



База данных спектров ЭПР для нейросети и машинного обучения

Садовникова Маргарита Александровна



Решаемая проблема

1. Данный проект решает исследовательскую и образовательную проблему. База данных необходима для лабораторий, непосредственно занимающиеся ЭПР спектроскопией: для прогнозирования будущего эксперимента, а также для интерпретации полученных новых результатов.
2. Научные лаборатории, занимающиеся синтезом новых материалов.
3. Студенты, обучающимся по специальности Медицинская физика, Физика, Радиофизика, Химия. Создание онлайн базы данных облегчит работу будущим исследователям в области ЭПР.



Инновационность проекта

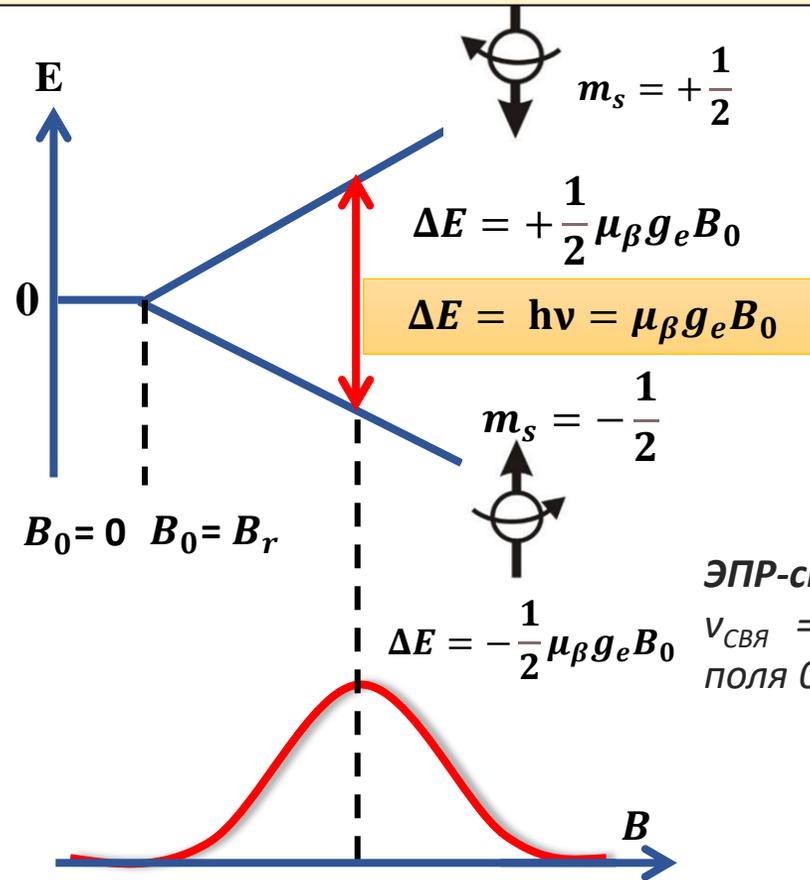
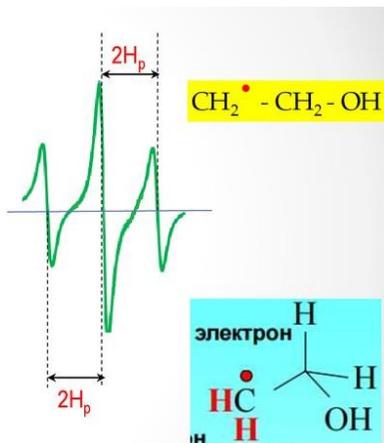


- Впервые будет собрана полная база данных существующих, известных в литературе спектров ЭПР;
- Разрабатываемая база данных не имеет аналогов в России;
- Планируется ускоренная работа с большим объёмом данных;
- В перспективе будет создана самообучаемая нейросеть, которая будет способна проанализировать и выдать наиболее вероятную интерпретацию полученных экспериментально спектров ЭПР.



Электронный парамагнитный резонанс

Явление резонансного поглощения энергии электромагнитного поля веществом, содержащим парамагнитные центры и находящимся во внешнем магнитном поле.



ЭПР-спектрометр **BRUKER** Elexsys E580,
 $\nu_{\text{СВЯ}} = 9.6$ ГГц. Развертка магнитного
поля 0 – 1.5 Тл

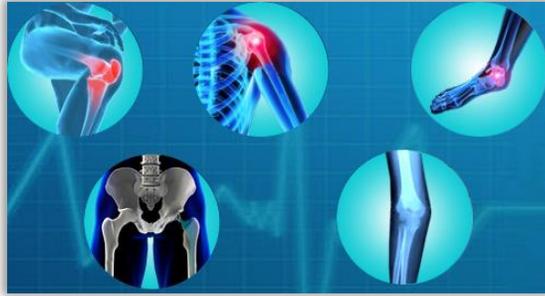
ФОНД СОДЕЙСТВИЯ
ИННОВАЦИЯМ



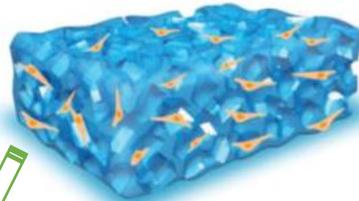
Электронный парамагнитный резонанс. Применение



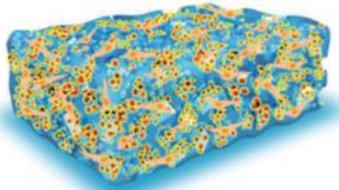
Медицина



Область применения имплантов



Восстановление костной ткани

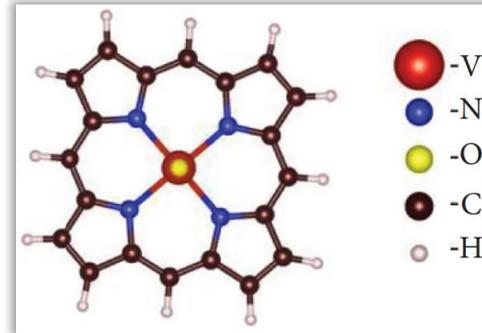


Остеостимулирование

ФОНД СОДЕЙСТВИЯ
ИННОВАЦИЯМ



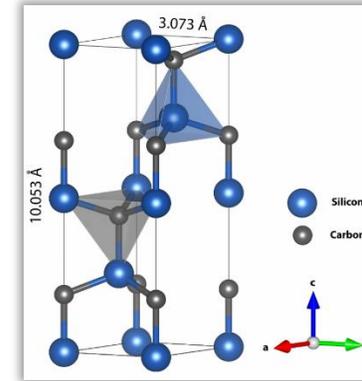
Геология



Структура VO^{2+} комплекса



Полупроводниковые материалы



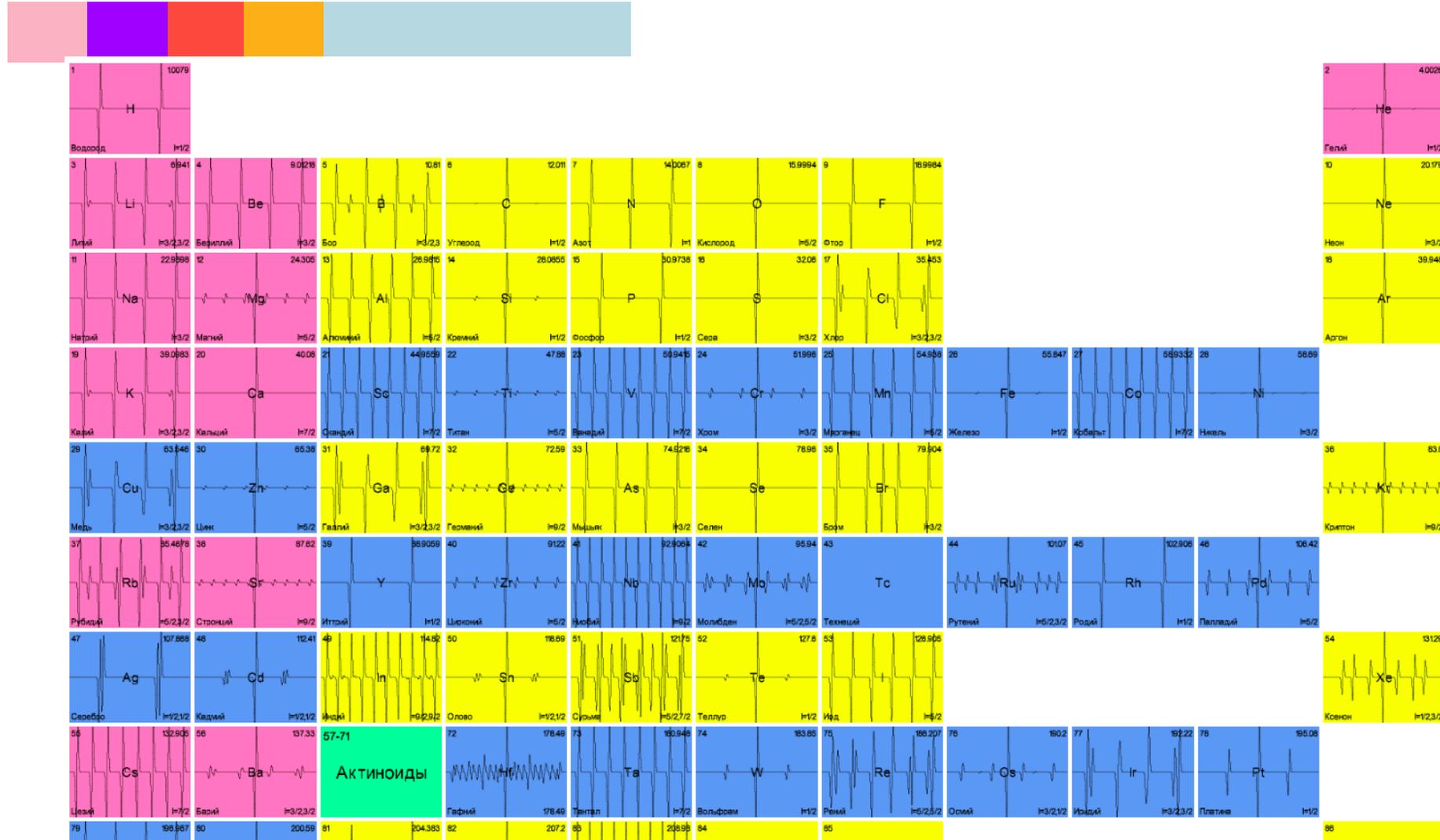
Структура кристалла SiC



Структура двумерного кристалла hBN

ПЛАТФОРМА
УНИВЕРСИТЕТСКОГО
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
ПРЕДПРИНИМАТЕЛЬСТВА

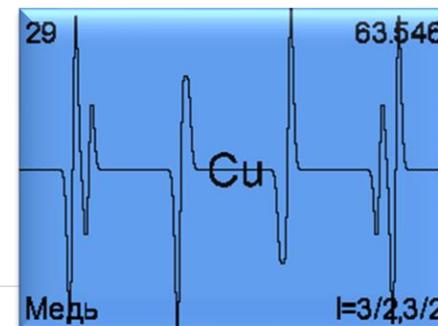
Задел. Титульная страница



Схематичное представление сайта



Задел. Снимок экрана



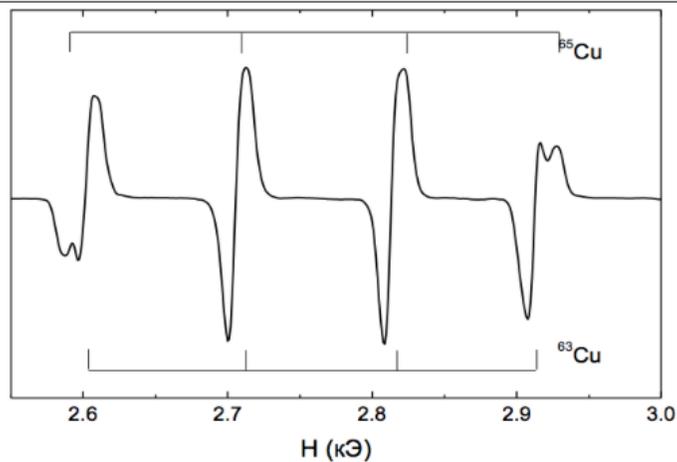
Имя Медь
Символ Cu
Номер 29

- Вес :63
- Вес :63.546
- Оболочка :3
- % :69.15
- i :3/2
- gmin :2.4
- endor :3.961568

- Вес :65
- % :30.85
- i :3/2
- endor :4.2359

- Вес :63
- Вес :63.546
- Ссылки :Д.Вертц,Д.Болтон "Теория и приложения метода ЭПР" перевод с английского канд.хим.наук М.Г.Гольдфельда под редакцией проф.Л.А.Блюменфельда ; Издательство "Мир",Москва,1975г.
- g изотропное :2.4
- a изотропное :143,4x10⁽⁻⁴⁾см⁽⁻¹⁾

- Вес :65
- Ссылки :Д.Вертц,Д.Болтон "Теория и приложения метода ЭПР" перевод с английского канд.хим.наук М.Г.Гольдфельда под редакцией проф.Л.А.Блюменфельда ; Издательство "Мир",Москва,1975г.
- g параллельное :2,0788
- g перпендикулярное :2,0772
- a параллельное :-0,00644 см⁽⁻¹⁾
- a перпендикулярное :-0,00644 см⁽⁻¹⁾



Спектр ЭПР иона Cu²⁺ в кристалле K₂SO₄

Аналоги и конкуренты

- Существующая база данных имеет сведения только об органических молекул;

Spectral Database for Organic Compounds SDBS [Japanese](#) [Introduction](#) [Disclaimer](#) [HELP](#) [Contact](#) [What's New](#) [RIO-DB](#) [FAQ](#) [LINK](#)

SDBS Compounds and Spectral Search

Compound Name: match partial

Molecular Formula:
C, H, then the other elements are alphabetical order, "%", "*" for the wild card

Molecular Weight: to
Numbers between left and right columns
Up to the first place of a decimal point

CAS Registry No.:
"%", "*" for the wild card.

SDBS No.:
"%", "*" for the wild card.

Atoms:

C(Carbon) to
H(Hydrogen) to
N(Nitrogen) to
O(Oxygen) to
F(Fluorine) to
Cl(Chlorine) to
Br(Bromine) to
I(Iodine) to
S(Sulfur) to
P(Phosphorus) to
Si(Silicon) to
Numbers between left and right columns.

Spectrum:
Check the spectra of your interest.
 MS IR
 ¹³C NMR Raman
 ¹H NMR ESR

IR Peaks(cm⁻¹): Allowance
" " or space is the separator for multiple peaks.
Use "-", to set a range: eg. 550-750,1650-3000-

Transmittance < %

¹³C NMR Shift(ppm): Allowance
" " is the separator for multiple shifts, eg. 129.3,18.4,...

No shift regions:
Range defined by two numbers separated by a space, eg. 110 78,...

¹H NMR Shift(ppm): Allowance

ПЛАТФОРМА
УНИВЕРСИТЕТСКОГО
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
ПРЕДПРИИМАТЕЛЬСТВА

Spectral Database for Organic Compounds SDBS [Japanese](#) [Introduction](#) [Disclaimer](#) [HELP](#) [Contact](#) [What's New](#) [RIO-DB](#) [FAQ](#) [LINK](#)

4526	Na6O24P6V3 12H2O	860.6	N	N	N	N	N	Y	trinuclear vanadyl pyrophosphate complex
11422	C30H32Cu2N8O12S2	887.9	N	N	N	N	N	Y	dimer complex of (N,N'-bis(picolinoyl)-1,3-propanediaminato)copper(II)
9254	C56H47CuN6O2	899.5	N	N	N	N	N	Y	(2,2,5,5-tetramethyl-3-((p-(10,15,20-tri(p-tolyl)porphyrin-5-yl)phenyl)carbomoyl)-3-pyrroline-1-yloxyato)copper(II) radical
9257	C56H46CuN5O3	900.5	N	N	N	N	N	Y	(2,2,5,5-tetramethyl-3-(O-(10,15,20-tri(p-tolyl)porphyrin-5-yl)phenoxy carbonyl)-3-pyrroline-1-yloxyato)copper(II) radical
9255	C56H49CuN6O2	901.6	N	N	N	N	N	Y	(2,2,5,5-tetramethyl-3-(O-(10,15,20-tri(p-tolyl)porphyrin-5-yl)benzoylamino)-1-pyrroline-1-yloxyato)copper(II) radical
4512	C4H16Ag2Co4N4	902.5	N	N	N	N	N	Y	bis(ethylenediamine)cobalt(II) diiodoargentate(I)
9258	C56H48CuN7O2	914.6	N	N	N	N	N	Y	(2,2,5,5-tetramethyl-3-(O-(10,15,20-tri(p-tolyl)porphyrin-5-yl)phenyl)ureido)-3-pyrroline-1-yloxyato)copper(II) radical
9256	C57H51CuN6O2	915.6	N	N	N	N	N	Y	(2,2,6,6-tetramethyl-4-(O-(10,15,20-tri(p-tolyl)porphyrin-5-yl)benzoylamino)piperidinoxyato)copper(II) radical
9235	C48H71N4O5PRh	918.0	N	N	N	N	N	Y	(2,3,7,8,12,13,17,18-octaethylporphyrinato)peroxo(tributylphosphite)rhodium(III)
8945	Cl14Nb6	1053.8	N	N	N	N	N	Y	niobium chloride cluster
4541	C52H48Cl4CoP4Sn	1116.2	N	N	N	N	N	Y	bis(1,2-bis(diphenylphosphino)ethane)chlorocobalt(II) trichlorostannate
4542	C58H53Cl5CoP4Sn	1228.8	N	N	N	N	N	Y	bis(1,2-bis(diphenylphosphino)ethane)chlorocobalt(II) trichlorostannate-chlorobenzene
9902	C76H64BrCoP4	1250.8	N	N	N	N	N	Y	bromobis(cis-1,2-bis(diphenylphosphino)ethylene)cobalt(II) tetraphenylborate

ФОНД СОДЕЙСТВИЯ
ИННОВАЦИЯМ

Технико-экономическая оценка возможности реализации проекта

Затраты	Сумма, рубли	Прибыль
Зарплаты сотрудников (3 человека)	400 000	Платная подписка для доступа. Тарифы: 299 рублей в месяц 2 999 рублей – годовая подписка
Персональные компьютеры	400 000	
Облачное хранилище	50 000	
Доступ к платным научным статьям для сбора базы данных	50 000	
Иное (Реклама, дизайн сайта, юридическая помощь)	100 000	



ФОНД СОДЕЙСТВИЯ
ИННОВАЦИЯМ





Спасибо
за внимание!

ПЛАТФОРМА
УНИВЕРСИТЕТСКОГО
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
ПРЕДПРИНИМАТЕЛЬСТВА