machine learning to predict the biological activity of molecules (MI-QSAR) and the yields of chemical reactions (Yield-BERT) are presented. In conclusion, it is emphasized that machine learning is a powerful tool that complements classical approaches and accelerates scientific discoveries.

**Keywords:** physicochemistry, machine learning, mass spectrometry, databases, active substance

*Для цитирования:* Зарудских М.А., Безносюк С.А. Применение машинного обучения в физикохимии активных веществ // Известия Алтайского государственного университета. 2026 № 1 (147). С. 30–35. [https://doi.org/10.14258/izvasu\(2026\)1-03](https://doi.org/10.14258/izvasu(2026)1-03).

### Введение

В настоящее время наблюдается интенсивное развитие методов машинного обучения. Появление более мощного аппаратного обеспечения, усовершенствование существующих и разработка новых алгоритмов обучения, а также изменение требований к качеству и подготовке данных способствуют расширению круга задач, решаемых при помощи этих методов машинного обучения: от распознавания образов до решения комплексных задач.

Особый интерес представляет применение инструментов машинного обучения в физикохимии активных веществ — междисциплинарной предметной области исследования прогностических моделей получения активных веществ с заранее заданными физическими и химическими свойствами. Средства машинного обучения позволяют решать широкий круг таких прогностических задач за счет анализа больших объемов данных, выявления скрытых закономерностей и моделирования сложных процессов. Благодаря этому машинное обучение становится эффективным инструментом для автоматизации и выявления скрытых закономерностей, что существенно сократит время и затраты на исследование [1, 2, 3].

*Цель работы* — анализ актуальных тенденций и последних результатов применения инструментов и моделей машинного обучения в решении актуальных задач физикохимии активных веществ.

### Применение методов машинного обучения для решения задач современной физикохимии активных веществ

Современные физико-химические исследования генерируют большие объемы данных — от масс-спектрометрических измерений и результатов квантово-химических расчетов до массивов данных о структуре и активности соединений. Традиционные подходы к обработке подобных данных часто ограничены необходимостью трудоемкого анализа. Для решения этой проблемы исследователи [4] разработали поисковую систему MEDUSA Search на основе методов машинного обучения, которая способна обнаруживать ранее неизвестные химические реакции в архивных данных масс-спектрометрии. Система объединяет несколько технологических компонентов: алгоритм поиска по изотопным распределениям ионов, регрессионную модель для оценки порогового значения присутствия иона и классификатор

*For citation:* Zarudskikh M.A., Beznosyuk S.A. Application of Machine Learning in Physicochemistry of Active Substances. *Izvestiya of Altai State University*. 2026. No 1 (147). P. 30–35. (In Russ.). [https://doi.org/10.14258/izvasu\(2026\)1-03](https://doi.org/10.14258/izvasu(2026)1-03).

для фильтрации ложноположительных результатов. MEDUSA Search демонстрирует высокую производительность, анализируя более 8 терабайт данных из 22 000 масс-спектров за 8–11 минут на один целевой ион. Для генерации гипотез о возможных химических структурах используются различные стратегии: ручной выбор характерных фрагментов, автоматическая фрагментация по алгоритму BRICS (Breaking of Retrosynthetically Interesting Chemical Substructures) и мультимодальные языковые модели. Работа демонстрирует концепцию «экспериментирование в прошлом»: вместо проведения новых экспериментов используются уже существующие базы данных с применением интеллектуальных алгоритмов поиска, что открывает путь оптимизированным по затратам и времени исследованиям.

Установление структуры химических соединений представляет собой фундаментальную задачу в физикохимии активных веществ с приложениями в разработке лекарств, прецизионной медицине и открытии биомаркеров. Традиционный подход заключается в получении масс-спектра молекулы и последующем поиске ее структуры в спектральных базах данных, однако этот метод не работает для новых молекул, структура которых отсутствует в базе данных. Авторы [5] предлагают Spec2Mol — архитектуру глубокого обучения для рекомендации молекулярных структур исключительно на основе масс-спектров. Spec2Mol основан на архитектуре энкодер — декодер, где энкодер обучается представлением спектров, а декодер, предобученный на массивном наборе данных химических структур для перевода между различными молекулярными представлениями, реконструирует нотации SMILES рекомендуемых структур. Декодер прошел предварительную подготовку в режиме самообучения на 135 миллионах молекул из открытых баз данных PubChem и ZINC-12 для трансляции случайных нотаций SMILES в канонические. Энкодер спектров обучался на коммерческом наборе данных NIST 2020 (содержащем более 1 миллиона спектров) от 30 тысяч соединений, чтобы генерировать векторные представления (эмбединги), соответствующие эмбедингам автоэнкодера.

Входные данные представляли четыре MS/MS-спектра, полученные при разных условиях: два прекурсорных иона и два уровня энергии столкновения. Модель оценивалась через молекулярное сходство между рекомендованными и эталонными структурами на тестовом наборе из 1000 молекул. Spec2Mol кор-

ректно идентифицировал точную структуру в 7 % случаев и точную молекулярную формулу в 39 % случаев. Анализ максимальной общей подструктуры показал, что общая подструктура составляет в среднем около 70 % размера эталонной молекулы для ближайшей предсказанной структуры и более 50 % для средней. Коэффициент косинусного сходства фингерпринтов достиг максимального значения 0.53, что демонстрирует способность модели идентифицировать ключевые молекулярные подструктуры из масс-спектра. Производительность снижалась при отсутствии более двух спектров на входе и для молекул с большими кольцами или редкими атомами, недостаточно представленными в обучающих данных. Сравнительная оценка с SIRIUS 4 и CSI:FingerID методом на основе деревьев фрагментации и поиска по базе данных проводилась на 307 случаях, где SIRIUS не смог найти точного совпадения. Spec2Mol продемонстрировал сопоставимую или превосходящую производительность по метрикам структурного сходства, несмотря на то что работает исключительно с сырыми спектрами без использования деревьев фрагментации. Работа демонстрирует потенциал глубокого обучения для de-novo генерации молекулярных структур и дополняет существующие методы, особенно для идентификации новых соединений.

Полноценная идентификация исследуемого соединения требует сравнения с эталонными масс-спектрами, доступность которых критически ограничена. Эту фундаментальную проблему дефицита верифицированных данных решают методы предсказания масс-спектров на основе инструментов машинного обучения. В масс-спектрометрии обеспечивающим высокую специфичность и чувствительность методом идентификации соединений является tandemная масс-спектрометрия (MS/MS или MS<sup>2</sup>) [6] с использованием сертифицированных стандартов. Однако поддержание обширных коллекций данных стандартов чрезвычайно дорого — особенно в контексте новых психоактивных веществ, где более 1100 новых соединений появились за последнее десятилетие. Для многих веществ стандарты либо коммерчески недоступны, либо еще не получены и не изучены. Для преодоления этого ограничения исследователи [7] разработали NPS-MS — специализированную модель глубокой нейронной сети для предсказания MS/MS спектров новых психоактивных веществ с применением трансферного обучения. Модель была обучена на 1872 экспериментальных спектрах 624 соединений, полученных на системах Q-TOF (Quadrupole Time-of-Flight) при энергиях столкновения 10, 20 и 40 эВ. Используя предобученную модель CFM-ID 4.0 в качестве базы, NPS-MS достигла улучшения точности на 44–59 % по коэффициенту Дайса и 72–77 % по скалярному произведению. Разработанная модель обучается на имеющихся экспериментальных данных и спо-

собна генерировать высокоточные теоретические спектры для соединений, для которых отсутствуют сертифицированные стандарты. Модель демонстрирует высокую точность предсказания при идентификации известных новых психоактивных веществ (69,8 % точность в базе HighResNPS) и способна работать с базами данных, содержащими миллионы структур, что открывает возможности значительного расширения идентификации неизвестных и даже теоретически предсказанных соединений без необходимости приобретения дорогостоящих эталонных образцов.

Традиционные высокоточные методы квантовой химии требуют больших вычислительных ресурсов, что ограничивает их применимость для масштабного молекулярного скрининга. В работе [8] авторы обратились к фундаментальному противоречию квантово-химических расчетов: необходимости выбора между точностью и скоростью вычислений. Высокоуровневые методы ab initio, такие как CCSD(T) (Coupled Cluster Singles and Doubles with Perturbative Triples) [9], обеспечивают исключительную точность, но требуют экспоненциально растущих вычислительных ресурсов, делая их непрacticными для больших молекулярных систем. Полуэмпирические квантово-механические методы работают в тысячи раз быстрее, но имеют трудности с систематическими ошибками. Методы теории функционала плотности занимают промежуточное положение, однако остаются недостаточно быстрыми для работы с большими химическими системами. Для преодоления этого барьера разработан гибридный подход, объединяющий квантовую механику и машинное обучение — AIQM1 (Artificial Intelligence-Enhanced Quantum Mechanical Method 1). Подход состоит из трех компонентов: модифицированный метод гамильтониана ODM2\*, нейросетевая коррекция ( $\Delta$ -обучение) и дисперсионные поправки D4 с трехчастичными вкладками Аксилрода — Теллера — Мута. Ансамбль из восьми нейронных сетей архитектуры ANI корректирует результаты ODM2\* для достижения точности метода ab initio квантовой химии CCSD(T) при сохранении вычислительной эффективности SQM-методов.

Обучение проводилось в два этапа: сначала на 4,6 млн геометрий с энергиями, рассчитанными с использованием метода теории функционала плотности с функционалом  $\omega$ B97X и качественным базисом def2-TZVPP, затем трансферное обучение на 0,5 млн точек данных, полученных с использованием метода квантовой химии CCSD(T). Важным преимуществом метода является сохранение переносимости на новые химические системы без переобучения. Валидация на 24 различных наборах данных (более 25 000 точек) продемонстрировала универсальность: средние абсолютные отклонения составили 0,9 ккал/моль для энтальпий образования, 0,007 Å для длин связей, 0,6 ккал/моль для нековалентных взаимодействий [8]. Метод успешно работает для нейтральных и заряженных молекул,

систем с переходными металлами, крупных структур ( $C_{60}$  и больше), а также для возбужденных состояний. Геометрическая оптимизация  $C_{60}$  с предложенным авторами подходом AIQM1 занимает 14 секунд против 31 минуты для DFT, открывая возможности для эффективного виртуального скрининга.

Сканирующая электронная микроскопия — ключевой метод изучения наноматериалов, в первую очередь катализаторов на основе металлических наночастиц. Понимание пространственной организации наночастиц на поверхности материала критически важно для контроля активности и селективности катализаторов. В наноматериалах обнаружен уникальный эффект упорядочивания: вместо случайного распределения металлические наночастицы демонстрируют пространственно-организованное поведение. Такое специфическое поведение вызвано неравномерной химической реактивностью углеродной поверхности — наночастицы преимущественно присоединяются к высокореактивным областям (дефектам структуры, границам графеновых листов, изгибам, точечным дефектам), выявляя их как контрастирующий агент. Авторы [10] представили два набора данных микроскопических изображений, демонстрирующих эффект упорядочивания наночастиц, состоящий из 1000 электронно-микроскопических изображений палладиевых наночастиц на углеродных материалах. Первый набор данных содержит 750 изображений преимущественно упорядоченных структур, где наночастицы палладия формируют разнообразные геометрические паттерны (линии, пересечения, сети, эллипсы, окружности). Вторым набором данных включены 250 изображений неупорядоченных материалов со случайным распределением частиц для сравнительного анализа. Полученные данные охватывают три уровня структурной организации в диапазоне от нанометров до микрометров: индивидуальные наночастицы и их массивы (1–20 нм), эффекты упорядочивания (20–200 нм), сложные иерархические паттерны (до ~100 мкм). Всего представлено более 1 миллиона наночастиц. Изображения записаны при различных увеличениях с детальными метаданными (ускоряющее напряжение, рабочее расстояние, режим детектирования). Наборы данных предназначены для разработки алгоритмов машинного обучения (сверточные нейросети, U-Net, W-Net, автокодировщики) для автоматического распознавания частиц, сегментации, кластеризации, классификации и количественной оценки степени структурной организации наноматериалов. Это открывает возможности для изучения корреляций между упорядочением и каталитическими свойствами материалов.

Ускорение квантово-химических расчетов открывает новые возможности для анализа материалов, однако для экспериментального исследования их структуры требуются эффективные методы визуализации

и анализа дефектов. Качество поверхности слоистых углеродных материалов (графен, графит) критически важно для их применения. Проблема заключается в том, что многие типы дефектов (границы зерен, топологические, точечные дефекты) остаются «скрытыми» при стандартной электронной микроскопии, поскольку недостаточен контраст поверхности из одинаковых элементов. Эти дефекты проявляются лишь при практическом использовании материала через различную химическую реактивность дефектных областей. Отсутствуют количественные методы оценки степени дефектности, невозможна автоматическая классификация типов дефектов, а ручной анализ тысяч микроскопических изображений медленный и субъективный. В работе [11] предложена концепция визуализации дефектов с использованием наночастиц палладия (1–5 нм) как контрастных агентов: комплекс разлагается при 80 °C в присутствии углеродного материала, нанося Pd-наночастицы на поверхность. Полуэмпирический квантово-химический метод GFN2-XTB и симуляции Монте-Карло подтвердили механизм: энергия связывания палладия с дефектами на 31–42 % выше, чем с бездефектными участками, что вызывает преимущественное закрепление частиц на дефектах и формирование упорядоченных паттернов. Для автоматизированного анализа изображений сканирующей электронной микроскопии разработан конвейер машинного обучения: сверточные нейронные сети (ResNet34, VGG) классифицируют степень упорядоченности с точностью 98,4 % и ROC AUC 0,995 — метрикой, показывающей способность модели различать классы; значение 0,995 указывает на практически идеальное разделение, где 1,0 соответствует безошибочной классификации. Сверточная нейронная сеть с U-образной структурой U-Net/FPN использует энкодер SE-ResNet50 как базовую архитектуру для извлечения признаков из изображений сканирующей электронной микроскопии, а затем сегментирует четыре типа дефектов (границы листов, границы зерен, топологические, точечные), достигая метрики качества сегментации IoU (Intersection over Union), равной 0,31, извлекая количественные характеристики структуры (длины дефектов через скелетонизацию). Анализ карт значимости показал, что сети обучились признакам, характерным для структуры и морфологии материалов.

### Выводы

Рассмотренные исследования демонстрируют значительный прогресс в интеграции инструментов машинного обучения в физикохимию активных веществ. Применение методов машинного обучения позволяет преодолеть ограничения традиционных подходов квантово-механических расчетов и экспериментальных методов в химических и биохимических приложениях.

Важно отметить, что успех этих методов основан не на замене традиционных подходов, а на их разумном дополнении возможностями машинного обучения. Сохранение физической и химической интерпретируемости и переносимости на новые активные вещества остается ключевым требованием при раз-

работке инструментов машинного обучения в физикохимии. Дальнейшее развитие этих направлений открывает перспективы для создания более эффективных технологий анализа и синтеза активных химических соединений.

### Библиографический список

1. Beck A.G., Muhoberac M., Randolph C.E., et al. Recent Developments in Machine Learning for Mass Spectrometry // *ACS Measurement Science Au*. 2024. Vol. 4. No 3. P. 233–246. <https://doi.org/10.1021/acsmesuresciau.3c00060>
2. Исаева Е.Р., Кокова Э.А., Смущенко Н.А. Искусственный интеллект в науке: новые методы исследований и автоматизации научного процесса // Развитие науки в XXI веке: научно-методические и практические аспекты : сборник научных трудов по материалам XXI Международной научно-практической конференции (г.к. Анапа, 03 января 2025 г.). Анапа: НИЦ ЭСП в ЮФО. 2025. С. 28–32.
3. Плеханов В.И. Искусственный интеллект как инструмент решения задач материаловедения // Актуальные вопросы науки 2025 : сборник статей XI Международной научно-практической конференции. Пенза: МЦНС «Наука и Просвещение». 2025. С. 34–37.
4. Kozlov K.S., Boiko D.A., Burykina J.V., et al. Discovering Organic Reactions with a Machine-Learning-Powered Deciphering of Tera-Scale Mass Spectrometry Data // *Nature Communications*. 2025. Vol. 16. No 1. P. 2587. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-56905-8>
5. Litsa E.E., Chenthamarakshan V., Das P., et al. An End-To-End Deep Learning Framework for Translating Mass Spectra to De-Novo Molecules // *Communications Chemistry*. 2023. Vol. 6. No 1. P. 132. <https://doi.org/10.1038/s42004-023-00932-3>
6. Peters-Clarke T.M., Coon J.J., Riley N.M. Instrumentation at the Leading Edge of Proteomics // *Analytical Chemistry*. 2024. Vol. 96. No 20. P. 7976–8010. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.3c04497>
7. Wang F., Pasin D., Skinnider M.A., et al. Deep Learning-Enabled MS/MS Spectrum Prediction Facilitates Automated Identification of Novel Psychoactive Substances // *Analytical Chemistry*. 2023. Vol. 95. No 50. P. 18326–18334. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.3c02413>
8. Zheng P., Zubatyuk R., WuW., et al. Artificial Intelligence-Enhanced Quantum Chemical Method with Broad Applicability // *Nature Communications*. 2021. Vol. 12. No 1. P. 7022. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-27340-2>
9. Ramabhadran R.O., Raghavachari K. Extrapolation to the Gold-Standard in Quantum Chemistry: Computationally Efficient and Accurate CCSD(T) Energies for Large Molecules Using an Automated Thermochemical Hierarchy // *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2013. Vol. 9. No 9. P. 3986–3994. <https://doi.org/10.1021/ct400465q>
10. Boiko D.A., Pentsak E.O., Cherepanova V.A., et al. Electron Microscopy Dataset for the Recognition of Nanoscale Ordering Effects and Location of Nanoparticles // *Scientific Data*. 2020. Vol. 7. No 1. P. 101. <https://doi.org/10.1038/s41597-020-0439-1>
11. Boiko D.A., Pentsak E.O., Cherepanova V.A., et al. Deep Neural Network Analysis of Nanoparticle Ordering to Identify Defects in Layered Carbon Materials // *Chemical Science*. 2021. Vol. 12. No 21. P. 7428–7441. <https://doi.org/10.1039/d0sc05696k>

### References

1. Beck A.G., Muhoberac M., Randolph C.E., et al. Recent Developments in Machine Learning for Mass Spectrometry. *ACS Measurement Science Au*. 2024. Vol. 4. No 3. P. 233–246. <https://doi.org/10.1021/acsmesuresciau.3c00060>
2. Isaeva E.R., Kokova E.A., Smushchenko N.A. Artificial Intelligence in Science: New Research Methods and Automation of the Scientific Process. *Development of Science in the 21st Century: Scientific, Methodological and Practical Aspects : Collection of Scientific Papers Based on the Materials of the XXI World Scientific and Practical Conference*. Анапа: Research Center for ESP in the Southern Federal District. 2025. P. 28–32. (In Russ.).
3. Plekhanov V. I. Artificial Intelligence as a Tool for Solving Problems in Materials Science. *Actual Issues of Science 2025 : A Collection of Articles from the XI International Scientific and Practical Conference*. Пенза: MCNS "Science and Education". 2025. P. 34–37. (In Russ.).
4. Kozlov K.S., Boiko D.A., Burykina J.V., et al. Discovering Organic Reactions with a Machine-Learning-Powered Deciphering of Tera-Scale Mass Spectrometry Data. *Nature Communications*. 2025. Vol. 16. No 1. P. 2587. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-56905-8>
5. Litsa E.E., Chenthamarakshan V., Das P., et al. An End-To-End Deep Learning Framework for Translating Mass Spectra to De-Novo Molecules. *Communications Chemistry*. 2023. Vol. 6. No 1. P. 132. <https://doi.org/10.1038/s42004-023-00932-3>
6. Peters-Clarke T.M., Coon J.J., Riley N.M. Instrumentation at the Leading Edge of Proteomics. *Analytical Chemistry*. 2024. Vol. 96. No 20. P. 7976–8010. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.3c04497>

7. Wang F., Pasin D., Skinnider M.A., et al. Deep Learning-Enabled MS/MS Spectrum Prediction Facilitates Automated Identification of Novel Psychoactive Substances. *Analytical Chemistry*. 2023. Vol. 95. No 50. P. 18326–18334. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.3c02413>
8. Zheng P., Zubatyuk R., Wu W., et al. Artificial Intelligence-Enhanced Quantum Chemical Method with Broad Applicability. *Nature Communications*. 2021. Vol. 12. No 1. P. 7022. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-27340-2>
9. Ramabhadran R.O., Raghavachari K. Extrapolation to the Gold-Standard in Quantum Chemistry: Computationally Efficient and Accurate CCSD(T) Energies for Large Molecules Using an Automated Thermochemical Hierarchy. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2013. Vol. 9. No 9. P. 3986–3994. <https://doi.org/10.1021/ct400465q>
10. Boiko D.A., Pentsak E.O., Cherepanova V.A., et al. Electron Microscopy Dataset for the Recognition of Nanoscale Ordering Effects and Location of Nanoparticles. *Scientific Data*. 2020. Vol. 7. No 1. P. 101. <https://doi.org/10.1038/s41597-020-0439-1>
11. Boiko D.A., Pentsak E.O., Cherepanova V.A., et al. Deep Neural Network Analysis of Nanoparticle Ordering to Identify Defects in Layered Carbon Materials. *Chemical Science*. 2021. Vol. 12. No 21. P. 7428–7441. <https://doi.org/10.1039/d0sc05696k>

#### **Информация об авторах**

**М.А. Зарудских**, аспирант Института химии и химико-фармацевтических технологий, Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия;

**С.А. Безносюк**, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физической и неорганической химии, Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия.

#### **Information about the authors**

**M.A. Zarudskikh**, Postgraduate Student of the Institute of Chemistry and Chemical and Pharmaceutical Technology, Altai State University, Barnaul, Russia;

**S.A. Beznosyuk**, Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, Professor, Head of the Department of Physical and Inorganic Chemistry, Altai State University, Barnaul, Russia.