



СЕРИЯ  
«ИСТОЧНИКИ НОВЫХ  
ИНДУСТРИЙ»

ВЫПУСК 1

# Передовая ХИМИЯ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГ

2022

## **ИСТОЧНИКИ НОВЫХ ИНДУСТРИЙ. ВЫПУСК 1. ПЕРЕДОВАЯ ХИМИЯ**

Экспертно-аналитический доклад

**Авторская группа:** В. Н. Княгинин, М. С. Липецкая, Д. В. Санатов, Л. В. Складар, А. В. Олейник, М. О. Маков, М. С. Мулюкин, С. В. Салкуцан, Е. М. Холоднова

**Научный редактор:** Е. В. Скорб

**Консультации в формате интервью:** М. Е. Трусова, П. С. Постников, К. Г. Николаев, А. В. Виноградов

**Участие в форсайте, консультации в формате интервью:** Д. С. Болотин, Е. А. Мостович, А. С. Дроздов

**Обработка результатов форсайта, аналитика:** А. А. Давыдова, Е. А. Мазилев

Настоящий доклад подготовлен совместно Центром стратегических разработок «Северо-Запад» и Фондом поддержки инноваций и молодежных инициатив Санкт-Петербурга при поддержке Правительства Санкт-Петербурга.

Основой послужил проект «Форсайт „Фронтиры в новых науках“». Целью проекта стало определение долгосрочных трендов и перспектив развития новых индустриальных и технологических рынков; выявление наиболее перспективных направлений проведения исследований и разработок в так называемых фронтальных областях НИОКР — передовой химии, синтетической биологии, искусственном интеллекте и экологически чистых промышленных технологиях.

Методологическая база проекта основана на анализе результатов форсайт-сессии с участием ведущих и молодых ученых, обработке научных данных, серии интервью с исследователями, оценке стратегий крупных промышленных концернов, анализе рынков венчурных инвестиций.

Доклад состоит из восьми разделов, в которых рассматриваются:

- переход от линейной классической модели НИОКР к модели автономных химических исследований с обратным дизайном;
- трансформация лаборатории в формат AI-Driven Lab и появление нового типа исследователя — химика-администратора;
- фронтальные направления химии, которые открывают совершенно новые технологические рынки будущего.

В докладе описаны основные факторы развития передовых химических технологий:

- смена технологического инструментария обеспечивает более быстрые, дешевые, безопасные и эффективные инновации в химической науке;
- лаборатории, где искусственный интеллект постепенно становится субъектом исследовательского процесса, обладают наибольшим потенциалом;
- объединение кросс-индустриальных игроков в платформы химического рынка для ответа на вызовы современной науки.

Результаты проекта легли в основу экспериментального конкурса BlueSky Research «Искусственный интеллект в науке», проводимого в 2022 году совместно Фондом «Центр стратегических разработок „Северо-Запад“» и Фондом поддержки инноваций и молодежных инициатив Санкт-Петербурга.

Серия «Источники новых индустрий»

Дизайн доклада: М. И. Петрова по заказу Фонда поддержки инноваций и молодежных инициатив Санкт-Петербурга

## SOURCES OF NEW INDUSTRIES. ISSUE 1. ADVANCED CHEMISTRY

Expert report

**Authors:** V. N. Knyaginina, M. S. Lipetskaya, D. V. Sanatov, L. V. Sklyar, A. V. Oleinik, M. O. Makov, M. S. Mulyukin, S. V. Salkutsan, E. M. Kholodnova

**Scientific editor:** E. V. Skorb

**Interviewees:** M. E. Trusova, P. S. Postnikov, K. G. Nikolaev, A. V. Vinogradov

**Foresight participants, interviewees:** D. S. Bolotin, E. A. Mostovich, A. S. Drozdov

**Preparation of foresight results, analytics:** A. A. Davydova, E. A. Mazilov

This report was prepared jointly by the Center for Strategic Research "North-West" and the Innovations and Youth Initiatives Support Fund of St. Petersburg with the support of the Government of St. Petersburg.

The basis was the Foresight project "Frontiers in New Sciences". The aim of the project was to identify longterm trends and prospects for the development of new industrial and technological markets; to identify on this basis the most promising areas of research and development in the so-called "frontier" areas of R&D – advanced chemistry, synthetic biology, artificial intelligence and environmentally friendly industrial technologies.

The methodological basis of the project is based on the analysis of the results of a foresight session with the participation of leading and young scientists, the processing of scientific data, a series of interviews with leading researchers, the evaluation of strategies of large industrial concerns, the analysis of venture capital markets.

The report consists of eight sections, which consider:

- transition from a linear classical R&D model to a model of autonomous chemical research with reverse design;
- transformation of the laboratory into the AI-Driven Lab format and the emergence of a new type of researcher – chemist-administrator;
- frontier areas of chemistry that open up completely new technological markets of the future.

The report describes the main factors of the development of advanced chemical technologies:

- the change of technological tools provides faster, cheaper, safe and effective innovations in chemical science;
- laboratories where artificial intelligence is gradually becoming the subject of the research process have the greatest potential;
- integration of cross-industrial players into chemical market platforms to address the challenges of modern science.

The results of the project formed the basis of the experimental BlueSkyResearch competition "Artificial Intelligence in Science", held in 2022 jointly by the Foundation "Center for Strategic Research "Northwest" and the Innovations and Youth Initiatives Support Fund of St. Petersburg.

Series "Sources of new industries"

Designed by M. I. Petrova on demand of the Innovations and Youth Initiatives Support Fund of St. Petersburg

Авторы доклада выражают особую благодарность  
Министерству науки и высшего образования Российской  
Федерации за поддержку форсайт-проекта «Фронтиры  
в новых науках».



# Оглавление

6	Список рисунков, таблиц и кейсов
7	Введение
<b>9</b>	<b>Трансформация химических НИОКР</b>
<b>14</b>	<b>Цифровые инструменты химических НИОКР</b>
<b>18</b>	<b>Трансформация химических лабораторий</b>
<b>25</b>	<b>Трансформация исследовательских компетенций</b>
<b>36</b>	<b>Фронтальные темы передовой химии</b>
<b>40</b>	<b>Рынок передовой химии</b>
<b>45</b>	<b>Новые рынки на базе химических инноваций</b>
<b>47</b>	<b>Развитие сотрудничества и поддержки</b>
<b>53</b>	<b>Заключение</b>
54	Библиография
58	Приложение 1
65	Приложение 2

# Список рисунков, таблиц и кейсов

Рис. 1. Рост числа исследователей и снижение их продуктивности, 2019

Рис. 2. Этапы трансформации химических исследований

Рис. 3. Средняя стоимость затрат на НИОКР нового препарата 12 крупнейших фармкомпаний, 2010-2020

Рис. 4. Число поглощений крупнейших технологических компаний, ед.

Рис. 5. Элементы химической лаборатории будущего

Рис. 6. Карта 20 исследовательских организаций в области химии с наилучшими показателями наукометрии, 2021

Рис. 7. Карта потенциала образовательных организаций высшего образования и научных организаций по созданию прорывных лабораторий в передовой химии, 2021

Рис. 8. Трансформация исследовательских компетенций в химии

Рис. 9. Ведущие исследователи передовой химии в России, 2021

Рис. 10. Молодые исследователи — звёзды передовой химии в России, 2021

Рис. 11. Самые цитируемые исследователи передовой химии в мире, 2021

Рис. 12. Схема универсальной аппаратной платформы, применяемой в химии

Рис. 13. Платформы продаж химической продукции

Рис. 14. Темп роста инвестиций в химические компании, приведенный к 2016

Рис. 15. Инвестиции в стартапы, связанные с химией, млрд долл.

Рис. 16. Быстрорастущие рынки передовой химии

Табл. 1. Актуальные вакансии исследователей, 2021

Табл. 2. Перспективные темы развития химии до 2030 / 2050

Табл. 3. Программное обеспечение (SaaS) для химических НИОКР, 2022

Кейс 1. Примеры ведущих химических лабораторий за рубежом

Кейс 2. Примеры ведущих химических лабораторий в России

Кейс 3. Примеры сотрудничества университетов и глобальных компаний в области химических исследований

Кейс 4. Примеры консорциумов передовой химии

Кейс 5. Примеры стимулирования развития передовой химии

# Введение

Появление в прошлом десятилетии технологий Индустрии 4.0 навсегда изменило отраслевые рынки. Для обеспечения конкурентоспособности компании начали постепенную, а в некоторых случаях тотальную цифровизацию (в первую очередь — процессов, связанных с обеспечением продаж), а также внедрение технологий повышения эффективности производства.

На следующем этапе цифровизации, обеспечивающем экономический рост, трансформируется сектор исследований и разработок. Цифровые технологии кардинальным образом изменили подходы к проведению научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ (НИОКР). В последние 20 лет две Нобелевские премии были присуждены за исследования в области вычислительной химии, при этом потенциал данного раздела науки далеко не исчерпан<sup>1,2</sup>. В химической отрасли состоялся переход к новым принципам инжиниринга молекул и соединений, что позволило проводить исследования быстрее, точнее и эффективнее. Более того, произошел сдвиг в восприятии искусственного интеллекта, который проделал путь от частичного внедрения в исследовательскую работу в качестве инструмента с узким набором функций к полноценному субъекту научной деятельности. Изменение характера проведения НИОКР позволяет говорить о *новой химии* — научном знании, основанном на больших данных, формирующемся с использованием цифрового инструментария моделирования и экспериментирования.

Внедрение технологий искусственного интеллекта в процесс исследований готовит почву для Индустрии 5.0 — новой промышленной концепции, основанной на принципах работы киберфизических когнитивных систем, сплошной персонализации, распределенных цепочек создания стоимости и характеризующейся человекоцентричностью, гибкостью и устойчивостью<sup>3</sup>.

Благодаря развитию и распространению новой химии появляются не только отдельные прорывные технологии, обеспечивающие более высокое качество жизни населения, но и целые рынки зеленых технологий, электроэнергетики, медицины и питания, новых материалов. С учетом кросс-отраслевого характера химии (все высокотехнологические отрасли базируются на химических процессах и материалах) инвестиции в ключевые субъекты новой химии — исследовательские лаборатории — помогут совершить научно-технический и коммерческий прорыв сразу в нескольких направлениях.

Передовой опыт использования цифровых подходов в исследовательском инструментарии способен стать драйвером реализации высокого научного потенциала России в области химии. Технологии искусственного интеллекта и машинного обучения в комплексе с сильной научной базой — фактор качественного развития химической промышленности. Кроме того, химическая отрасль является одной из индустрий, перед которой была поставлена задача по импортозамещению в связи с введенными в 2014 году экономическими санкциями. Первый план мероприятий был утвержден в 2015-м и впоследствии несколько раз корректировался. В целом политика импортозамещения в химии, по оценкам экспертов, стала одной из самых успешных и может быть продолжена для решения новых амбициозных задач. Особенно острым остается вопрос обеспечения продукцией малотоннажной и среднетоннажной химии. С учетом тренда на цифровизацию и зеленые технологии именно передовая химия способна обеспечить разработку новых технологий в условиях развития импортозамещения.

Для определения перспектив развития новых областей науки, включающих направление «Новая химия», Правительство Санкт-Петербурга инициировало проект «Фронтиры в новых науках». Совместно с Фондом поддержки инноваций и молодежных инициатив Санкт-Петербурга и Фондом «Центр стратегических разработок „Северо-Запад“» при поддержке Минобрнауки России в ноябре 2021 года прошел форсайт «Фронтиры в новых науках». По каждой из рассмотренных тем были сформулированы идеи прорывных исследований, определены тенденции развития направления и необходимые компетенции для работы в будущем.

- 1 Noble Prize. URL: [nobelprize.org/prizes/chemistry/1998/summary/](https://nobelprize.org/prizes/chemistry/1998/summary/) (дата обращения: 14.02.2022).
- 2 Noble Prize. URL: [nobelprize.org/prizes/chemistry/2013/summary/](https://nobelprize.org/prizes/chemistry/2013/summary/) (дата обращения: 14.02.2022).
- 3 Industry 5.0, a transformative vision for Europe // European Commission. URL: [op.europa.eu/en/web/eu-law-and-publications/publication-detail/-/publication/38a2fa08-728e-11ec-9136-01aa75ed71a1](https://op.europa.eu/en/web/eu-law-and-publications/publication-detail/-/publication/38a2fa08-728e-11ec-9136-01aa75ed71a1) (дата обращения: 14.02.2022).

Итогом работы форсайт-сессии (с дополнительным форсайт-исследованием, включающим интервью с учеными) стал доклад «Передовая химия», посвященный долгосрочным аспектам развития исследований в области химии.

В первом разделе доклада описаны черты трансформации процесса проведения химических НИОКР в результате тотального внедрения цифровых технологий.

Во второй главе представлены ключевые цифровые инструменты проведения исследований.

Третья рассказывает о трансформации лабораторий, являющихся источником химических инноваций, а также определяет модель инфраструктуры будущего AI-driven Lab.

Четвертая глава посвящена текущим и будущим изменениям компетентного профиля исследователя. Устранение дефицитов между качественным предложением и спросом на компетенции новой химии может обеспечить вклад в развитие химической промышленности.

Пятый раздел знакомит с актуальными темами химических исследований, в которых ожидается наибольший научный прорыв.

В шестом дается обзор рынка химических НИОКР, определяются ключевые тенденции его развития.

В седьмой главе рассмотрены новые технологические рынки, которые становятся доступными благодаря инновациям в отрасли.

В восьмой намечены перспективы сотрудничества и государственной поддержки в области новой химии.

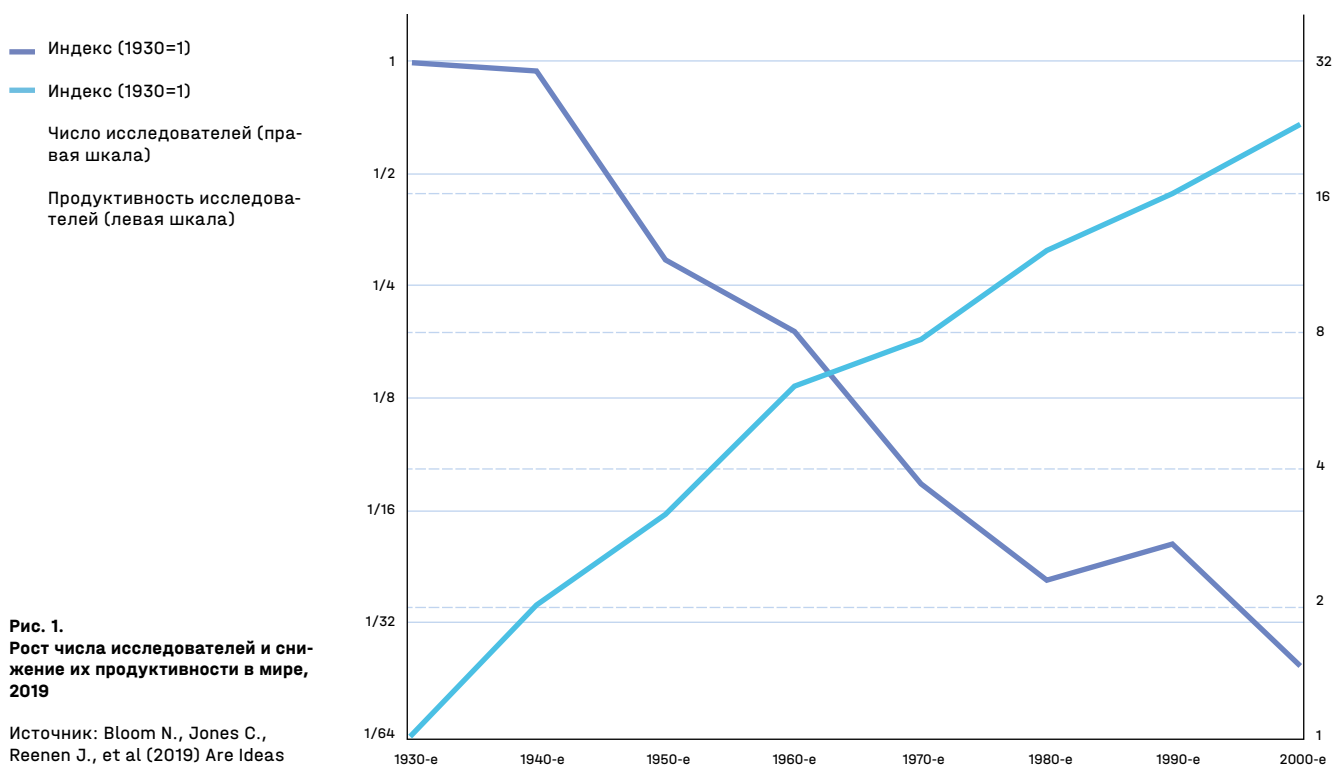
Доклад призван помочь химическим компаниям в определении фокуса технологического развития и траектории инновационного роста. Действующим лабораториям образовательных, научных и производственных организаций будут интересны перспективные требования к инфраструктуре и исследовательским компетенциям. Органы власти и управления могут использовать материалы доклада при выборе перспективных направлений поддержки тем исследований и инфраструктуры НИОКР.

# 1 ТРАНСФОРМАЦИЯ ХИМИЧЕСКИХ НИОКР

Исследования в области химии радикально трансформируются. Реальное проведение экспериментов замещается автономными роботизированными процессами и виртуальным моделированием. Построение гипотез в поисках решений обретает новый характер благодаря искусственному интеллекту (далее — ИИ), который способен осуществлять дизайн молекул и подбирать методы синтеза самостоятельно, черпая информацию из баз данных.

В настоящее время меняется не только модель развития научных знаний в целом, но и система методов исследования и характера организации исследовательской деятельности. На трансформацию могут влиять следующие факторы.

1 **Возрастание сложности научного знания**, вызванное увеличением объемов и скорости появления научных данных, а также тонкостью топологии исследований. Это приводит к уменьшению числа значительных открытий и радикальных инноваций (рис. 1). Вызов усложнившегося процесса научных открытий может быть преодолен распространением передовых цифровых инструментов благодаря цифровизации науки, росту вычислительных мощностей, снижению стоимости высокопроизводительных вычислений, разработанности алгоритмов и методов решения задач ИИ и машинным обучением.



Технологические мощности ускорили переход к полипарадигмальности. Радикально изменились те области научного знания, которые смогли использовать ИИ для собственной реорганизации. Прежде всего, это химия, биология, социология, медицинские науки, климатология, некоторые инженерные науки.

2

**Новый этап НТР.** Научная революция 1970-1980-х годов была вызвана активным внедрением компьютерных технологий, геной инженерии, моделируемых материалов, освоением новых способов преобразования энергии, что привело к появлению передовых производственных технологий. Современная парадигма экономики (2010-2020) — Индустрия 4.0 — во многом продолжает формироваться под влиянием области *deep tech*. Последовательное движение в этом направлении может привести на рубеже 2020-2030-х годов к следующей технологической революции, которая откроет способы решения глобальных задач, используя природоподобные технологии, супер- и метаматериалы ИИ в контексте постуглеродной экономики и тотальной роботизации.

3

**Новые глобальные вызовы.** Трансформация исследований в области химии происходит в контексте приближения «злых»<sup>4</sup> и «сверхзлых» проблем<sup>5</sup>, к которым относятся такие глобальные вызовы, как пандемии новых инфекций, растущая резистентность бактерий к распространенным антибиотикам, негативные последствия изменений климата, истощение доступных ресурсов.

4 Churchman C. West Wicked Problems // *Management Science*. — 1967. — № 14 (4). — С. 141-142.

5 Levin K., Cashore B., Bernstein S. et al. Overcoming the tragedy of super wicked problems: constraining our future selves to ameliorate global climate change // *Policy Sci*. — 2012. — № 45. — С. 123-152.

4

**Сжатие «цикла знаний».** Современная научная революция сопровождается сокращением времени продвижения от научной гипотезы до полезного продукта с традиционных 15-20+ лет до 5-8, а в некоторых случаях до 3-6 лет.

5

**Переход к исследовательским экосистемам.** Скорость продвижения в НИОКР во многом зависит от экосистемы, в которой работает лидерская команда, пакета доступных для нее сервисов и инструментов, близости профессиональных сообществ, смежников, поставщиков. Развитие НИОКР определяется сетевыми эффектами (закон Меткалфа (Metcalfe's law): мощность сети определяется количеством подключенных узлов) и эффектом Матфея ((Matthew effect): ядро растет быстрее периферии). Ядро всегда способно извлечь больше из кооперации и добиться распределения ресурсов в свою пользу. Только оно может справиться с растущей сложностью НИОКР.

Перечисленные факторы повлияли на трансформацию исследовательской деятельности в химии. Середина прошлого века стала одним из наиболее плодотворных периодов для химических инноваций, но затем темп создания новых молекул и материалов замедлился. За исключением инновационных химикатов для защиты растений, в последнее десятилетие химическая промышленность не разработала никаких продуктов-дизрапторов<sup>6</sup>. Однако внедрение цифровых технологий кардинальным образом меняет архитектуру проведения исследований и повышает их эффективность, что в будущем может привести к новым прорывным открытиям.

Ранее процесс НИОКР представлял собой последовательную цепь действий — от установления цели до получения результата (не всегда положительного). Для проверки гипотез велись реальные эксперименты с реагентами, и путем «проб и ошибок» исследователь мог прийти к выводу о несостоятельности гипотезы, корректировать ее и заново проводить эксперименты (рис. 2). В условиях внедрения цифровых инструментов проведения исследований сокращается промежуточный этап проверки гипотез благодаря моделированию или частичной автоматизации процесса, а также уже накопленным базам химическим данных. Процесс отличается от исследований предыдущего этапа

6 Innovation in chemicals // Deloitte. URL: [www2.deloitte.com/us/en/insights/industry/oil-and-gas/chemical-innovation.html](http://www2.deloitte.com/us/en/insights/industry/oil-and-gas/chemical-innovation.html) (дата обращения: 11.02.2022).



цифровой средой проведения НИОКР и доступом к практически неограниченному объему известных данных. На следующем шаге трансформации химических исследований станет доступна парадигма обратного дизайна, когда искусственный интеллект может не только обработать запрос исследователя о необходимых характеристиках молекулы, материала или вещества, но и сформировать их дизайн и способ синтеза на основе больших данных. Происходит переход к **модели автономных химических исследований с обратным дизайном**.

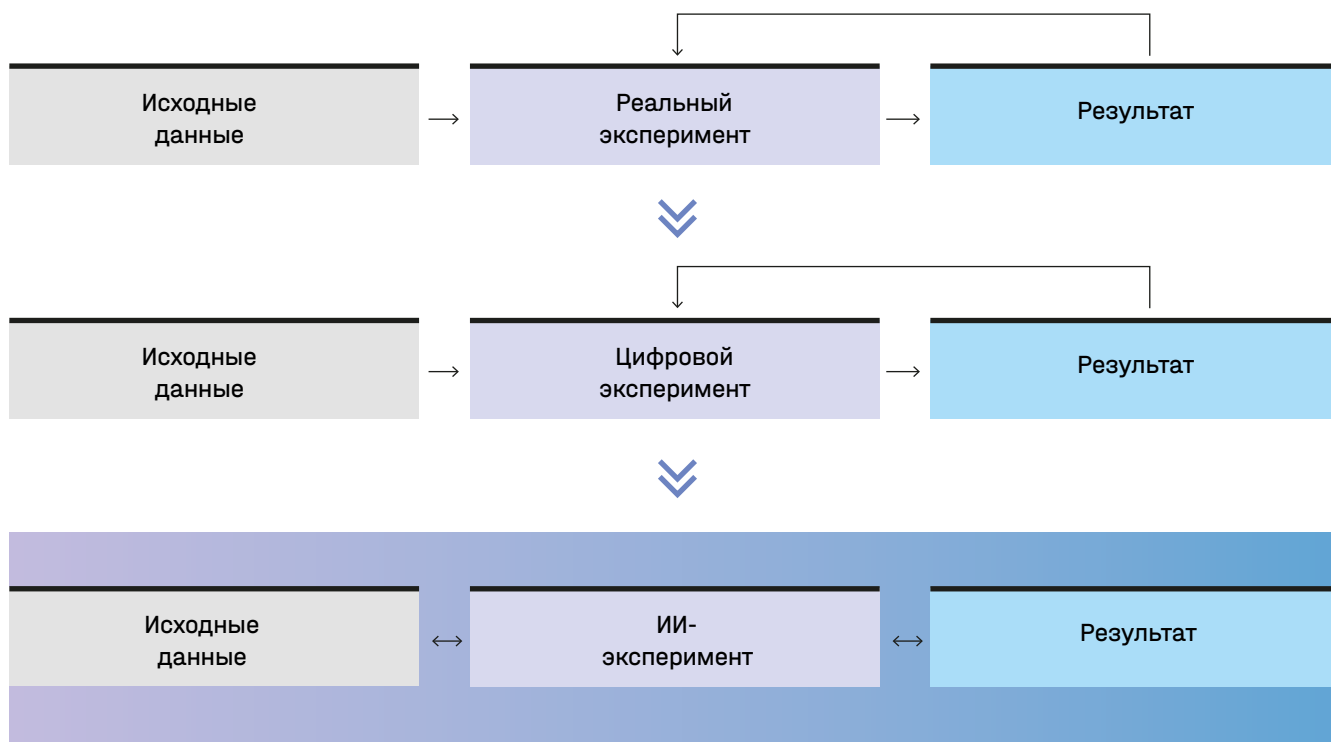


Рис. 2.  
Трансформация принципов проведения химических исследований

Источник: ЦСР «Северо-Запад»

Переход к модели автономных химических исследований подразумевает **трансформацию роли искусственного интеллекта** — от инструмента исследований (как алгоритма машинного обучения для анализа больших данных) к субъекту проведения исследований.

Благодаря вычислительным возможностям ИИ способен подбирать самые энерго- и ресурсоэффективные реакции, например каскадные, которые устроены по принципу домино: вместо поэтапного проведения серии реакций можно получить необходимый результат, единожды внося реагенты и запустив реакцию, первые производные которой будут становиться базой на следующем этапе, и так далее по цепочке<sup>7</sup>.

С применением цифрового инструментария акцент в химической индустрии сместился с исследований на молекулярном уровне на материалы, функции и комплексные системы. Высокопроизводительные вычисления, искусственный интеллект и другие возможности позволяют работать с **более сложными задачами и системами** (в т. ч. обновляемыми, в которых нужно иметь дело с большим объемом данных, их разнообразием, скоростью связей между множеством переменных). Новые инструменты позволяют изучать структуру в наномасштабе, определять организацию генома или структуру молекулы, запускать сложные каскады реакций, что должно обеспечить достижение прорывных результатов в совершенно новых и более того — неожиданных областях.

7 Nowak G., Fic G. Machine Learning Approach to Discovering Cascade Reaction Patterns. Application to Reaction Pathways Prediction // Journal of Chemical Information and Modeling. — 2009. — № 49 (6). — С. 1321-1329.

Если ранее стадии НИОКР могли быть оторваны друг от друга во времени и пространстве, то цифровая среда делает прохождение этапов исследований практически бесшовным, **повышая их связанность** и ускоряя тем самым их проведение.

Переход к использованию цифровых технологий в процессе исследований и разработок в мировом химическом секторе во многом **поддерживается глобальными трендами**.

## 1 Устойчивое развитие



Устойчивость, как и цифровизация, — мегатренд современного развития. В начале 1990-х годов, еще до формирования целей устойчивого развития ООН, была сформулирована концепция предупреждения образования опасных отходов на этапе разработки технологии вместо решения будущих проблем их утилизации. В 1998 году были разработаны 12 принципов зеленой химии, на которых позднее стали базироваться представления о сущности устойчивой химии.

За принятием Европейским союзом «Зеленой сделки» последовало утверждение Стратегии устойчивого развития ЕС в отношении химических веществ. Стратегия полностью признает ключевую роль химических веществ для перехода европейской экономики и общества к зеленым и цифровым технологиям.

Продукты химического сектора оказывают пагубное влияние на окружающую среду, особенно продукция нефтехимической отрасли, удобрения и пестициды. Применение цифровых технологий позволит перейти к зеленой химии, сокращающей или исключаящей использование и образование опасных веществ (это положение заложено в основу концепции Индустрии 5.0<sup>8</sup>).

<sup>8</sup> Industry 5.0 // European Commission. URL: [ec.europa.eu/info/research-and-innovation/research-area/industrial-research-and-innovation/industry-50\\_en](https://ec.europa.eu/info/research-and-innovation/research-area/industrial-research-and-innovation/industry-50_en) (дата обращения: 11.02.2022).

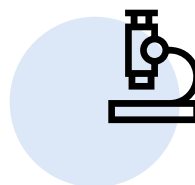
## 2 Запрет проведения испытаний на животных



В 41 стране мира приняты законы, ограничивающие или полностью запрещающие тестирование продукции на животных<sup>9</sup>. Компьютерное моделирование способно заменить подобные опыты более гуманным подходом.

<sup>9</sup> These Countries Have Banned Animal Testing (2021) // Cruelty Free Soul. URL: [crueltyfreesoul.com/animal-testing-banned-countries/](https://crueltyfreesoul.com/animal-testing-banned-countries/) (дата обращения: 11.02.2022).

### 3 Увеличение стоимости проведения исследований



В фармацевтическом секторе повышение требований к условиям проведения исследований ведет к увеличению стоимости НИОКР. Так, средняя стоимость разработки нового лекарства может достигать 2,51 млрд долларов (рис. 3).

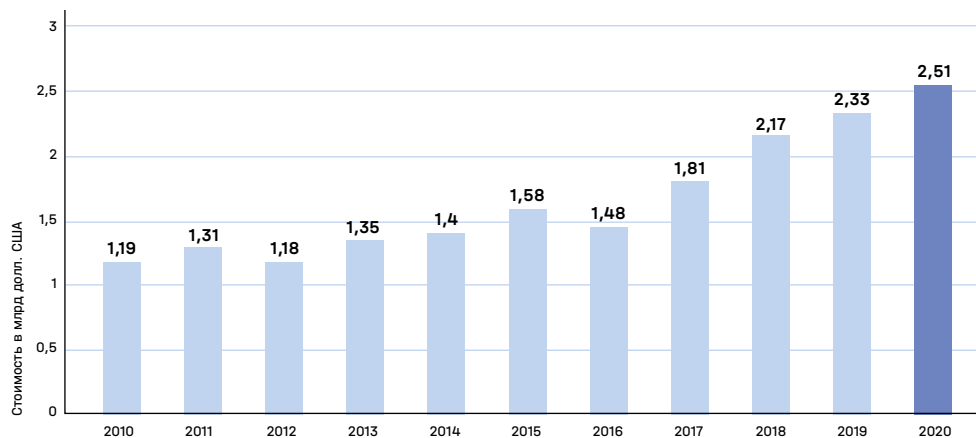
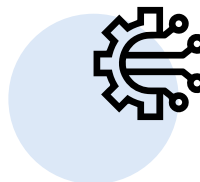


Рис. 3. Средняя стоимость затрат на НИОКР нового препарата 12 крупнейших фармкомпаний мира, 2010-2020

Источник: Statista

### 4 Нарастание конкуренции со стороны технологических компаний



Другим драйвером перехода к цифровым химическим НИОКР становится диверсификация бизнеса технологических компаний, которые начинают работать не только в смежных секторах, но и в совершенно новых для себя направлениях (рис. 4).

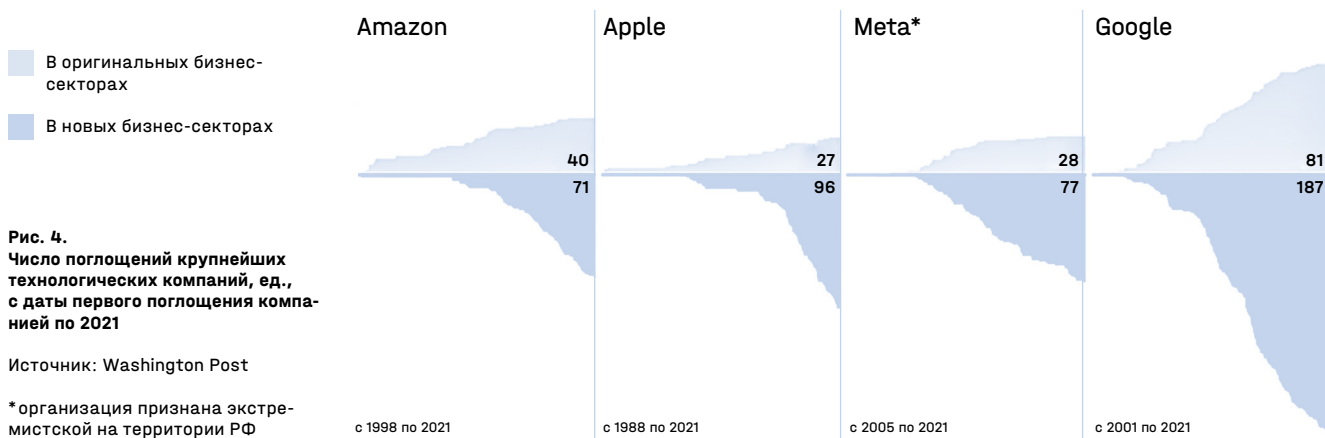


Рис. 4. Число поглощений крупнейших технологических компаний, ед., с даты первого поглощения компанией по 2021

Источник: Washington Post

\* организация признана экстремистской на территории РФ

Указанные тренды только ускоряют переход игроков химического рынка к проведению исследований и разработок в виртуальном формате и интенсифицируют применение цифровых инструментов и искусственного интеллекта.

# 2 ЦИФРОВЫЕ ИНСТРУМЕНТЫ ХИМИЧЕСКИХ НИОКР

Цифровые технологии повышают эффективность проведения химических НИОКР и уже внедряются в российских лабораториях. Интеграция элементов автоматизации, компьютерного моделирования и других аппаратных решений в единую систему благодаря искусственному интеллекту ведет к формированию киберфизических когнитивных систем.

Уровень использования цифрового инструментария при проведении химических НИОКР отличает Индустрию 3.0 от 4.0 и уже зарождающейся 5.0. Если в реалиях Индустрии 3.0 химическая НИОКР характеризовалась работой человека с использованием «аналогового» инструмента, то исследования 4.0 обеспечиваются киберфизическими системами — с использованием цифровых инструментов. По мере развития цифровых технологий, глубины проникновения искусственного интеллекта в исследовательские задачи происходит переход к киберфизическим когнитивным системам — Индустрии 5.0.

Использование цифровых технологий в химических исследованиях и разработках обеспечивает:

- более быстрые, дешевые, безопасные и эффективные инновации;
- более эффективную диагностику, профилактику и лечение заболеваний;
- новые устойчивые технологии — от более совершенных батарей и солнечных элементов до пластмасс следующего поколения и ресурсосберегающих промышленных процессов;
- более точное принятие управленческих решений и регулирование в области охраны окружающей среды на основе высококачественных данных и анализа большого объема источников;
- прорывы и новые знания в области физических, естественных и цифровых наук.

## Автоматизация

Улучшение приборной базы, роботизация и технологизация исследовательского процесса позволяют:

- снизить временные и трудовые затраты на проведение исследований, прежде всего рутинных операций;
- повысить производительность исследователей;
- повысить точность исследований посредством исключения влияния «человеческого фактора»;
- упростить воспроизводимость химических экспериментов;
- повысить безопасность технологических процессов, в т. ч. за счет автономизации операций.

Автоматизированные системы предназначены для выполнения простых этапов синтеза. Переход на следующий этап развития автоматизации химических исследований в области синтеза должен решить задачу обеспечения связанной автоматизации между разными этапами синтеза, автоматизацией более сложных этапов и синтеза сложных молекул.

Дмитрий Болотин, д.х.н., доцент кафедры физической органической химии Института химии СПбГУ:

*«Оборудование современных лабораторий позволяет осуществлять реакции в сотни раз быстрее. Если раньше десять человек одновременно работали над получением сорока соединений, то теперь это может сделать один человек: загрузить вещества в специальный аппарат и получить до сотни соединений»<sup>10</sup>*

<sup>10</sup> Из интервью с Д. С. Болотиным (01.12.2021).

## Компьютерное моделирование и эксперименты

Прецизионное моделирование операций осуществляется благодаря высокопроизводительным математическим вычислениям, что позволяет:

- прогнозировать параметры (т. е. структуру и свойства) синтезируемых материалов;
- проводить крупномасштабные испытания в безопасных условиях;
- сокращать сроки исследований, обходясь без длительных лабораторных испытаний.

Екатерина Скорб, к.х.н., директор и ведущий профессор Научно-образовательного центра инфохимии Университета ИТМО:

*«Сегодня никто не вкладывается, чтобы синтезировать миллионы структур. Изначально вы моделируете свойства этих структур и только потом начинаете синтезировать, что удешевляет и технологию, и все остальное. Для кристаллических веществ пользуется большой популярностью программа Артёма Оганова «Успех» (Uspex) — она хорошо предсказывает многие свойства. Новая программа AlphaFold позволяет избежать того, что приходится растить большие белки. Сейчас мы ее тестируем»<sup>11</sup>*

<sup>11</sup> Из интервью с Е. В. Скорб (17.10.2021).

## Передовые методы измерения

Современные методы измерения (различные виды спектроскопии, спектрометрии и микроскопии, распределенные сети сенсоров и т. д.) позволяют получить новые знания о структуре, свойствах и взаимодействии систем на атомарном и молекулярном уровнях, исследовать материалы и поверхности, организмы и экосистемы. Среди таких методов:

- умная микроскопия на базе интеграции световой и электронной микроскопии с автоматизацией и машинным обучением;
- комбинация нескольких методов исследований (например, изучение структуры и функций белка посредством рентгеновской дифракции, криогенной электронной микроскопии и масс-спектрометрии);
- распределенная сеть датчиков;
- измерение параметров в режиме реального времени.

Андрей Дроздов, к.х.н., старший научный сотрудник Лаборатории нанобиотехнологий МФТИ:

*«Еще 10 лет назад нам не были доступны многие методы исследований. В Сколково есть электронный просвечивающий микроскоп с возможностью томографии и элементного анализа. Он может показать расположение атомов в пространстве. Этот прибор — единственный в России, да и во всем мире таких не очень много»<sup>12</sup>*

<sup>12</sup> Из интервью с А. С. Дроздовым (30.10.2021).

## Имиджинг и визуализация

Задействовав возможности автоматизации, статистики и машинного обучения, можно улучшить работу с инструментами имиджинга и визуализации, среди которых:

- анализ изображений (извлечение данных из изображений с высокой точностью, их обработка и идентификация);
- медицинская диагностика (интерпретация данных изображения для принятия врачебных решений);
- представление данных исследования в доступной форме.

## Искусственный интеллект и машинное обучение

Исследователи применяют искусственный интеллект и машинное обучение совместно с прочими цифровыми технологиями. В качестве сквозной технологии ИИ открывает перед исследователями совершенно новые перспективы, делая возможными:

- поиск оптимального решения с минимальным участием человека (искусственный интеллект анализирует большой объем данных, выявляет перспективные свойства и закономерности, исключает менее перспективные направления);
- улучшение имиджинга и диагностики;
- фильтрация большого объема данных;
- майнинг химических данных (автоматический анализ научной литературы для выявления физико-химических закономерностей);
- автоматизация рутинной лабораторной работы (использование методов машинного обучения для ускорения рабочего процесса, оптимизации химического синтеза);
- оптимизация измерительных систем, предиктивная и прескриптивная аналитика, многопараметрический анализ сигналов;
- более точный прогноз свойств, особенно при совместном использовании технологий квантовой химии и искусственного интеллекта.

От внедрения технологий искусственного интеллекта ожидается наибольший эффект при проведении НИОКР и совершении открытий. Благодаря, например, алгоритму ИИ, разработанному в Ливерпульском университете, уже открыто четыре новых материала, в т. ч. семейство твердотельных материалов, проводящих литий. Твердые электролиты стимулируют разработку твердотельных аккумуляторов, повышающих срок службы и безопасность электромобилей<sup>13,14</sup>.

<sup>13</sup> Vasylenko A., Gamon J., Duff B. B. Element selection for crystalline inorganic solid discovery guided by unsupervised machine learning of experimentally explored chemistry // Nature Communications. — 2021. — № 12.

<sup>14</sup> New AI tool developed by University of Liverpool researchers accelerates discovery of truly new materials // Eurek Alert. URL: [eurekalert.org/news-releases/929009](http://eurekalert.org/news-releases/929009) (дата обращения: 11.02.2022).

Евгений Мостович, к.х.н., заведующий лабораторией низкоуглеродных химических технологий ФЕН НГУ:

*«Есть, например, большая проблема — Total synthesis, когда вы синтезируете природные соединения не в природе, а в лаборатории. Это сродни искусству, когда вы подбираете оптимальную синтетическую последовательность — от самых начальных соединений к большой структуре. Скорее всего, в химии сделает большой прорыв искусственный интеллект, если сможет самостоятельно синтезировать природные соединения и составить оптимальные схемы синтеза»<sup>15</sup>*

<sup>15</sup> Из интервью с Е. А. Мостовичем (03.12.2021).



## Аппаратные решения

Развитие компьютерного оборудования не только ускоряет процесс исследований, но и позволяет решать более сложные задачи. Большие ожидания связаны с развитием вычислительных мощностей компьютеров. Прежде всего это:

- периферийные вычисления распределенных инфраструктур;
- потоковые вычисления для непрерывной обработки больших наборов данных и аналитики в режиме реального времени (в микроскопии потоковые вычисления могут использоваться для преодоления проблем передачи, хранения и обработки больших объемов данных);
- квантовые вычисления;
- специализированные процессоры (оптимизированные для конкретных задач).

Дмитрий Болотин, д.х.н., доцент кафедры физической органической химии Института химии СПбГУ:

*«Если у нас компьютер будет в один миллиард раз быстрее, то мы в тысячу раз больше атомов за то же время можем посчитать. Чем производительнее компьютеры, тем ббльшие системы за то же время удастся посчитать или тем более точные расчеты мы сможем провести при том же количестве атомов»*

16 Из интервью с Д. С. Болотиным (01.12.2021).

Перспективы применения цифровых технологий в химических НИОКР зависят от того, насколько успешно будут преодолены существующие барьеры, среди которых необходимо упомянуть:

- ограничения вычислительных мощностей (преодоление этого вызова эксперты связывают прежде всего с развитием квантовых технологий);
- точность цифровых экспериментов, т. е. соответствие результатов в симуляциях результатам реальных опытов;
- низкое качество дата-сетов, поскольку в настоящее время происходит разрыв между держателями данных (организациями реального сектора и исследователями), а также отсутствует стандартизация данных (усложняется доступ и уменьшается прозрачность);
- потребность в дополнительных цифровых компетенциях исследователей-химиков, необходимость привлечения экспертов по цифровым направлениям (специалистов машинного обучения, разработчиков ИИ и т. д.).

Решение этих задач позволит перевести цифровой химический инструментарий из категории «не для всех» в разряд базовых технологий.

# 3 ТРАНСФОРМАЦИЯ ХИМИЧЕСКИХ ЛАБОРАТОРИЙ

Химические лаборатории проходят путь трансформации — от автоматизации и внедрения исследовательского ПО к применению искусственного интеллекта как субъекта исследовательской деятельности. В России есть отдельные примеры современных лабораторий международного уровня, но потенциал страны в инфраструктуре передовой химии реализован пока недостаточно.

Химическую промышленность отличает высокий уровень наукоёмкости. Компании обращаются к передовым технологиям, чтобы ускорить создание новых продуктов с более высокой добавленной стоимостью и в итоге увеличить прибыль, занять дополнительную долю рынка. Наиболее динамичные секторы во многом опираются на процесс исследований и разработок, ведь успешные исследования могут приводить к появлению новых продуктов и совершенствованию уже имеющихся. Соответственно, устройство лабораторий как ключевого субъекта проведения НИОКР приобретает первостепенное значение.

Исследовательские лаборатории в настоящее время переживают переход от физической модели к полностью виртуальной форме. Прежняя модель — лаборатория 3.0 — использовала внутренний ресурс и классические методы исследований без опоры на цифровые решения. Лаборатория будущего, или 5.0 — это цифровая платформа, драйвером которой является искусственный интеллект, — модель **AI-driven lab**, где ИИ становится субъектом исследований. Современные лаборатории 4.0 относятся к гибриднему варианту — как переход от элементов инфраструктуры предыдущего этапа развития к варианту 5.0. В качестве вышеупомянутых элементов можно выделить *навыки кадров, методы генерации идей и построения гипотез, способы поиска данных, оснащение оборудованием, кооперацию с другими субъектами НИОКР* (рис. 5). При интеграции всех описываемых механизмов возникнут лаборатории, управляемые искусственным интеллектом.

На предыдущем этапе ученым необходимо было обращаться к статьям, книгам, справочникам на печатных носителях как единственному источнику данных. Первый этап цифрового перехода позволил перевести в электронный вид многие материалы, а в последующие годы стало возникать всё больше баз данных, в т. ч. научных публикаций. Тем не менее, сегодня подобные датасеты (наборы данных) представляют пока еще разрозненные и неструктурированные «островки» данных. Последующая обработка и создание единого озера данных упростит процесс извлечения необходимой информации и тем самым ускорит темпы исследований.

С развитием науки и производства общество пришло к модели открытых инноваций. Такой подход позволил исследователям черпать идеи из общего интеллектуального пространства. Следующий этап должен привести к тому, что химическая лаборатория, собрав нужные датасеты, направит их искусственному интеллекту, способному генерировать собственные гипотезы в рамках очерченной задачи. Более того, представляется перспективным создание «фабрик ИИ», которые сами смогут черпать нужную информацию из озера данных в соответствии с обозначенными целями, а затем, проведя цикл построений и проверок гипотез, будут автономно создавать новые продукты.

При реализации сценария «фабрик ИИ» возникает вопрос о роли ученых в системе лаборатории новейшего типа. Скорее всего, полностью исключить человека из процесса НИОКР невозможно. Прорывным может стать симбиоз ученого-химика, определяющего правила и цели исследования, и алгоритма,

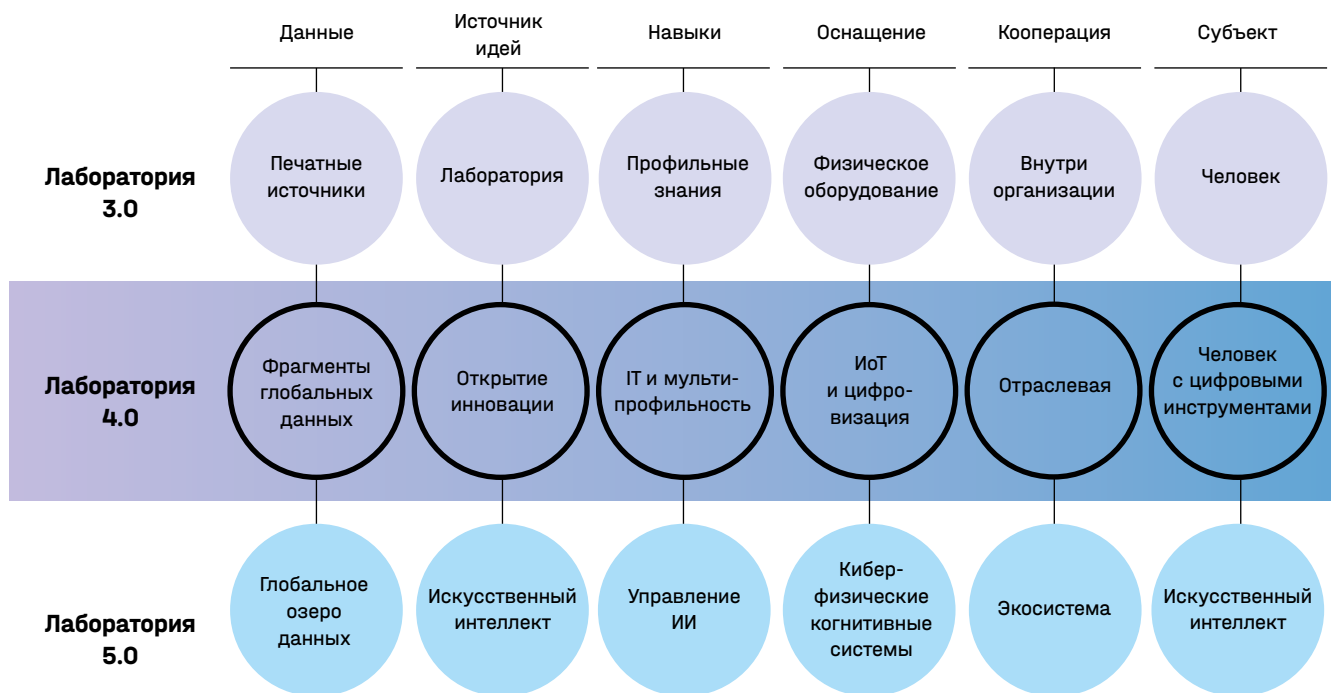


Рис. 5. Элементы химической лаборатории будущего

Источник: ЦСР «Северо-Запад»

способного проводить операции в короткие сроки. Уже сейчас можно заметить, как сдвигаются границы традиционных требований, ставивших на первое место знания в конкретной области, и всё больше места отводится навыкам обращения с цифровыми технологиями. А появление доступных технологий квантовых вычислений только усилит этот тренд.

Технологии компьютерного моделирования существовали и прежде, но из-за скорости их совершенствования вместе с растущей доступностью вычислительного оборудования и многопрофильностью алгоритмов исчезнет необходимость обращаться к классическому лабораторному оборудованию на многих этапах исследования. Этот подход позволит преодолеть некоторые барьеры для проведения НИОКР. Время, затрачиваемое на проведение исследований, — только одно из таких препятствий. Стоимость реагентов и длительность ожидания их получения — существенное препятствие для исследовательской деятельности в области химии. Сегодня частично реализуются элементы симуляций на первых стадиях исследований, но моделирование полного цикла по аналогии с подходом *in silico* откроет новые горизонты перед химической отраслью.

В химии предыдущего этапа НИОКР могли проводиться лабораториями отдельных институтов или организаций в закрытом формате. Растущая сложность сферы химиндустрии не оставляет возможности для изоляции от мирового научного и промышленного сообщества. Игроки Индустрии 4.0 вступают в отраслевые союзы для реализации отдельных проектов. Дальнейшее усложнение потребует более тесной кооперации, а выгоды от совместной работы в пределах экосистемы (например, в виде консорциумов) могут перекрывать стремление организаций оставлять результаты своих исследований исключительно для собственного пользования.

Передовые лаборатории уже интегрируют в исследовательскую деятельность некоторые элементы новейших подходов, приближаясь к образцу лаборатории 5.0, хотя даже наиболее технологичные из них находятся на переходном этапе, когда применение ИИ носит непостоянный характер.

Мировой опыт демонстрирует плавный эволюционный переход от классических лабораторий к модели 5.0.

Кейс 1. Примеры ведущих химических лабораторий за рубежом

**Группа Панде, Стэнфордский университет, США**

Группой ученых со специализацией на применении искусственного интеллекта и машинного обучения в целях химических исследований руководит Виджей Панде, профессор структурной биологии и компьютерных наук<sup>17</sup>. С помощью передовых цифровых подходов решаются научно сложные задачи в области химической биологии, биофизики и биомедицины<sup>18</sup>. Ученые публикуют уникальные алгоритмы для их применения другими исследователями<sup>19</sup>. Благодаря созданному алгоритму доктору Панде удалось успешно запустить стартап Genesis Therapeutics, специализирующийся на поиске лекарственных средств, и получить частное финансирование в объеме 52 млн долларов США, а также вступить в партнерство с крупной биотехнологической компанией Genetech<sup>20</sup>.

**Гонконгская лаборатория квантового ИИ, Университет Гонконга**

Лаборатория объединила в исследовательской группе химиков — специалистов по данным и вычислительной науке для разработки платформы НИОКР на базе машинного обучения и больших данных. Конечная цель лаборатории — открытие материалов нового поколения и разработка новых устройств. Такой симбиоз уникален и является одним из первых примеров для отрасли. Разработанная платформа предназначена специально для исследований в области OLED и твердотельных литий-ионных аккумуляторов. Это дает возможность с исключительной точностью прогнозировать свойства материалов, используемых для литий-ионных батарей и OLED-дисплеев, а результаты исследований легко использовать для разработки солнечных элементов, топливных ячеек и связанных с ними катализаторов. Уникальность подхода позволила привлечь к сотрудничеству Калифорнийский технологический институт и таких крупных промышленных партнеров, как Samsung<sup>21</sup>.

**Лаборатория компьютерных наук и искусственного интеллекта, Массачусетский технологический институт, США**

Для химических исследований группа ученых МТИ адаптирует технологии ИИ и машинного обучения. Исследователи нашли некоторые методы применения искусственного интеллекта для открытия лекарственных средств<sup>22</sup>, а также технологические решения с использованием ИИ для автоматизации химической лаборатории<sup>23</sup>. Это позволило создать автономную систему проведения экспериментов, обладающую креативным потенциалом: она способна не просто повторять заранее заданный набор действий, а синтезировать прежде не существовавшие молекулы. Ученые надеются, что продвижение в этом направлении позволит им освободиться от рутины и направить время и усилия на решение творческих задач<sup>24</sup>. Подходы в НИОКР, созданные лабораторией, берут на вооружение десятки компаний. Так, помощник вице-президента научно-исследовательской транснациональной компании Merck утверждает, что алгоритмы лаборатории переняты для решения текущих задач компании<sup>25</sup>.

17 Pande Lab at Stanford University // Pande Lab. URL: pandelab.org/about#bio (дата обращения: 13.02.2022).

18 Pande Lab at Stanford University / Medium. URL: medium.com/@pandelab (дата обращения: 13.02.2022).

19 pandegroup // GitHub. URL: github.com/pandegroup (дата обращения: 13.02.2022).

20 Genesis Therapeutics Secures \$52M Series A to Further Accelerate AI Innovation and to Launch Drug Discovery & Development Pipeline // Businesswire. URL: https://www.businesswire.com/news/home/20201202005297/en/Genesis-Therapeutics-Secures-52M-Series-A-to-Further-Accelerate-AI-Innovation-and-to-Launch-Drug-Discovery-Development-Pipeline (дата обращения: 15.01.2022).

21 Hong Kong Quantum AI Lab // Hong Kong Quantum AI Lab. URL: hkqai.com (дата обращения: 14.02.2022).

22 Computer system predicts products of chemical reactions // MIT News. URL: news.mit.edu/2017/computer-system-predicts-products-chemical-reactions-0627 (дата обращения: 13.02.2022).

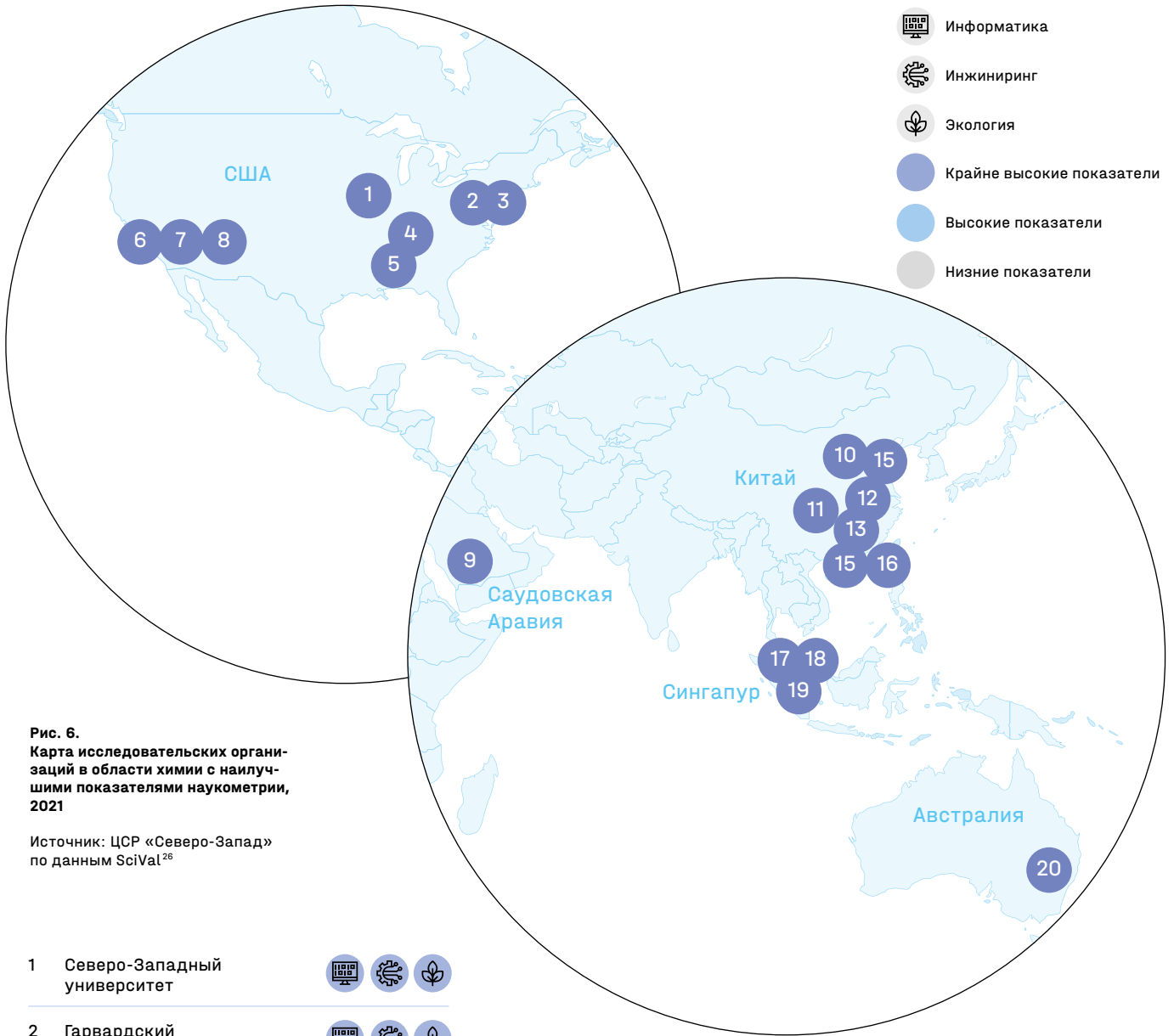
23 Guided by AI, robotic platform automates molecule manufacture // MIT News. URL: news.mit.edu/2019/automate-molecule-production-ai-0808 (дата обращения: 13.02.2022).

24 Guided by AI, robotic platform automates molecule manufacture // MIT News. URL: news.mit.edu/2019/automate-molecule-production-ai-0808 (дата обращения: 13.02.2022).

25 Scientists make digital breakthrough in chemistry that could revolutionize the drug industry // CNBC. URL: cnbc.com/2020/10/24/how-a-digital-breakthrough-could-revolutionize-drug-industry.html (дата обращения: 15.01.2022).

Источники: официальный сайт Pande Lab в Stanford University, Zeng Laboratory, MIT

Стоит отметить, что крупнейшие исследовательские организации, химлаборатории которых применяют ИИ, зачастую сильны и в таких областях знаний, как информатика, инжиниринг и экология (рис. 6). Вероятно, доступ к сильной школе IT способствует раскрытию дополнительного потенциала научных сотрудников.

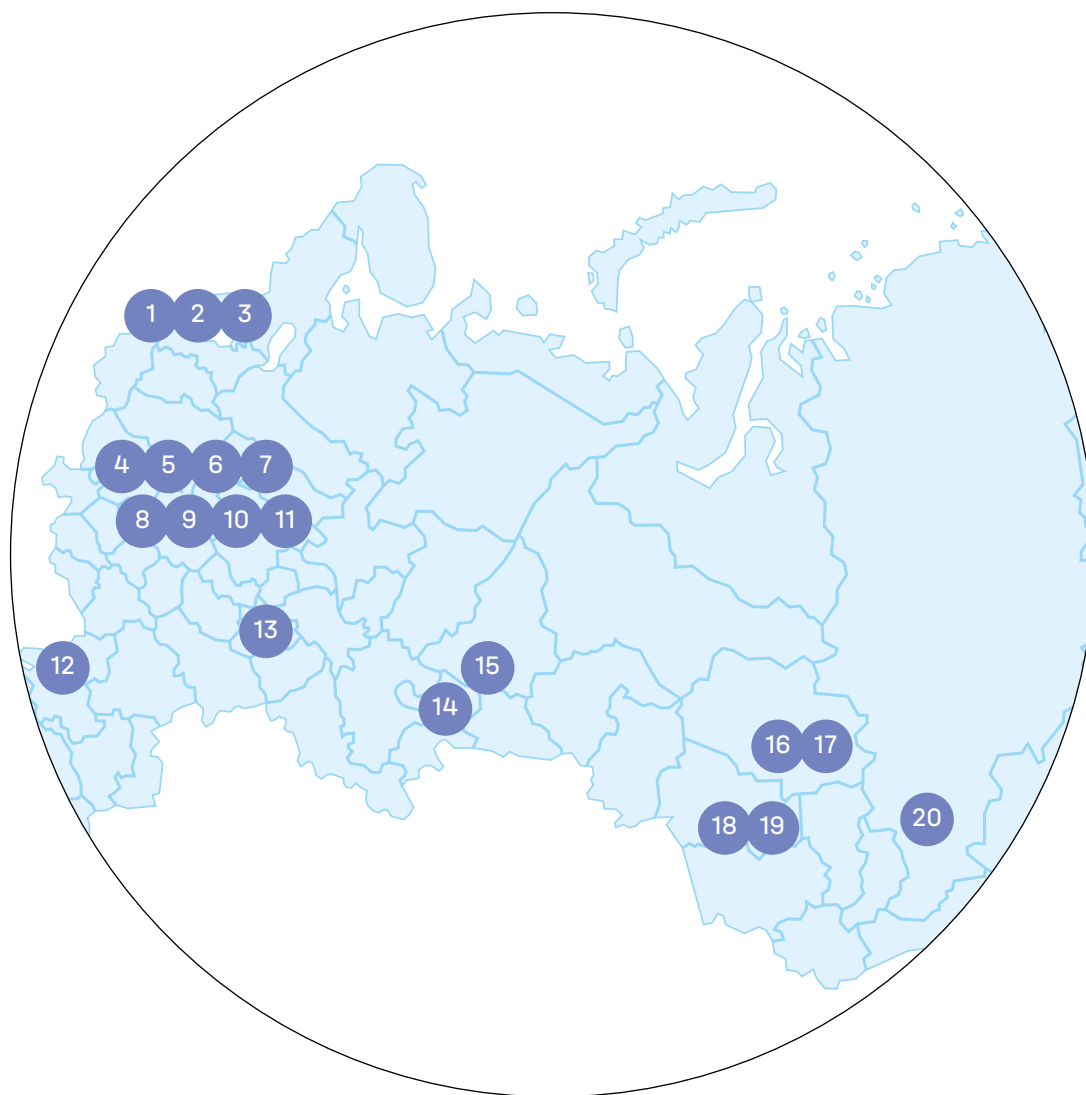


**Рис. 6.** Карта исследовательских организаций в области химии с наилучшими показателями наукометрии, 2021

Источник: ЦСР «Северо-Запад» по данным SciVal<sup>26</sup>

1	Северо-Западный университет				12	Уханьский университет			
2	Гарвардский университет				13	Хунаньский университет			
3	Массачусетский технологический институт				14	Городской университет Гонконга			
4	Университет Теннесси				15	Университет Гонконга			
5	Технологический институт Джорджии				16	Шаньдунский университет науки и технологий			
6	Стэнфордский университет				17	Национальный университет Сингапура			
7	Национальная лаборатория им. Лоуренса в Беркли				18	Наньянский технологический университет			
8	Калифорнийский университет в Беркли				19	Агентство по науке, технологиям и исследованиям Сингапура			
9	Научно-технологический университет им. короля Абдаллы				20	Университет Вуллонгонг			
10	Институт химии Китайской академии наук								
11	Университет электронных наук и технологий Китая								

<sup>26</sup> На карте представлены 20 исследовательских организаций мира с самыми высокими показателями средней цитируемости публикаций в области химии и количеством публикаций по химии более 1500 в период с 2018 по 2021 годы. Уровень показателей дополнительных компетенций основывается на двух критериях: более 500 публикаций в рассматриваемый период и уровень цитируемости выше среднего в соответствующей научной области (информатика, инжиниринг, экология). «Крайне высокие показатели» наукометрии подразумевают превышение порогового уровня в 2000 публикаций по теме для экологии, 4000 для информатики и 6000 для инжиниринга. В выборку не попали такие крупные исследовательские организации, как, например, Кембридж или Институт Макса Планка, по причине сравнительно низкого показателя среднего уровня цитируемости статей при сопоставлении с аналогичными в США или Китае и пр.



- Информатика
- Инжиниринг
- Экология
- Крайне высокие показатели
- Высокие показатели
- Низкие показатели

1	ИТМО (Санкт-Петербург)		11	МФТИ (Москва)	
2	СПбПУ (Санкт-Петербург)		12	ЮФУ (Ростов-на-Дону)	
3	СПбГУ (Санкт-Петербург)		13	КФУ (Казань)	
4	Сколтех (Москва)		14	ЮУрГУ (Челябинск)	
5	РУДН (Москва)		15	УрФУ (Екатеринбург)	
6	Университет Сеченова (Москва)		16	ТГУ (Томск)	
7	МИФИ (Москва)		17	ТПУ (Томск)	
8	МИСиС (Москва)		18	Институт катализа имени Г. К. Борескова (Новосибирск)	
9	Институт элементоор- ганических соединений им. А. Н. Несмеянова (Москва)		19	НГУ (Новосибирск)	
10	Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского (Москва)		20	СФУ (Красноярск)	

**Рис. 7.** Карта потенциала образовательных организаций высшего образования и научных организаций по созданию прорывных лабораторий в передовой химии, 2021

Источник: ЦСР «Северо-Запад» по данным SciVal<sup>27</sup>

<sup>27</sup> На карте представлены 20 исследовательских организаций РФ с самыми высокими показателями средней цитируемости публикаций по химии в период с 2018 по 2021 годы. Уровень показателей дополнительных компетенций основывается на двух критериях: более 500 публикаций в рассматриваемый период и уровень цитируемости выше среднего в соответствующей научной области в России (информатика, инжиниринг, экология). «Крайне высокие показатели» наукометрии подразумевают значительное превышение среднего уровня числа публикаций и цитируемости статей. В выборку не попали такие крупные исследовательские организации, как, например, МГУ, по причине сравнительно низкого показателя среднего уровня цитируемости статей, что может быть вызвано размером организации и негативным эффектом на качественных показателях наукометрии.



Отечественные ученые тоже применяют цифровые подходы, но (в отличие от передовых лабораторий мира, имеющих долгую историю) в России зачастую реализуется сценарий гринфилда — МФТИ, ИТМО, Сколтех (рис. 7). В результате мы видим частные примеры исследовательских структур, которые скорее интегрируют отдельные элементы парадигмы лаборатории 5.0, нежели воспроизводят ее полностью. Примечательно, что флагманские лаборатории появились как раз в вузах с сильным ИТ-направлением.

В результате сложившихся компетенций исследовательских организаций и специфики фронтальных областей исследований можно спрогнозировать потенциальные центры новой химии. Серьезная научная база в области IT, инжиниринга (в силу применения инженерных подходов — дизайна, сборки, тестирования, анализа данных — при решении задач в химии) и экологии (как фундамента для развития устойчивой химии) в комбинации с классической химией в состоянии обеспечить научный прорыв. Значит, такие университеты, как СПбГУ, СПбПУ, ТГУ, ТПУ и ЮУрГУ, могут стать вероятными лидерами данного направления.

Кейс 2. Примеры ведущих химических лабораторий в России

**Лаборатория программируемых функциональных материалов, МФТИ**

В начале 2021 года был анонсирован проект МФТИ по созданию *лаборатории программируемых функциональных материалов* под руководством нобелевского лауреата профессора Константина Новосёлова. Инициатива получила финансирование в размере 500 млн рублей от частного публичного инвестора на первые пять лет работы — уникальный пример привлечения частного капитала в формирование исследовательской единицы благодаря значимому имени и актуальной тематике. Ученые исследуют вещества с нестандартными условиями фазовых переходов второго рода (той же темой занимается аналогичная лаборатория Новосёлова в Сингапуре). Это потенциально прорывная область науки, которая позволит открыть путь к созданию нанороботов. Прикладные идеи, рожденные в стенах лаборатории, представляют ценность, например, для фармацевтической индустрии — в связи с разработанными методами прогнозирования свойств макромолекул. Применение программируемым материалам можно найти в химической индустрии, электронике и энергетике<sup>28</sup>.

28 Константин Новосёлов создает лабораторию «умных» материалов в МФТИ // Коммерсантъ. URL: [kommersant.ru/doc/4683651](https://kommersant.ru/doc/4683651) (дата обращения: 11.02.2022).

**Научно-образовательный центр инфохимии, Университет ИТМО**

*Центр инфохимии* возник в результате актуализации междисциплинарных направлений в данной области знаний. Директором (и руководителем одной из научных групп) стала профессор Екатерина Скорб. На базе ИТМО действует лаборатория искусственного интеллекта для умных и функциональных материалов, с которой сотрудничают Константин Новосёлов (см. выше) и Дарья Андреева-Боймлер, профессор Национального университета Сингапура. В лабораториях университета активно применяются передовые цифровые подходы для широкого спектра научных задач, требующих передовых решений и международной кооперации. В НОЦ инфохимии собраны и другие научные группы по передовым направлениям: инфохимия, вычислительная химия, биомиметические материалы, хемоинформатика, хеометрика, цифровизация пищевых технологий, биоэлементология, цифровая трансформация, структурированная и динамическая мягкая материя, роботизация химических технологий, трибоинформатика. Пример разработки центра инфохимии ИТМО — универсальная электрохимическая тест-платформа. Технология, являющаяся инструментом передовой химии, имеет большой коммерческий потенциал за счет широкого диапазона возможного применения: в здравоохранении, производстве продуктов питания, спорте.

Источники: «Коммерсантъ», Сколково, Университет ИТМО

## Кейс 2. Примеры ведущих химических лабораторий в России

### Лаборатория компьютерного дизайна новых материалов, Сколтех

В 2019 году РНФ и «Газпромнефть НТЦ» запустили совместный проект: в Сколтехе начала работать *лаборатория компьютерного дизайна новых материалов*. Под руководством Артёма Оганова была создана модель нейронной сети, которая позволяет вычислять сверхтвердые материалы. Они применяются во многих сферах, от микроэлектроники до добычи нефти. Профессор Оганов создал также вычислительный метод для предсказания кристаллических структур USPEX, позволивший открыть новые материалы и вещества и активно внедрявшийся в США. Актуальность знаний о материалах с суперсвойствами стала одной из основных причин создания новой лаборатории. Промышленная индустрия также заинтересована в стимулировании НИОКР, поскольку передовые композиты становятся всё более привлекательными в прикладном смысле<sup>29</sup>.

### Международный научный институт растворной химии передовых материалов и технологий (SCAMT), Университет ИТМО

В 2014 году Александр и Владимир Виноградовы основали в Университете ИТМО *международную научную лабораторию растворной химии передовых материалов и технологий (SCAMT)*. Позднее выделилось несколько научных групп, занимавшихся, например, новейшими темами — золь-гель-процессами и струйной печатью. Лаборатория трансформировалась в институт, на базе которого был выстроен химико-биологический кластер, где ведутся как прикладные, так и фундаментальные исследования<sup>30</sup>. В структуре института появился центр искусственного интеллекта в химии, сосредоточившийся на исследованиях с применением машинного обучения. Благодаря ему стало возможным использование высокопроизводительных и автоматизированных методов генерации данных и предсказания свойств материалов, а также тест-платформ по валидации потенциально новых материалов.

<sup>29</sup> В Сколтехе открылась лаборатория компьютерного дизайна новых материалов // Сколково. URL: [old.sk.ru/news/b/press/archive/2019/09/09/v-skoltehe-otkrylas-laboratoriya-kompyuternogo-dizayna-novyh-materialov.aspx](http://old.sk.ru/news/b/press/archive/2019/09/09/v-skoltehe-otkrylas-laboratoriya-kompyuternogo-dizayna-novyh-materialov.aspx) (дата обращения: 11.02.2022).

<sup>30</sup> Международный научный центр SCAMT // Университет ИТМО. URL: [scamt.ifmo.ru/ru/](http://scamt.ifmo.ru/ru/) (дата обращения: 11.02.2022).

Источники: «Коммерсантъ», Сколково, Университет ИТМО

Современные лаборатории эффективны не только как источник научных открытий: они могут оказаться востребованными на рынке исследований и разработок, а крупные компании, применяющие наукоемкие технологии, должны быть заинтересованы в коллаборации с такими коллективами.

# 4 ТРАНСФОРМАЦИЯ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ КОМПЕТЕНЦИЙ

Ключевые исследователи в современных условиях должны обладать обширным набором навыков, выходящих за пределы их научного профиля. Доминирующее значение приобретает способность ученых взаимодействовать с искусственным интеллектом и интегрировать его в процесс НИОКР.

Переход к модели **лаборатории 5.0 (AI-driven lab)** и тренд на устойчивое развитие приводят к изменению компетенций исследователей в области химии. Эта трансформация идет путем наращивания нового опыта и информации на уже имеющуюся научную базу. Инструментарий ученого ощутимо меняется на каждом этапе научно-технического прогресса (рис. 8).

В химии 3.0 все знания, навыки и инструментарий ученого использовались в рамках лаборатории. Глобализация, появление цифровых технологий и трансформация характера научной деятельности стали катализаторами превращения химика-исследователя в химика — ключевого исследователя (Principal Investigator — PI). Следующий этап — химия 5.0 — вызовет к жизни модель химика — администратора лаборатории 5.0, которому потребуются новые человеко-машинные знания, навыки и инструменты.



Рис. 8. Трансформация исследовательских компетенций в химии

Источник: ЦСР «Северо-Запад» по данным Форсайт-сессии, Accenture<sup>31</sup>, доклада «Национальная технологическая инициатива: 7 лет в движении»

31 The evolution of digital R&D in chemicals // Accenture. URL: [accenture.com/\\_acnmedia/PDF-158/Accenture-Digital-Research-And-Development-Chemicals.pdf](https://www.accenture.com/_acnmedia/PDF-158/Accenture-Digital-Research-And-Development-Chemicals.pdf) (дата обращения: 11.02.2022).

Современный тренд на переход к междисциплинарным знаниям и цифровым компетенциям подтверждают российские исследователи. Они также говорят о восполнении дефицита компетенций через привлечение профильных специалистов.

Екатерина Скорб, к.х.н., ведущий профессор и директор Научно-образовательного центра (НОЦ) инфохимии Университета ИТМО:

*«Химия на стыке с ИТ тяжело идет везде, просто потому что химики традиционного образования „не сильно учат информатику“. Люди либо сами „докручивают“ эти знания, либо нам (сотрудникам НОЦ инфохимии. — Прим. авт.) приходится развивать новые направления.*

*Новая химия развивается в университете ИТМО, поскольку здесь есть та почва, куда можно привлекать программистов, математиков к решению важных задач химии и материаловедения, роботизации химии и химических технологий»<sup>32</sup>*

32 Из интервью с Е. В. Скорб (17.10.2021).

Марина Трусова, д.х.н., профессор, директор исследовательской школы химических и биомедицинских технологий ТПУ:

*«Исследователя необходимо готовить не только со знаниями в разных областях, но и обучать умению искать, читать и интерпретировать уже имеющиеся исследования.*

*Исследования становятся настолько междисциплинарными, что к нам приходят и оптоотехники, машиностроители, биомедицина, материаловедаы...»<sup>33</sup>*

33 Из интервью с М. Е. Трусовой (28.10.2021).

Текущие изменения компетенций для специалистов уже отражаются в перечне требований к вакансиям. Если раньше для выполнения химических НИОКР требовались навыки исключительно в области химии, то теперь нужны сотрудники с ИТ-знаниями и компетенциями. На крупнейших онлайн-платформах для поиска работы публикуются вакансии с акцентированным запросом на владение цифровыми навыками (табл. 1).

34 Machine-learning Atomistic Modeling of Corrosion Postdoctoral Researcher // C&EN. URL: [chemistryjobs.acs.org/job/36059/machine-learning-atomistic-modeling-of-corrosion-postdoctoral-researcher/](https://chemistryjobs.acs.org/job/36059/machine-learning-atomistic-modeling-of-corrosion-postdoctoral-researcher/) (дата обращения: 11.02.2022).

35 Principal Investigators in Machine Learning in Biomedicine (f/m/x) // New Scientist Jobs. URL: [jobs.newscientist.com/en-gb/job/1401737580/principal-investigators-in-machine-learning-in-biomedicine-f-m-x-/](https://jobs.newscientist.com/en-gb/job/1401737580/principal-investigators-in-machine-learning-in-biomedicine-f-m-x/) (дата обращения: 11.02.2022).

36 Master's student or intern: Artificial Intelligence in Chemistry and Material Science // IBM Research Europe. URL: [zurich.ibm.com/careers/2021\\_009.html](https://zurich.ibm.com/careers/2021_009.html) (дата обращения: 11.02.2022).

37 PhD or post-doctoral researcher: Organic Chemistry for Autonomous Lab Development and Operation // IBM Research Europe. URL: [zurich.ibm.com/careers/2021\\_054.html](https://zurich.ibm.com/careers/2021_054.html) (дата обращения: 11.02.2022).

38 Работа, поиск персонала и публикация вакансий // HeadHunter. URL: [hh.ru](https://hh.ru) (дата обращения: 11.02.2022).

Название вакансии	Требования
<p>Научный сотрудник с докторской степенью в области подходов к машинному обучению для моделирования коррозии актинидных металлов и металлооксидных материалов в Ливерморскую национальную лабораторию Лоуренса<sup>34</sup></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>— PhD в области физики, химии, материаловедения или смежных областях</li> <li>— опыт применения первых принципов моделирования конденсированных фаз</li> <li>— опыт программирования на C++, Fortran 95 или эквивалентном языке на высоком уровне. Знание скриптового языка будет преимуществом</li> </ul>
<p>Ключевой исследователь машинного обучения в биомедицине в Центр Гельмгольца<sup>35</sup></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>— степень PhD</li> <li>— применение машинного обучения в области биомедицинских данных</li> <li>— инновационное мышление</li> </ul>
<p>Стажер в области исследований применения искусственного интеллекта в химии и материаловедении в подразделение IBM Research в Цюрихе<sup>36</sup></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>— получил или получает степень магистра в области компьютерных наук, физики, химии или инжиниринга с искренним интересом к химии, химическому синтезу или материаловедению</li> <li>— опыт в машинном обучении и моделях данных</li> <li>— отличные навыки программирования в Python</li> <li>— опыт работы с библиотеками TensorFlow/PyTorch, научным стеком Python</li> </ul>
<p>PhD или постдок-исследователь в Автономную лабораторию органической химии в подразделение IBM Research в Цюрихе<sup>37</sup></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>— степень магистра или PhD в области органической химии с искренним интересом к автоматизации, машинному обучению, науке о данных, информатике</li> <li>— опыт работы с платформами автоматизации в химии</li> <li>— опыт в машинном обучении и моделях данных</li> <li>— навыки программирования в Python</li> </ul>
<p>Медицинский химик в Insilico Medicine (Сколково)<sup>38</sup></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>— высшее химическое образование (медицинская химия, органическая химия, биоорганическая химия)</li> <li>— ученая степень кандидата наук / PhD;</li> <li>— опыт разработки биоактивных низкомолекулярных соединений</li> <li>— владение программными пакетами для молекулярного моделирования (Schrodinger, MOE, Dock и пр.)</li> <li>— навыки программирования на уровне написания скриптов для автоматизированного анализа экспериментальных данных будет плюсом</li> </ul>

Табл. 1.  
Актуальные вакансии исследователей, 2021

Источник: ЦСР «Северо-Запад» по данным открытых источников

Таким образом, в научной деятельности одним из ключевых становится навык применения искусственного интеллекта, а на соответствующие кадры отмечается повышенный спрос.

Актуальные цифровые навыки используются в самых цитируемых областях передовой химии (рис. 9). Талантливые российские химики применяют современный инструментарий для работы во фронтальных тематиках.

Валентин Анаников возглавляет лабораторию металлокомплексных и наноразмерных катализаторов Института органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН. Его исследования направлены на улучшение технологии 3D-печати для химического синтеза биологически активных молекул и дизайна поточных реакторов. В 2021 году была опубликована разработанная при его участии методология для определения степени безопасности химических процессов в зеленой химии<sup>39</sup>. В составе групп ученых В. Анаников формирует новые устойчивые подходы в химии, позволяющие соблюдать принцип атом-экономности при синтезе веществ<sup>40</sup>.

Артем Абакумов работает в передовой области технологий запасаения энергии в металл-ионных аккумуляторах (на базе Центра по электрохимическому хранению энергии в Сколковском институте науки и технологий)<sup>41</sup>. В 2021 году вместе с коллегами из Сколтеха он запатентовал технологию, которая поможет усовершенствовать экологичные аккумуляторы нового поколения и сделать их коммерчески эффективными. Созданный учеными анод из нанотрубок ускорит массовое проникновение таких калий-ионных аккумуляторов на рынок. В качестве аналога литий-ионных аккумуляторов разработка Абакумова позволит снизить потребление лития, запасы которого ограничены<sup>42</sup>.

Максим Молокеев из Сибирского федерального университета и Института физики им. Л. В. Киренского СО РАН ведет исследования на стыке физики, химии и науки о материалах, являясь одним из самых цитируемых ученых в мире<sup>43</sup>. В процессе сотрудничества с китайскими специалистами он определил строение перспективного люминофора — вещества, на основе которого можно вывести на рынок новые белые светодиоды<sup>44</sup>. А в 2021 году в составе международного научного коллектива М. Молокеев разработал уникальный люминофор, который благодаря своей универсальности пригоден для использования в сенсорах широкого спектра направлений — в медицине (для отслеживания состояния пациентов), сельском хозяйстве и биосенсорике<sup>45</sup>.

В рамках российской международной программы кооперации Юрий Кившарь стал одним из первых получателей мегагранта на создание лаборатории метаматериалов в Университете ИТМО (позднее стала основой для целого факультета)<sup>46</sup>. Исследователь участвовал в создании меняющей структуру света метаповерхности, что сдвинуло парадигму нелинейной оптики<sup>47</sup>. Ю. Кившарь — соруководитель проекта Университета ИТМО по улучшению оптоволокон для передачи данных. Теперь это оптоволокно возможно использовать для улучшения изображения в эндоскопии и лапароскопии, для квантовых технологий и оптоволоконных датчиков<sup>48</sup>.

В России, однако, даже лучшие представители научного сообщества не всегда обладают знаниями в области ИИ либо не интегрируют его в своей работе. Более того: на фоне плавной смены поколений исследователей широкое применение ИИ молодыми перспективными учеными в настоящее время не выявляется (рис. 10).

39 Egorova K., Galushko A., Dzhemileva L., D'yakonov, V., Ananikov V. Building bio-Profiles for common catalytic reactions // Green Chem. — 2021. — № 23.

40 Romashov L. V. et al. Atom-economic Approach to the Synthesis of  $\alpha$ -(Hetero)aryl-substituted Furan Derivatives from Biomass // Chemistry — An Asian Journal. — 2022. — № 17 (1).

41 Artem Abakumov // Skoltech Faculty. URL: faculty.skoltech.ru/people/artemabakumov (дата обращения: 11.02.2022).

42 Новый патент Сколтеха: анод из нанотрубок повысит эффективность калий-ионных аккумуляторов // Skoltech. URL: skoltech.ru/2021/03/novyj-patent-skolteha-anod-iz-nanotrubok-povyisit-effektivnost-kalij-ionnyh-akkumulyatorov/ (дата обращения: 11.02.2022).

43 Физики из Красноярск вошли в топ лучших научных рецензентов мира // Наш Красноярский край. URL: gnkk.ru/news/fiziki-iz-krasnoyarska-voshli-v-top-luchsh/?utm\_source=yxnews&utm\_medium=desktop&utm\_referrer=https%3A%2F%2Fyandex.ru%2Fnews%2Fsearch%3Ftext%3D (дата обращения: 11.02.2022).

44 Определено строение материала нового типа // Научная Россия. URL: scientificrussia.ru/articles/opreделение-stroenie-novoj-struktury (дата обращения: 11.02.2022).

45 Ученые создали универсальное вещество-основу для сенсоров широкого профиля // РИА Новости. URL: ria.ru/20211018/sfu-1754972217.html (дата обращения: 11.02.2022).

46 Воздух несвободы. Что заставляет российских ученых уезжать за границу? // Русская служба Би-би-си. URL: bbc.com/russian/features-57028917 (дата обращения: 11.02.2022).

47 Wang L., Kruk S., Koshelev K., Kravchenko I., Luther-Davies B., Kivshar Y. Nonlinear Wavefront Control with All-Dielectric Metasurfaces // Nano Letters. — 2018. — № 18 (6).

48 «Пролить свет» под правильным углом // Коммерсантъ. URL: kommersant.ru/doc/4540238 (дата обращения: 11.02.2022).



Среди иностранных исследователей с самыми высокими показателями цитируемости также не выявлена повсеместная распространенность подобной практики (рис. 11). Получается, что в части использования возможностей ИИ лучшие отечественные ученые находятся на сопоставимом уровне с зарубежными. Можно предположить, что активное внедрение искусственного интеллекта в химические исследования способно вывести Россию на лидирующие позиции благодаря технологической оснащенности лабораторий.

Цифровизация и новые технологии приводят к кадровой трансформации не только в науке, но и в промышленности. По прогнозам консалтинговой компании Deloitte<sup>49</sup>, в перспективе до 2030 года в химической промышленности появятся новые профессии:

- специалист по вычислительному материаловедению (открытие новых материалов при помощи анализа данных и прогнозирования взаимосвязей структур и свойств новых материалов);
- инженер-нанохимик (изучение наноразмерных структур, моделирование новых материалов);
- инженер топливных элементов (проектирование топливных элементов, производящих электроэнергию в результате химической реакции с участием водорода);
- аналитик прогнозных поставок (оценка рекомендаций ИИ и принятие окончательных решений в обеспечении поставок материалов, обслуживании клиентов и др.);
- инженер цифровых двойников (управление цифровыми двойниками технологического оборудования).

Переход к новым компетентностным профилям химической индустрии при сохранении существующих подходов к подготовке специалистов в скором времени может вызвать дефицит исследовательских и производственных кадров необходимой квалификации для работы в меняющейся индустрии. Федеральные государственные образовательные стандарты подготовки по направлению «Химия» содержат лишь рамочные требования к компьютерной грамотности при решении задач профессиональной деятельности. В профессиональных стандартах тоже нет требований к новым компетенциям и цифровому инструментарию. Введение вузами в образовательные курсы для химиков-исследователей дисциплин других естественнонаучных направлений, а также подготовки в области использования цифрового инструментария, включая управление искусственным интеллектом и машинное обучение, позволит обеспечить возрастающий спрос на компетенции будущего.

<sup>49</sup> The future of work in chemicals // Deloitte. URL: [www2.deloitte.com/content/dam/Deloitte/us/Documents/energy-resources/us-the-future-of-work-in-chemicals-pov.pdf](http://www2.deloitte.com/content/dam/Deloitte/us/Documents/energy-resources/us-the-future-of-work-in-chemicals-pov.pdf) (дата обращения: 11.02.2022).

**TC.30 SECONDARY BATTERIES** 

Савилов Сергей Вячеславович  
(h-индекс: 26)


Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, лаборатория катализа и газовой электрохимии

Исследования: натриево-ионные аккумуляторы; ионное хранение

Абакумов Артем Михайлович  
(h-индекс: 43)

Сколковский институт науки и технологий, Центр энергетической науки и технологий

Исследования: химия твердого тела, электрокатализ, материалы для металло-ионных аккумуляторов

**TC.8 PHOTOCATALYSIS** 

Трошин Павел Анатольевич  
(h-индекс: 41)

Институт проблем химической физики РАН, лаборатория функциональных материалов для электроники и медицины

Исследования: органические полупроводники, органическое материаловедение, солнечные батареи

Молокеев Максим Сергеевич  
(h-индекс: 56)

Институт проблем химической физики РАН, лаборатория функциональных материалов для электроники и медицины

Исследования: органические полупроводники, органическое материаловедение, солнечные батареи

**TC.22 GRAPHENE; CARBON NANOTUBES** 

Глазов Михаил Михайлович  
(h-индекс: 43)

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, центр физики наноструктур сектора теории квантовых когерентных явлений

Исследования: спиновая динамика носителей заряда, оптическая спектроскопия

Насибулин Альберт Галийевич  
(h-индекс: 50)

Сколковский институт науки и технологий, Центр фотоники и инженерии

Исследования: наночастицы, пленки из нанотрубок, четвероногие — насыщаемые поглотители

**TC.47 PLASMONS; METAMATERIALS** 

Кившарь Юрий Семёнович  
(h-индекс: 121)


Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, лаборатория метаматериалов

Исследования: нанопластика, нанопластики

Казанский Николай Львович  
(h-индекс: 50)

Самарский национальный исследовательский университет им. академика С. П. Королева, лаборатория автоматизированных систем научных исследований

Исследования: дифракционная нанопластика; компьютерная оптика

**TC.4 CATALYSIS; SYNTHESIS; CATALYSTS** 

Анаников Валентин Павлович  
(h-индекс: 56)

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, лаборатория металлокомплексных и наноразмерных катализаторов

Исследования: катализ; органический синтез; молекулярная сложность и трансформации

Белецкая Ирина Петровна  
(h-индекс: 63)

Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН, лаборатория новых физико-химических проблем

Исследования: арилирование; реакции перекрестного связывания; йодобензолы

**TC.7 CATALYSTS; ZEOLITES; HYDROGENATION** 

Герасимов Евгений Юрьевич  
(h-индекс: 26)

Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, лаборатория структурной диагностики ультрадисперсных и наноструктурированных систем

Исследования: гидрообессеривание; дибензотиофен; генерация водорода

Максимов Антон Львович  
(h-индекс: 25)

Институт нефтехимического синтеза А. В. Топчева РАН, лаборатория химии углеводородов

Исследования: гидрообессеривание; дибензотиофен; катализаторы

**TC.71 ORGANOMETALLICS** 

Самсоненко Денис Геннадьевич  
(h-индекс: 29)

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, лаборатория металл-органических координационных полимеров

Исследования: металлоорганические структуры

Федин Владимир Петрович  
(h-индекс: 47)

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, лаборатория металл-органических координационных полимеров

Исследования: металлоорганические структуры, перовскиты

**TC.61 OLED; SOLAR CELLS** 

Пономаренко Сергей Анатольевич  
(h-инд.: 33)

Институт синтетических полимерных материалов им. Н. С. Ениколопова РАН, лаборатория металл-органических координационных полимеров

Исследования: органические солнечные батареи, органическая электроника

Паращук Дмитрий Юрьевич  
(h-индекс: 22)

МГУ, группа органической электроники

Исследования: органическая электроника, органические полупроводники, полупроводниковые полимеры, органические солнечные батареи

**TC.128 BIOSENSORS; ELECTRODES; VOLTAMMETRY** 

Волова Татьяна Григорьевна  
(h-индекс: 29)

Институт биофизики ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН», лаборатория хемоавтотрофного биосинтеза

Исследования: биомедицинское материаловедение и применение полимеров


Шишацкая Екатерина Игоревна  
(h-индекс: 23)

Институт биофизики ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН», лаборатория хемоавтотрофного биосинтеза

Исследования: полимеры




TC.128 BIOSENSORS; ELECTRODES 		TC.609 ADDITIVES; MANUFACTURE; PRINTING 		TC.191 ADSORPTION; ADSORBENTS 	
<p>Карякин Аркадий Аркадьевич (h-индекс: 46)</p> <p>Московский государственный университет, лаборатория электрохимических методов химического факультета</p>		<p>Суфияров Вадим Шамилович (h-индекс: 18)</p> <p>Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, лаборатория синтеза новых материалов и конструкций</p>		<p>Ткачев Алексей Григорьевич (h-индекс: 16)</p> <p>Тамбовский государственный технический университет, кафедра «Техника и технологии производства нанопродуктов»</p>	
<p>Комкова Мария Андреевна (h-индекс: 10)</p> <p>Московский государственный университет, лаборатория электрохимических методов химического факультета</p>		<p>Попович Анатолий Анатольевич (h-индекс: 20)</p> <p>Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, лаборатория синтеза новых материалов и конструкций</p>		<p>Галунин Евгений Валерьевич (h-индекс: 13)</p> <p>Тамбовский государственный технический университет, научно-исследовательская кафедра «Техника и технологии производства нанопродуктов»</p>	
<p>Исследования: физико-химия ферментов, биосенсоры на основе наноструктур электро- и биокатализаторов</p>		<p>Исследования: 3D-печать, селективное лазерное плавление</p>		<p>Исследования: адсорбенты; оксид графена; биосорбенты</p>	
<p>Исследования: проточные биосенсоры, электрохимические анализаторы, гексацианоферраты</p>		<p>Исследования: 3D-печать, селективное лазерное плавление</p>		<p>Исследования: адсорбенты; оксид графена; биосорбенты</p>	
TC.248 FLUORESCENCE; SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY 		TC.223 MEMBRANES; DESALINATION 		TC.82 PHARMACEUTICAL PREPARATIONS 	
<p>Стойков Иван Иванович (h-индекс: 25)</p> <p>Казанский федеральный университет</p>		<p>Никоненко Виктор Васильевич (h-индекс: 41)</p> <p>Кубанский государственный университет, лаборатория природных полимеров</p>		<p>Скорик Юрий Андреевич (h-индекс: 21)</p> <p>Институт высокомолекулярных соединений РАН, лаборатория природных полимеров</p>	
<p>Исследования: органическая, элементоорганическая, супрамолекулярная и медицинская химии макроциклических соединений</p>		<p>Исследования: электродиализ; ионообменные мембраны; перенос ионов</p>		<p>Исследования: аналитическая и координационная химия, химия и физико-химия полисахаридов, полимерные системы доставки лекарственных веществ</p>	
<p>Воронкова Виолета Константиновна (h-индекс: 14)</p> <p>Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского, лаборатория спиновой физики и спиновой химии</p>		<p>Письменская Наталья Дмитриевна (h-инд.: 31)</p> <p>Кубанский государственный университет, лаборатория электро-мембранных явлений</p>		<p>Захарова Люция Ярулловна (h-индекс: 28)</p> <p>Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова, лаборатория высокоорганизованных сред</p>	
<p>Исследования: спектроскопия; спиновые свойства новых материалов</p>		<p>Исследования: мембраны; мембранные процессы</p>		<p>Исследования: самоорганизация, амфилилы, циклофаны, полимеры, супрамолекулярный катализ, наноконтейнеры</p>	




Рис. 9. Ведущие исследователи передовой химии в России, 2021




 Применение ИИ в научной работе

Источник: ЦСР «Северо-Запад» по данным SciVal<sup>50</sup>

50 Список исследователей сформирован из двух представителей с наибольшим объемом цитирований по каждому направлению исследований в области прорывных направлений химии за период 2016–2020.

<b>TC.30 SECONDARY BATTERIES</b> 		<b>TC.8 PHOTOCATALYSIS</b> 		<b>TC.22 GRAPHENE; CARBON NANOTUBES</b> 	
Капаев Роман Римович (h-индекс: 11)		Селищев Дмитрий Сергеевич (h-индекс: 14)		Куклин Артем Валентинович (h-индекс: 10)	
Сколковский институт науки и технологий, лаборатория фото- и электрокатализа	Исследования: аккумуляторные батареи большой емкости с органическими анодами и катодами, Na-ионные аккумуляторы	Институт катализа СО РАН, лаборатория фото- и электрокатализа	Исследования: фотокаталитическое окисление, фотокаталитическая очистка воздуха, композитные фотокатализаторы	Сибирский федеральный университет, международный научно-исследовательский центр спектроскопии и квантовой химии	Исследования: ферромагнетизм и полуметаллическая природа на наномасштабе, магнитные туннельные переходы

<b>TC.47 PLASMONS; METAMATERIALS</b> 		<b>TC.4 CATALYSIS; SYNTHESIS; CATALYSTS</b> 		<b>TC.7 CATALYSTS; ZEOLITES; HYDROGENATION</b> 	
Кошелев Кирилл Леонидович (h-индекс: 17)		Ларионов Владимир Анатольевич (h-индекс: 13)		Готов Александр Павлович (h-индекс: 14)	
Университет информационных технологий, механики и оптики, физико-технический факультет	Исследования: нелинейные метаповерхности, нелинейная нанопотоника	Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН, лаборатория асимметрического катализа	Исследования: синтез природных α-аминокислот, асимметричный синтез	РГУ нефти и газа (НИУ) им. И. М. Губкина, лаборатория физической и коллоидной химии	Исследования: катализ с применением нанотрубок, наноглина, гидрообессеривание

<b>TC.71 ORGANOMETALLICS</b> 		<b>TC.61 OLED; SOLAR CELLS</b> 		<b>TC.69 POLYPROPYLENES; LACTIC ACID; BLENDING</b> 	
Зорина-Тихонова Екатерина Николаевна (h-индекс: 10)		Сосоров Андрей Юрьевич (h-индекс: 10)		Минаев Никита Владимирович (h-индекс: 12)	
Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, лаборатория химии координационных полиядерных соединений	Исследования: координационные полимеры, магнитная релаксация, магнитокалорические эффекты	Институт биорганической химии им. академиков М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН, лаборатория моделирования биомолекулярных систем	Исследования: органическая наноэлектроника, кристаллы органических полупроводников	Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» РАН, лаборатория лазерной наноинженерии	Исследования: квазиизотермическое вспенивание, вспенивание для полилактидов, пластифицированные SCF










<p><b>TC.128 BIOSENSORS; ELECTRODES</b></p> 	<p><b>TC.609 ADDITIVES; MANUFACTURE; PRINTING</b></p> 	<p><b>TC.191 ADSORPTION; ADSORBENTS</b></p> 
<p>Комкова Мария Андреевна (h-индекс: 10)</p> <p>Московский государственный университет, лаборатория электрохимических методов химического факультета</p>	<p>Сурменев Роман Анатольевич (h-индекс: 29)</p> <p>Томский политехнический университет, научно-исследовательский центр «Физическое материаловедение и композитные материалы»</p>	<p>Семенов Владимир Сергеевич (h-индекс: 24)</p> <p>Уральский федеральный университет, кафедра радиохимии и прикладной экологии</p>
<p><b>TC.248 FLUORESCENCE; SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY</b></p> 	<p><b>TC.223 MEMBRANES; DESALINATION</b></p> 	<p><b>TC.82 PHARMACEUTICAL PREPARATIONS</b></p> 
<p>Ксенофонов Александр Андреевич (h-индекс: 11)</p> <p>Институт химии растворов им. Г. А. Крестова РАН, лаборатория «Компьютерный синтез химических соединений» и лаборатория «Физическая химия растворов макроциклических соединений»</p>	<p>Петухов Антон Николаевич (h-индекс: 13)</p> <p>Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, лаборатория умных материалов и технологий</p>	<p>Герасимов Александр Владимирович (h-индекс: 12)</p> <p>Казанский федеральный университет, лаборатория физико-химических исследований</p>

Рис. 10. Молодые исследователи — звёзды передовой химии в России, 2021

Источник: ЦСР «Северо-Запад» по данным SciVal<sup>51</sup>


■ Применение ИИ в научной работе

<sup>51</sup> Список исследователей сформирован из двух представителей с наиболее высокими темпами роста числа цитирований по каждому направлению исследований в области прорывных направлений химии за период 2016–2020 и индексом Хирша более 10 в возрасте до 40 лет.

<p><b>TC.30 SECONDARY BATTERIES</b></p> 	<p><b>TC.8 PHOTOCATALYSIS</b></p> 	<p><b>TC.22 GRAPHENE; CARBON NANOTUBES</b></p> 
<p>Юрий Гогоци (h-индекс: 167)</p> <p>Дрексельский университет, США</p> <p>Исследования: запасание ионов, электрохимические конденсаторы, натрий-ионные батареи</p>	<p>Ван Чжунлинь (h-индекс: 243)</p> <p>Технологический институт Джорджии, США</p> <p>Исследования: наногенераторы, аккумулялирование энергии</p>	<p>Танигучи Такаши (h-индекс: 137)</p> <p>Национальный институт материаловедения, Япония</p> <p>Исследования: сверхрешетки, графен, ван-дер-ваальсовы гетеро-структуры</p>
<p><b>TC.47 PLASMONS; METAMATERIALS</b></p> 	<p><b>TC.4 CATALYSIS; SYNTHESIS; CATALYSTS</b></p> 	<p><b>TC.7 CATALYSTS; ZEOLITES; HYDROGENATION</b></p> 
<p>Чен Сяюань (h-индекс: 167)</p> <p>Национальный университет Сингапура, Сингапур</p> <p>Исследования: фототермотерапия, фотоакустика, тераностическая наномедицина</p>	<p>Луц Аккерман (h-индекс: 116)</p> <p>Гёттингенский университет, Германия</p> <p>Исследования: алкенилирование, активация C-H-переходных металлов</p>	<p>Тао Чжан (h-индекс: 96)</p> <p>Даляньский институт химической физики Китайской академии наук, Китай</p> <p>Исследования: катализ, гетерогенный одноатомный катализ, олефины</p>
<p><b>TC.71 ORGANOMETALLICS</b></p> 	<p><b>TC.61 OLED; SOLAR CELLS</b></p> 	<p><b>TC.69 POLYPROPYLENES; LACTIC ACID; BLENDING</b></p> 
<p>Омар Фарха (h-индекс: 123)</p> <p>Северо-Западный университет, США</p> <p>Исследования: металлоорганические каркасы</p>	<p>Хо Жиенхуэй (h-индекс: 111)</p> <p>Институт химии Китайской академии наук, Китай</p> <p>Исследования: органические солнечные батареи; органическая фотогальваника; объемный гетеропереход</p>	<p>Заре Яссир (h-индекс: 50)</p> <p>Иранский академический центр образования, культуры и исследований, Иран</p> <p>Исследования: интерфейса, полимерные наноккомпозиты, порог перколяции</p>

<p><b>TC.128 BIOSENSORS; ELECTRODES</b></p> 	<p><b>TC.609 ADDITIVES; MANUFACTURE; PRINTING</b></p> 	<p><b>TC.191 ADSORPTION; ADSORBENTS</b></p> 
<p>Вэй Кин (h-индекс: 73)</p> <p>Цзинаньский университет, Китай</p> <p>Исследования: электрохемилюминесценция, люминол, иммуносенсоры, биозондирование на основе наноматериалов</p>	<p>Деброй Тарасанкар (h-индекс: 65)</p> <p>Пенсильванский университет, США</p> <p>Исследования: селективное лазерное плавление; аддитивное производство металлов</p>	<p>Ван Ксианке (h-индекс: 131)</p> <p>Северо-Китайский электроэнергетический университет, Китай</p> <p>Исследования: наноматериалы на основе гидроксида, металлоорганические каркасные материалы</p>
<p><b>TC.248 SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY</b></p> 	<p><b>TC.223 MEMBRANES; DESALINATION</b></p> 	<p><b>TC.82 PHARMACEUTICAL PREPARATIONS</b></p> 
<p>Рабиуль Ауал (h-индекс: 98)</p> <p>Университет Кертана, Австралия</p> <p>Исследования: адсорбенты; очистка сточных вод, изомеры адсорбции</p>	<p>Ахмад Исмаил Фауци (h-индекс: 91)</p> <p>Технологический университет Малайзии, Малайзия</p> <p>Исследования: ультрафильтрация, мембраны для очистки воды</p>	<p>Абдул Басит Фасех (h-индекс: 63)</p> <p>Университетский колледж Лондона, Великобритания</p> <p>Исследования: 3D-печать персонализированных таргетных препаратов</p>

**Рис. 11.**  
Самые цитируемые исследователи  
передовой химии в мире, 2021

 Применение ИИ в научной работе

Источник: ЦСР «Северо-Запад»  
по данным SciVal<sup>52</sup>

<sup>52</sup> Список сформирован из исследователей с наиболее высоким числом цитирований по каждому направлению исследований в области прорывных направлений химии за период 2016-2020 и индексом Хирша не менее 50.



# 5 ФРОНТИРНЫЕ ТЕМЫ ПЕРЕДОВОЙ ХИМИИ

Проведенный авторами доклада анализ показал, что на исследовательском фронтире химии находятся следующие тематики: процесс катализа, разработка новых аккумуляторов, системы доставки лекарств, материалы на основе графена и нанопестициды. Проведение НИОКР с использованием инструментария новой химии будет здесь актуально в ближайшие десятилетия.

Продукция химической промышленности максимально обеспечивает все сферы жизнедеятельности человечества. Вследствие глобальности и фундаментальности химии на нее оказывают влияние и формируют вызовы не только экономические и научные причины, но и политический запрос общества.

Десятилетие назад основными вызовами в сфере химической промышленности были состояние окружающей среды и природных ресурсов, рост населения Земли, глобализация, политическое регулирование и гражданский активизм (Парижское соглашение, квоты на выбросы CO<sub>2</sub>, ограничение использования дизельных автомобилей в Европе и т. д.), инновационные технологии и модели потребления (запрос на перерабатываемую и более долговечную продукцию, растущая популярность веганства и осознанного потребления).

Пандемия COVID-19 изменила приоритеты. Процессы в химии, как в промышленной, так и научной, теперь подчинены задачам сохранения и развития комфортной и безопасной жизни на Земле. Химической промышленности предстоит ответить на новые вызовы<sup>53</sup>:

- активный переход к устойчивому потреблению;
- замедление глобализации и даже деглобализация;
- структурные изменения в ключевых отраслях промышленности;
- временное приостановление реструктуризации бизнес-портфелей химических компаний;
- разрушение цепочек поставок и смена типа коммуникации;
- принудительное внедрение моделей удаленной работы.

«Зеленый переход» и экологическая повестка диктуют направления действий для ученых-химиков. Научно-теоретическая деятельность сейчас направлена в основном на разработку материалов для хранения энергии в целях поддержки более широкого внедрения возобновляемых источников энергии, производство водорода как вектора чистой энергии, прямое использование углекислого газа для внедрения техногенной циркуляции углерода и создание бесконечно перерабатываемых синтетических полимеров<sup>54</sup>.

Технологические приоритеты развития химии определяются цифровизацией, «зеленым переходом» и пандемией COVID-19. Для решения стоящих перед отраслью задач необходим качественный прорыв в технологиях.

Авторы доклада в целях определения фронтальных тем передовой химии, которые будут актуальны в ближайшие десятилетия, объединили данные:

- наукометрического анализа (SciVal, Scopus): самые цитируемые темы по сведениям за 2019–2021 годы;
- результатов форсайта (форсайт «Фронтиры в новых науках», 9–10 ноября 2021): прозвучавшие во время выступления участников темы в контексте перспективных для проведения исследований на периоды до 2030 и 2050 годов;
- анализа прочих источников (международных профильных организаций, консалтинговых агентств, сетей трансфера технологий): сведения о перспективных темах по данным 2019–2021 годов, табл. 2.

53 COVID-19 is challenging the way we think of chemical industry trends. This is how // World Economic Forum. URL: [weforum.org/agenda/2021/03/chemical-industry-trends-forecasting-resilience/](https://www.weforum.org/agenda/2021/03/chemical-industry-trends-forecasting-resilience/) (дата обращения: 11.02.2022).

54 Fantke P., Cinquemani C., Yaseneva P., De Mello J., Schwabe H., Ebeling B., Lapkin A. Transition to sustainable chemistry through digitalization // Chem. — 2021. — № 7 (11). — С. 2866–2882.

Направление	SciVal	Форсайт	Аналитика
Экология	Перовскиты Наноцеллюлоза Адсорбирующие вещества Лигнин Захват углерода	Быстроразлагаемые материалы Унифицированные материалы для вторичной переработки Инертные долговечные материалы Безвредные пластификаторы	Макромомомеры для переработки пластика Контроль качества воздуха и воды Биологическое и возобновляемое сырье Urban mining (сбор и переработка редких металлов из ТБО) Устойчивое производство аммиака Безметалловый синтез арильных соединений
Энергетика	Электрохимические конденсаторы Органическая фото-вольтаика Биоэлектричество Проточный аккумулятор	Накопители энергии на основе органических соединений водорода	Твердотельные аккумуляторы Двухионные аккумуляторы
Медицина	Тераностика Фотодинамическая терапия Наночастицы золота и серебра Умные системы доставки лекарств	Нанобиомедицина Чувствительность и селективность сенсоров Косметика на основе биокomпонентов	Металлические органические каркасы 3D-биопечать Микробиом и биологически активные соединения Быстрая диагностика для тестирования РНК-вакцины Хемилюминесценция для биологического применения Химический синтез РНК и ДНК Полусинтетическая форма жизни Целенаправленная деградация белка Прямое фторирование Метаболомика одной клетки

Направление	SciVal	Форсайт	Аналитика
Электроника	Гибкая электроника Сенсоры	Органическая электроника Биоэлектроника	Органическая электроника Наносенсоры
Сельское хозяйство	Нанопестициды	Агрохимикаты	Нанопестициды
Материалы	Двумерные материалы Нанокompозитные материалы Композиты из натуральных волокон Металлоорганические соединения Координационные полимеры Самовосстанавливающиеся материалы	Умные материалы Биоразлагаемые материалы Графен Покрытия, клеи, пигменты Конструкционные инженерные пластмассы Наноалмазы Углеродная нить Термопластичные композиты Углеродные материалы Биоактивные материалы Углеродные нанотрубки Полимерные материалы Фторорганические полимеры, соединения и материалы Биоматериалы для 3D-печати	Превращение пластмасс в мономеры Искусственное гуминовое вещество из биомассы Индукционное агрегацией излучение Сонохимические покрытия Суперсмачиваемость Нanomатериалы и функциональный текстиль «Легкие» материалы и новые средства изоляции Химические IoT-системы
Общее	Фотокатализ Электрокатализ Передовые окислительные технологии Реакции кросс-сочетания Нанокатализаторы 3D-печать	Нековалентный органока- тализ Химия природных соединений Химическое осаждение из газовой фазы Плазмохимическое селективное травление	Потоковая химия Реактивная экструзия Направленная эволюция селективных ферментов Обратимая дезактивация радикальной полимеризации Неорганическая химия высокого давления Технология стробирования жидкости

Табл. 2.  
Перспективные темы развития химии до 2030 / 2050

Источник: ЦСР «Северо-Запад» по данным открытых источников

На основании данных наукометрии, экспертных оценок форсайта и аналитики других материалов можно выделить темы, которые затронуты во всех источниках. Прежде всего это тема катализа. По этому направлению исследований существует обширное древо перспективных технологий, включающих фотокатализ (связанный, в частности, с поисками экологически чистой выработки электроэнергии), электрокатализ и нанокатализаторы. Другая важная тема — разработка новых поколений аккумуляторов, в т. ч. за счет создания альтернативных типов катодов и анодов и применения не использовавшихся ранее материалов. В медицинской сфере перспективным представляется исследование умных систем доставки лекарств. Большие ожидания научного сообщества связаны с двумерными материалами, например на основе графена. И, наконец, подчеркивается важность темы нанопестицидов для агротехнологической отрасли.

Выполнение НИОКР по этим тематикам может обеспечить прорывные результаты и высокий экономический эффект для новых технологических рынков. При этом инструментарий новой химии, в частности искусственный интеллект, будучи сквозной технологией, позволит повысить эффективность исследований.

# 6 РЫНОК ПЕРЕДОВОЙ ХИМИИ

Изменения в процессе проведения исследований вывели на рынок новых игроков. Стартапы новой химии привлекают наибольшие инвестиции, прежде всего внеотраслевые. Источником инноваций и стартапов могут стать химические лаборатории.

Рынок НИОКР в химии в ответ на качественные изменения в формате проведения исследований также переживает трансформацию и появление новых бизнес-моделей. Интеллектуализация процесса химических исследований вызвана созданием специального программного обеспечения, необходимого для выполнения НИОКР: анализа и моделирования процессов, проведения расчетов, визуализации, управления ресурсами, что, в свою очередь, выводит на рынок новый тип компаний (табл. 3).








ПО	Страна штаб-квартиры	Назначение
 Chemstations®	США	Моделирование химических процессов
 NEXTMOL	Испания	Проектирование новых материалов и молекул (атомарное моделирование и инструменты анализа данных)
 ChemADVISOR® Inc. <small>Regulatory Compliance Products &amp; Services</small>	США	Базы данных, обучающие программы и сервисы для работы с опасными материалами
 Alchemy	США	Гибкая разработка формул в специализированной химии
 SustAnalyze <small>Software   Data   Consulting</small>	Нидерланды	Инструменты разработки устойчивых химических процессов на основе данных
 chembid.com	Германия	Анализ рынка химических веществ
 ChemAlive™	Швейцария	Молекулярный дизайн, открытие лекарств, моделирование реакций, продвинутая аналитика и прогнозирование

Табл. 3.  
Программное обеспечение (SaaS)  
для химических НИОКР, 2022

Источник: ЦСР «Северо-Запад» по материалам открытых источников

Другим инструментом являются платформы — программно-аппаратные решения, совмещающие возможности проведения широкого спектра анализов в различных областях применения. Платформа объединяет новые возможности автоматизации (использование электрохимических датчиков), инструментов исследований, машинного обучения и аналитики данных, базы данных, а также ПО и приложения (рис. 12).

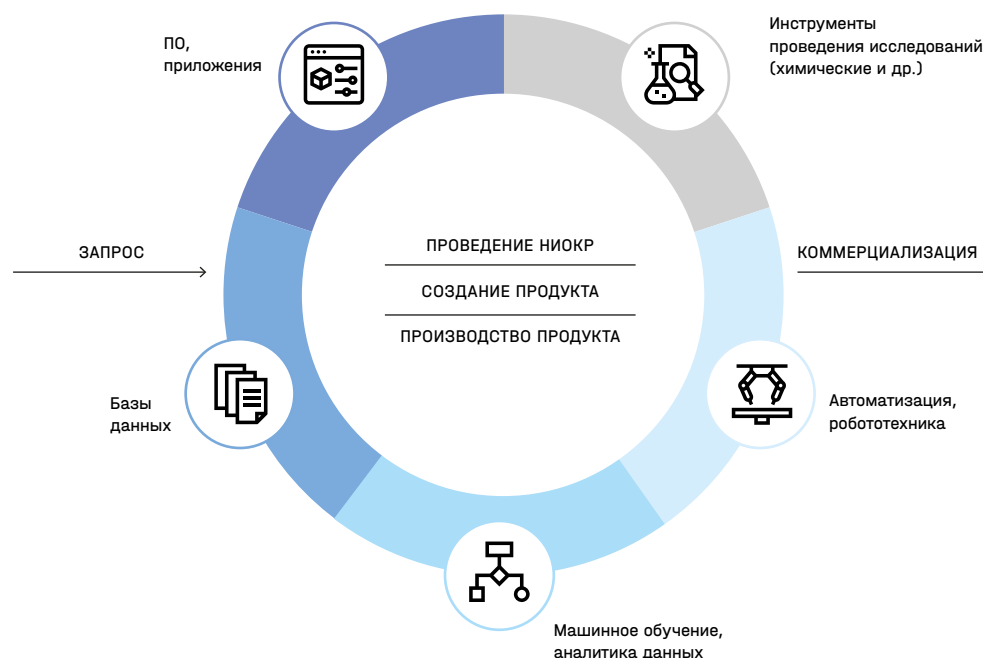


Рис. 12.  
Схема универсальной аппаратной платформы, применяемой в химии

Источник: ЦСР «Северо-Запад»

На рынок выходят компании, выполняющие исследования на базе таких платформ, как:

- платформа синтеза ДНК Twist Bioscience: производство синтетической ДНК на основе полупроводников с использованием высокопроизводительной кремниевой платформы, которая позволяет миниатюризировать химию, необходимую для синтеза ДНК. Результаты находят применение в медицине, сельском хозяйстве, промышленной химии<sup>55</sup>;
- платформа биопроизводства Zymergen: создание молекул с помощью геномики, машинного обучения и автоматизации<sup>56</sup>. Деятельность компании при помощи этой платформы включает три элемента:
  - разработку продукта. Из базы данных биомолекул выбирается молекула, подходящая для решения задачи клиента. Затем создаются микробы, которые могут ее производить, используя геномные библиотеки;
  - разработку микроба. С помощью алгоритмов машинного обучения создаются и тестируются миллиарды конструкций, ферментируются молекулы;
  - масштабное производство;
- электрохимическая тест-платформа ИТМО — предназначена для анализа и тестирования заданных химических свойств объекта. На базе универсальной электрохимической тест-платформы можно создавать устройства, определяющие содержание в организме разных частиц — ионов металлов, вирусов и антител к вирусам, фрагментов ДНК или РНК, следов антибиотиков и т. д.<sup>57</sup>

<sup>55</sup> Technology // Twist Bioscience. URL: <http://twistbioscience.com/technology> (дата обращения: 11.02.2022).

<sup>56</sup> What We Do // Zymergen. URL: [zymergen.com/what-we-do/](http://zymergen.com/what-we-do/) (дата обращения: 11.02.2022).

<sup>57</sup> Доклад Е. В. Скорб в рамках форсайт-сессии «Фронтиры в новых науках», 9–10 декабря 2021.

При этом химическая отрасль представляет собой сильно фрагментированный рынок, поскольку сферы применения (фармацевтика, пищевое производство, сельское хозяйство, электронные устройства и пр.) имеют специфические требования и правила, в результате чего бизнес-процессы часто становятся сложными и запутанными. Компании взаимодействуют друг с другом, ищут партнеров, чтобы снизить издержки на проведение R&D и разделить риски. На рынке возникают платформы онлайн-продаж отдельных компаний либо B2B-маркетплейсы, где встречаются поставщики и покупатели химической продукции (рис. 13).



Рис. 13. Платформы продаж химической продукции

Источник: ЦСР «Северо-Запад» по материалам открытых источников

Последние пять лет наблюдается рост интереса к химическим стартапам: инвестиции в них значительно выросли, особенно внеотраслевые (рис. 14).

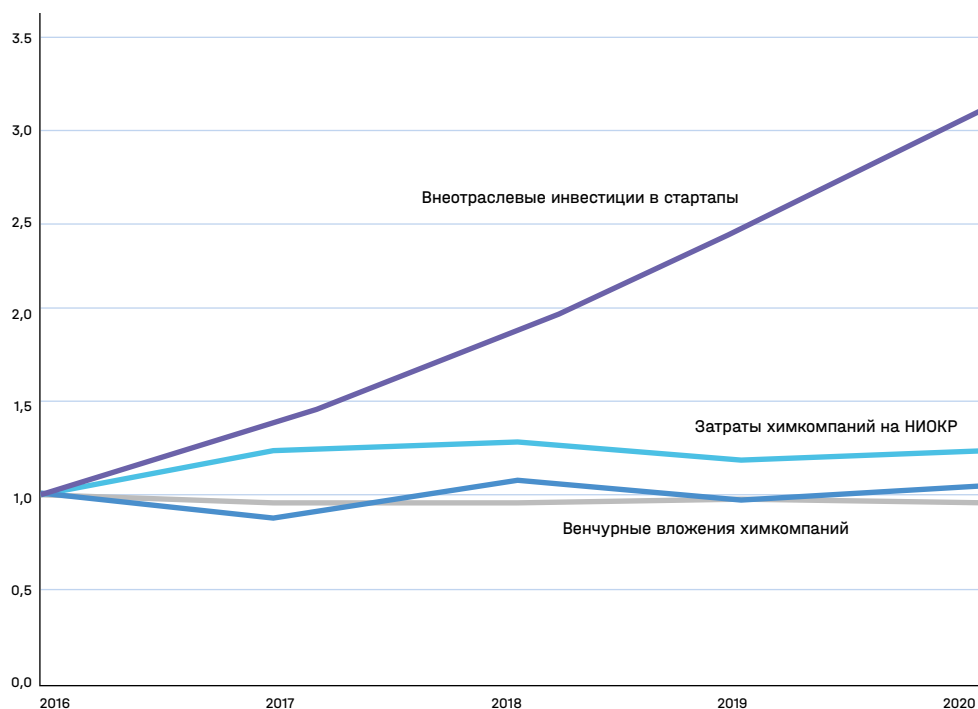
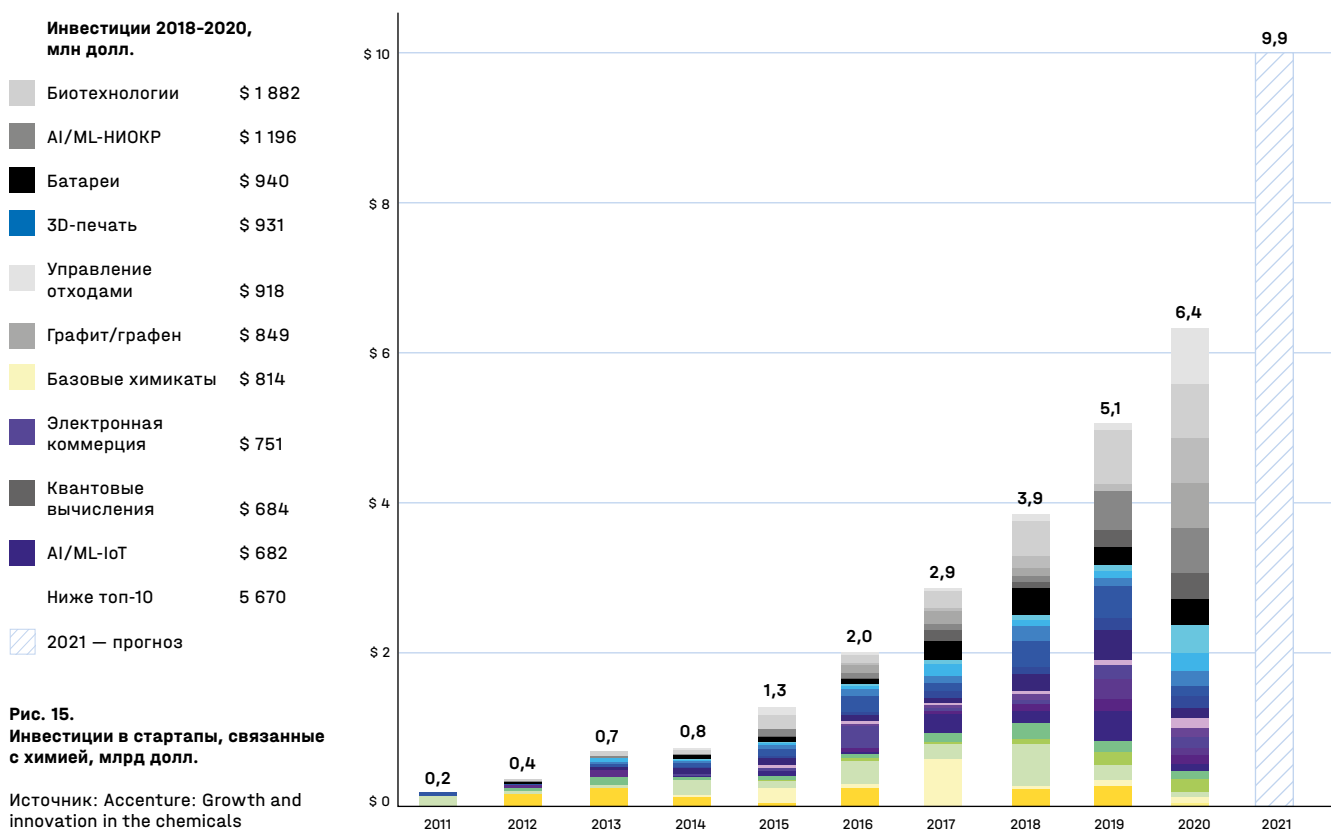


Рис. 14. Темп роста инвестиций в химические компании, приведенный к 2016

Источник: Accenture: Growth and innovation in the chemicals



Венчурное финансирование химии последних лет сфокусировано на решении задач, связанных с актуальными большими вызовами и развитием новых рынков: устойчивостью, разработкой новых лекарственных средств, пищевых продуктов, материалов и энергетики (примеры глобальных стартапов, привлекающие капитал ведущих инвесторов, приведены в Приложении 1). Наблюдается кратное увеличение инвестиций, связанных с химией, определенной авторами доклада как новая (рис. 15).



Почти 20 % инвестиций было направлено на цифровые решения, такие как искусственный интеллект или машинное обучение для открытия молекул, квантовые вычисления для моделирования или работа в области электронной коммерции и взаимодействия между предприятиями. На стартапы, изучающие материалы, которые способствуют сокращению выбросов CO<sub>2</sub> и развитию экономики замкнутого цикла, приходится 10 % инвестиций. В 2021 году суммарный объем инвестиций в химические стартапы прогнозировался в пределах 10 млрд долларов, что означает рост объема инвестиций на 54 % относительно 2020 года<sup>58</sup>.

В России тренд на стремительный рост инвестиций в новые направления химии пока не подтверждается. В отечественной науке сложилась специализация в области базовых химикатов, включая продукты нефтехимии, а сегменты, привлекающие наибольший объем инвестиций в мире, относятся к категории специальной химии, биотехнологий и цифровых химических инструментов. Класс российских стартапов в области новых химических технологий еще формируется, однако примеры всё же есть:

- ООО «Прометей РД» (батареи) — высокоэффективные платиносодержащие катализаторы для низкотемпературных топливных элементов и электролизеров;
- ООО «Хитлаб» (батареи) — источник энергии на топливных элементах с химическим генератором водорода;
- ООО «Здравпринт» (3D-печать) — печать ортезов для конечностей;
- Chemexsol (электронная коммерция) — платформа поиска контрагентов в нефтегазовой сфере при закупке химических веществ.

<sup>58</sup> Growth and innovation in the chemical industry // Accenture. URL: [accenture.com/us-en/insights/chemicals/chemical-growth-and-innovation](https://www.accenture.com/us-en/insights/chemicals/chemical-growth-and-innovation) (дата обращения: 11.02.2022).

Возникло много стартапов российского происхождения, но они успешно развиваются на зарубежных рынках:

- Insilico Medicine (биотехнологии + искусственный интеллект / машинное обучение в НИОКР) — разработка лекарств с помощью технологий искусственного интеллекта;
- OCSiAl (графит / графен) — производство графеновых (одностенных) нанотрубок;
- Renca (3D-печать) — геополимерные чернила для строительных 3D-принтеров.

Инвестиции в стартапы передовой химии, как и их капитализация, в ближайшее время будут расти. Один из ключевых источников появления технологических стартапов в мире — исследовательские лаборатории. Финансирование и переход к новым моделям лабораторий может стать фактором появления прорывных технологий, обладающих высоким коммерческим потенциалом и являющихся базой роста новых наукоемких компаний.

# 7 НОВЫЕ РЫНКИ НА БАЗЕ ХИМИЧЕСКИХ ИННОВАЦИЙ

**Синтез общемировых глобальных трендов с передовыми решениями в области химических НИОКР привел к рождению новых секторов по всему периметру экономики. Сильная химическая база в сочетании с наилучшими практиками применения таких технологий, как искусственный интеллект и машинное обучение, могут обеспечить прорыв в данных секторах.**

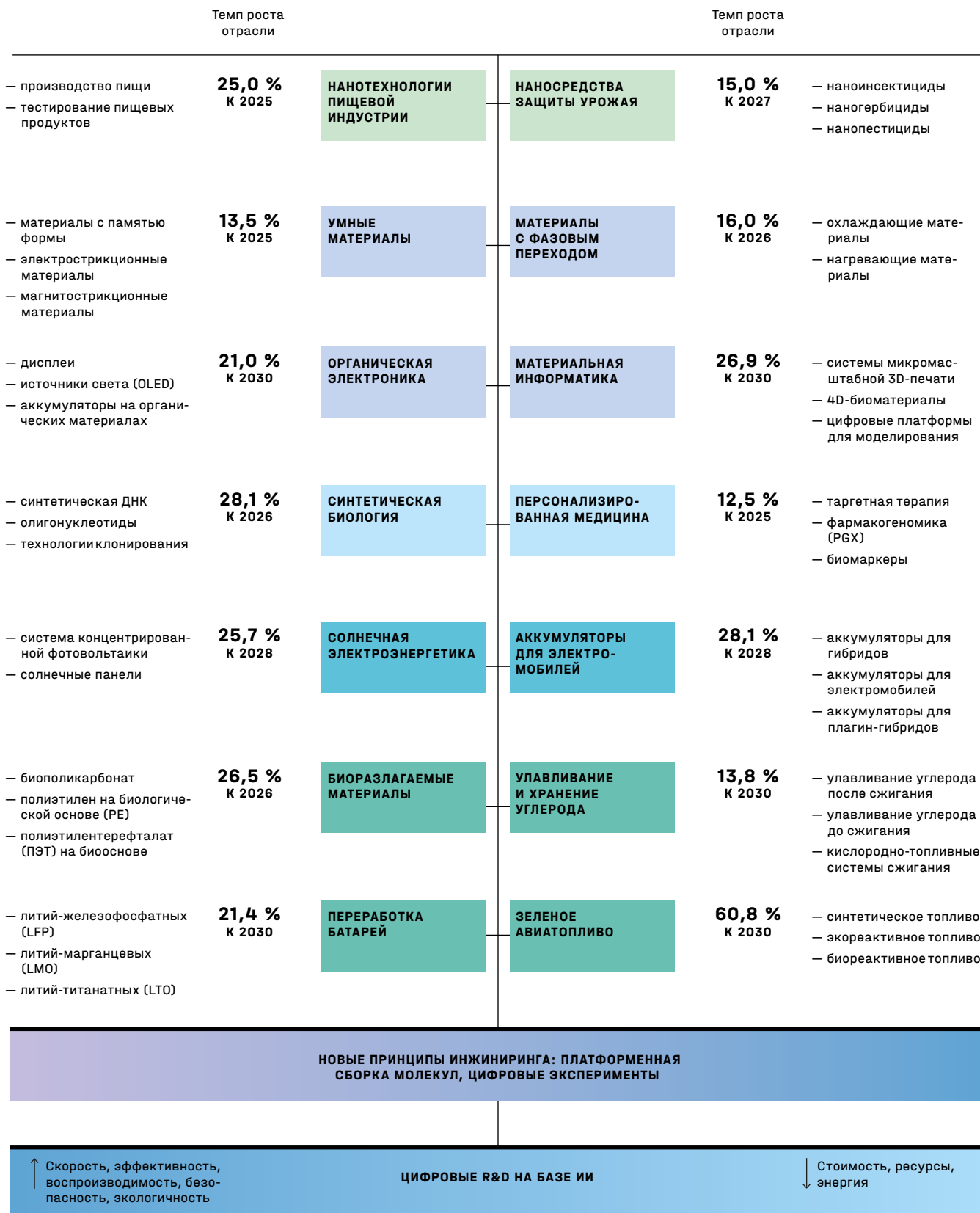
Новые подходы при проведении НИОКР в химии становятся драйвером развития новых рынков. Рассматриваемые примеры рынков, формирующихся в настоящее время, возможно отнести к таким секторам, как энергетика, сельское хозяйство и пищевая промышленность, экология, материалы, биотехнологии и медицина и др. (рис. 16). Они пересекаются между собой и оказывают друг на друга значительное влияние. Во многом их объединяет подход в проведении НИОКР, который отличается высокой степенью интеграции цифровых технологий. Хотя в некоторых случаях факторы, приводящие к стремительному росту рынка, связаны с развитием цифровых технологий и ИИ не в первую очередь, но реализация позитивных для рынков сценариев обеспечивается именно передовыми цифровыми решениями. Например, в авиатранспортном секторе ключевую роль для роста рынка биотоплива сыграла «Схема компенсации и сокращения выбросов углерода для международной авиации» Международной организации гражданской авиации ООН<sup>59</sup>. Однако достижение поставленной цели зависит от интеграции в химические НИОКР цифровых подходов и в т. ч. ИИ<sup>60</sup>.

Одни из самых динамично развивающихся рынков передовой химии — сегменты аккумуляторов и их переработки, а также смежная область солнечной электроэнергетики. Потребность данных рынков в новых материалах, которые можно разрабатывать с применением искусственного интеллекта, вместе с трендом на устойчивое развитие открывают перспективы для направления сюда ресурсов НИОКР. Рынки синтетической биологии, персонализированной медицины тоже сейчас на подъеме и получают дополнительный стимул к росту в связи с применением ИИ. Большинство растущих рынков новой химии (органическая электроника, умные материалы, нанопестициды) опираются на науку о материалах, которая, в свою очередь, является ключевым бенефициаром развития прогностических способностей ИИ, возможностей по проведению виртуальных экспериментов и умному анализу баз данных (описание рынков и их связь с инструментарием новой химии приведены в Приложении 2).

В целом рассматриваемые рынки обладают высокими темпами роста по сравнению с традиционными и давно сложившимися и станут доминировать в будущем за счет цифровых решений, внедряемых на этапе химических НИОКР, которые имеют принципиальное значение в этих областях. Передовая химия может служить проводником перехода России к перспективным рынкам. Их отличают высокие показатели роста и серьезная опора на НИОКР. Растущие рынки во многом связаны с науками о материалах, а исследования российских ученых в этой области занимают значительную долю в страновой структуре НИОКР при сравнении с профилями исследований других стран. Россия может реализовать свой высокий научный потенциал, дополнив инструментальный исследований передовым опытом использования цифровых подходов, что обеспечит выход в новые быстрорастущие технологические рынки.

59 CORSIA Implementation Elements // ICAO. URL: [icao.int/environmental-protection/CORSIA/Pages/implementation-elements.aspx](https://icao.int/environmental-protection/CORSIA/Pages/implementation-elements.aspx) (дата обращения: 11.02.2022).

60 Barradas A. O., Amorim I. M. Applications of Artificial Neural Networks in Biofuels // Advanced Applications for Artificial Neural Networks. — Риека: IntechOpen, 2018.



**Рис. 16.** Быстрорастущие рынки передовой химии, 2021

- Сельское хозяйство и пищевая промышленность
- Биотехнологии и медицина
- Энергетика
- Материалы
- Экология

Источник: ЦСР «Северо-Запад» по данным открытых источников

# 8 РАЗВИТИЕ СОТРУДНИЧЕСТВА И ПОДДЕРЖКИ

Мировой опыт свидетельствует об успешной кооперации участников химической отрасли для решения задач современности. Государство может помочь создать условия для развития передовой химии.

Современные вызовы сложны, их невозможно преодолеть в одиночку. Для этого компании химической отрасли все больше взаимодействуют с университетами, исследовательскими организациями, потребителями и нередко со своими конкурентами, создавая коллаборации.

Университеты располагают лабораторными комплексами, позволяющими проводить современные исследования. Поэтому компании, как правило, стоят перед выбором: создавать собственные лаборатории или осуществлять аутсорсинг НИОКР в университетах. В отдельных случаях возможны комбинации этих вариантов, включая гибкие исследовательские экосистемы.

## Кейс 3. Примеры сотрудничества университетов и глобальных компаний в области химических исследований

### Университет Аалто (Финляндия)

Сотрудничество с **Nokia** по разработкам и запуску докторской программы в области квантовых технологий. Финансирование — 150 тыс. евро<sup>61</sup>.

Сотрудничество с **Bayer** с целью разработки ИИ для повышения безопасности и эффективности клинических исследований лекарственных средств<sup>62</sup>.

Сотрудничество с **Neste**. Совместные исследовательские программы и финансирование со стороны химического концерна<sup>63</sup>.

### BASF

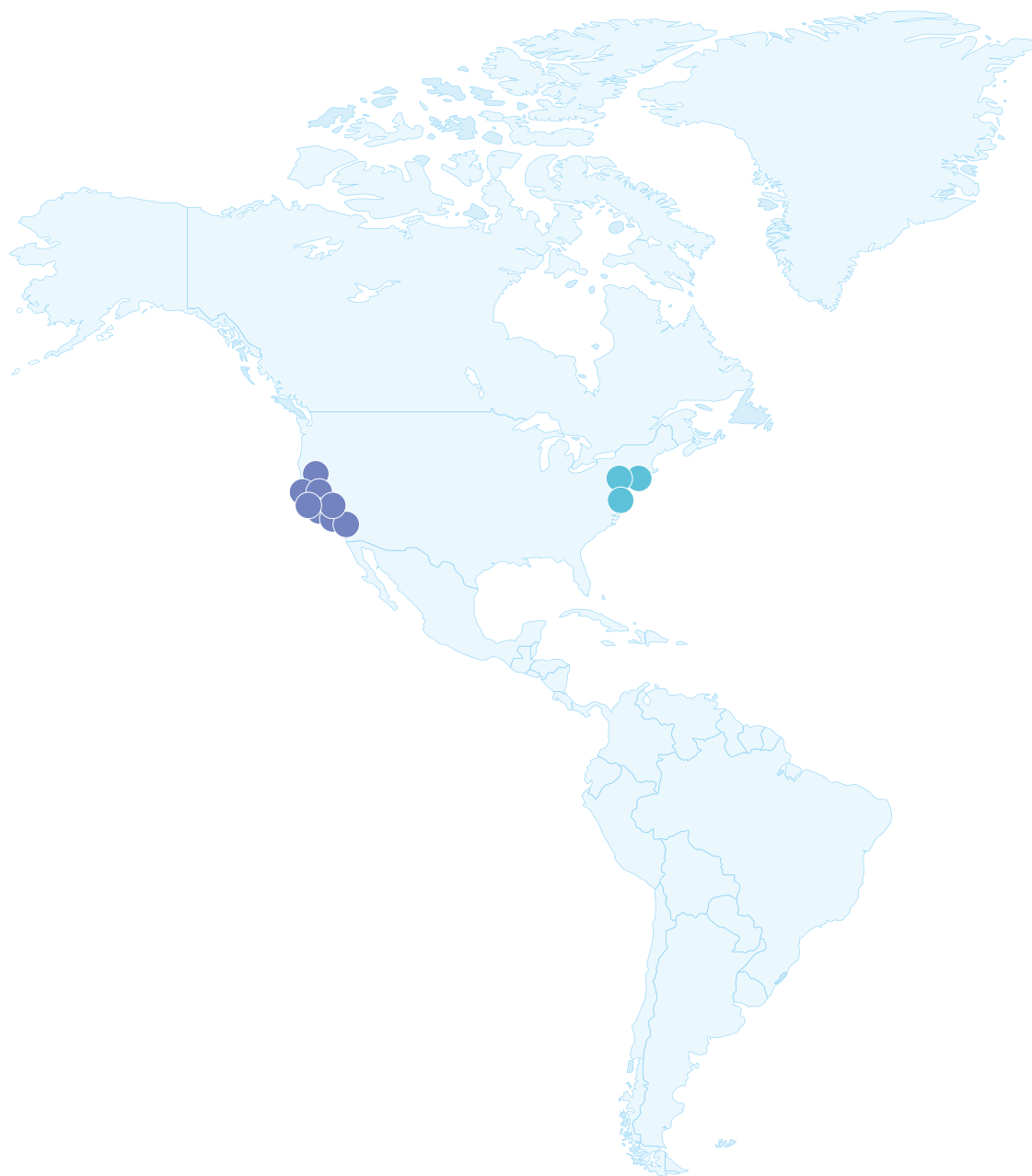
Глобальная исследовательская сеть компании на базе университетов мира<sup>64</sup>. На карте приведена широкая сеть университетских лабораторий компании.

<sup>61</sup> Nokia donates seed funding to Aalto University for launching an industrial PhD program on quantum technology // Aalto University. URL: [aalto.fi/en/news/nokia-donates-seed-funding-to-aalto-university-for-launching-an-industrial-phd-program-on](https://aalto.fi/en/news/nokia-donates-seed-funding-to-aalto-university-for-launching-an-industrial-phd-program-on) (дата обращения: 11.02.2022).

<sup>62</sup> Bayer, Aalto and HUS expand collaboration — artificial intelligence to support clinical drug trials // Aalto University. URL: [aalto.fi/en/news/bayer-aalto-and-hus-expand-collaboration-artificial-intelligence-to-support-clinical-drug](https://aalto.fi/en/news/bayer-aalto-and-hus-expand-collaboration-artificial-intelligence-to-support-clinical-drug) (дата обращения: 11.02.2022).

<sup>63</sup> Neste donates 750 000 euros to Aalto University // Aalto University. URL: [aalto.fi/en/news/neste-donates-750-000-euros-to-aalto-university](https://aalto.fi/en/news/neste-donates-750-000-euros-to-aalto-university) (дата обращения: 11.02.2022).

<sup>64</sup> Innovation // BASF. URL: [report.basf.com/2020/en/managements-report/our-strategy/innovation.html](https://report.basf.com/2020/en/managements-report/our-strategy/innovation.html) (дата обращения: 11.02.2022).



**CARA**  
Калифорнийский исследовательский альянс, США

Калифорнийский университет в Дейвисе

Калифорнийский университет в Беркли

Стэнфордский университет

Калифорнийский университет в Санта-Барбаре

Калифорнийский технологический институт

Калифорнийский университет в Лос-Анджелесе

Университет Южной Калифорнии

Калифорнийский университет в Ирвайне

Калифорнийский университет в Риверсайде

Калифорнийский университет в Сан-Диего



**NORA**  
Северо-Западный исследовательский альянс, США

Гарвардский университет

Массачусетский технологический институт

Массачусетский университет

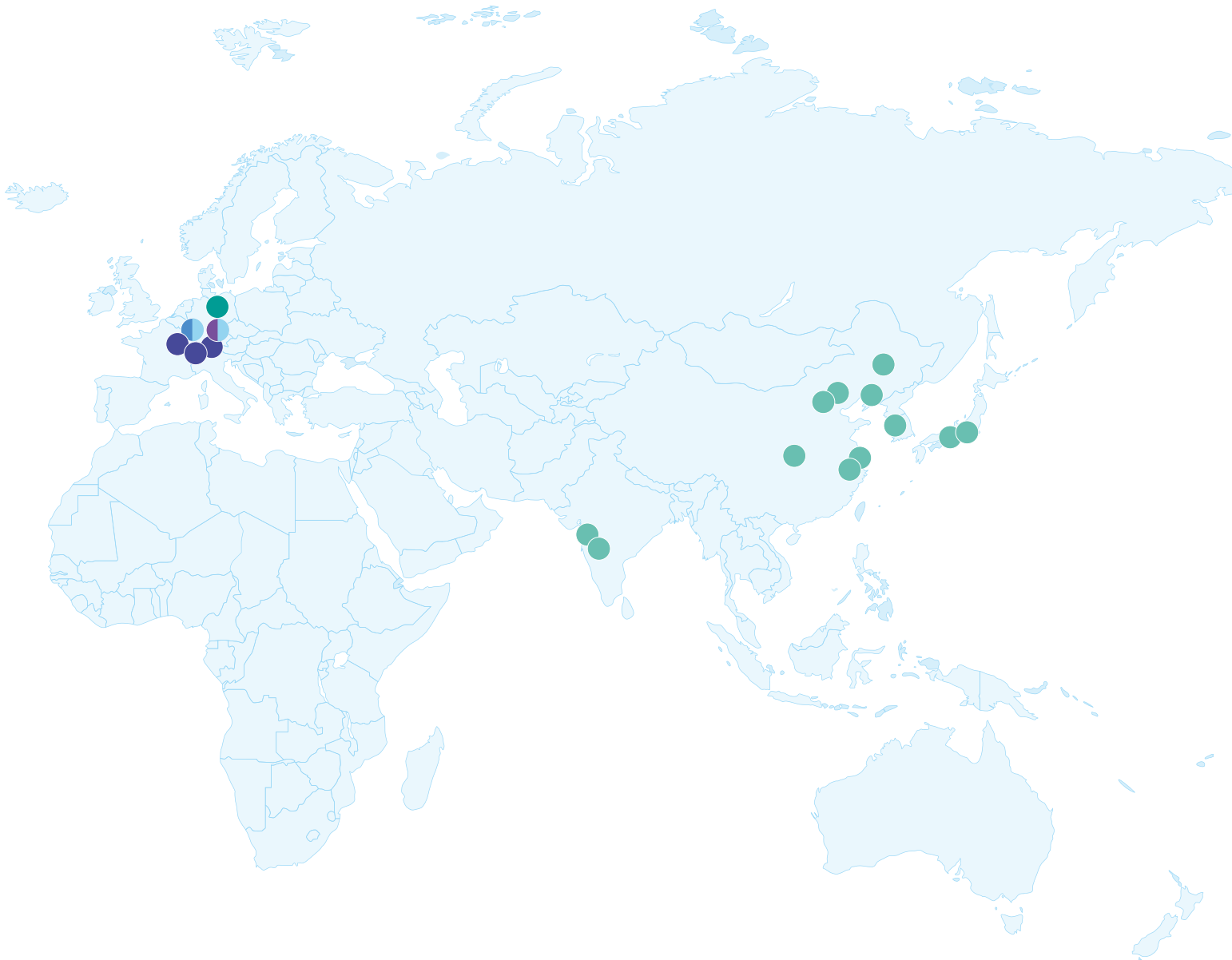


**JONAS**  
Совместная исследовательская сеть в области передовых материалов и систем

Страсбургский университет, Франция

Фрайбургский университет, Германия

Швейцарская высшая техническая школа Цюриха, Швейцария

**BasCat**

Совместная лаборатория  
UniCat BASF, Германия

Берлинский технический  
университет

**iL**

Лаборатория инноваций,  
Германия

Технологический институт  
Карлсруэ

Гейдельбергский университет

**NAO**

Сеть лабораторий, ведущих открытые  
исследования в Азии

Чанчуньский институт при-  
кладной химии, Китай

Университет Цинхуа, Китай

Пекинский технологический  
институт, Китай

Сычуаньский университет,  
Китай

Чжэцзянский университет,  
Китай

Фуданьский университет,  
Китай

Токийский технологический  
институт, Япония

Киотский университет, Япония

Сеульский университет, Южная  
Корея

Национальная химическая  
лаборатория, Индия

Индийский технологический  
институт Бомбея, Индия

**CaRLa**

Лаборатория исследова-  
ний катализа, Германия

Гейдельбергский университет

**BELLA**

Лаборатория аккумуля-  
торов и электрохимии,  
Германия

Технологический институт  
Карлсруэ



**Кейс 3. Примеры сотрудничества университетов и глобальных компаний в области химических исследований****Exxon Mobil**<sup>65</sup>**MIT**

Сотрудничество в области повышения эффективности традиционной энергетики и разработки технологий новых источников энергии.

**Принстонский университет**

Совместные исследования в области устойчивой энергетики и экологических решений.

**Техасский университет в Остине**

Разработка устойчивых энергетических технологий.

**Технологический институт Джорджии**

Коллаборация существует более 15 лет. Разработано множество инновационных технологий, в т. ч. новая мембрана молекулярного сита на основе углерода.

**Стэнфордский университет**

Финансирование и организация широкого спектра исследовательских программ по таким темам, как крупномасштабное накопление углерода, накопление электроэнергии с помощью проточных батарей, эффективное производство водорода, информатика / машинное обучение, основы сжигания природного газа с высокой эффективностью / низкой углеродной интенсивностью, исследования жизненного цикла полимерных композитов для новых строительных материалов и новая программа по изучению пределов стабильности и эффективности солнечных материалов на основе перовскита.

**Сингапурский энергетический центр**

Разработка технологий, повышающих эффективность производства топлива и химических веществ и расширяющих возможности использования низкоуглеродистого водорода и устойчивых полимеров.

Всего Exxon Mobil сотрудничает в мире более чем с 80 университетами.

<sup>65</sup> Collaborating with leading universities to meet global energy demand // ExxonMobil. URL: [corporate.exxonmobil.com/Climate-solutions/University-and-National-Labs-partnerships/Collaborating-with-leading-universities-to-meet-global-energy-demand#MassachusettsInstituteofTechnology](https://corporate.exxonmobil.com/Climate-solutions/University-and-National-Labs-partnerships/Collaborating-with-leading-universities-to-meet-global-energy-demand#MassachusettsInstituteofTechnology) (дата обращения: 11.02.2022).

Другим источником инноваций в химии, как указывалось выше, являются междисциплинарные консорциумы, вовлекающие представителей науки, ИТ и индустрии. Бизнес может генерировать большой объем цифровых данных, а представители науки — их анализировать, поэтому благодаря консорциумам преодолеваются барьеры отсутствия данных или их низкого качества.

<p>Кейс 4. Примеры консорциумов передовой химии</p>	<p><b>66</b> Chemistry Consortium in the NFDI // NFDI4Chem. URL: <a href="https://nfdi4chem.de/">nfdi4chem.de/</a> (дата обращения: 11.02.2022).</p> <p><b>67</b> Welcome to the Open Reaction Database! // Open Reaction Database. URL: <a href="https://docs.open-reaction-database.org/en/latest/">docs.open-reaction-database.org/en/latest/</a> (дата обращения: 11.02.2022).</p> <p>Источники: официальный сайт NFDI4Chem, Open Reaction Database</p>
<p><b>NFDI4Chem</b><sup>66</sup></p> <p>Консорциум по созданию открытой инфраструктуры для управления данными НИОКР в области химии посредством применения цифровизации на всех ключевых этапах исследований. NFDI4Chem фокусируется на данных о молекулах, экспериментальных и теоретических реакциях. В состав консорциума входят Йенский университет им. Фридриха Шиллера, Немецкое химическое общество (GDCh), Немецкое общество физической химии Бунзена (DBG) и Немецкое фармацевтическое общество (DPhG), представляющие около 40 тыс. членов и активных партнеров — компаний, разрабатывающих инструменты создания данных, системы управления данными и решения для анализа данных (GNWI, BASF, ETH, Novartis (Швейцария), Sanofi (Франция) и др.)</p>	
<p><b>Open Reaction Database</b><sup>67</sup></p> <p>Сообщество по созданию открытой базы данных химических реакций для поддержки машинного обучения, развития прогнозирования реакций, планирования химического синтеза и проектирования экспериментов. В состав управляющего и консультативного комитетов входят представители MIT, C-CAS, Merck, Pfizer, SynTech, Google, AstraZeneca, Caltech и др.</p>	

Чтобы стимулировать появление стартапов, в ряде стран на государственном уровне осуществляется поддержка инициатив в области передовой химии, создаются специальные экосистемы для выращивания нового технологического бизнеса.

<p>Кейс 5. Примеры стимулирования развития передовой химии</p>	<p><b>68</b> Universal Materials Incubator // UMI. URL: <a href="https://umi.co.jp/en/">umi.co.jp/en/</a> (дата обращения: 14.02.2022).</p>
<p>Фонд развития новых технологий химикатов и материалов UMI создан для укрепления технологического потенциала Японии<sup>68</sup>. Ключевые направления инвестирования — технологии новой химии для таргетного лечения, устойчивые материалы. Одним из проинвестированных проектов стала программная платформа Citrine, включающая ИИ и инфраструктуру интеллектуального управления данными для разработки и внедрения более эффективных и экологически безопасных материалов, химикатов и промышленных товаров и позволяющая:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>— использовать готовые наборы данных (исключить проведение дополнительных экспериментов);</li> <li>— прогнозировать характеристики материалов на основе данных обработки, состава и синтеза;</li> <li>— определить эксперименты, которые необходимо провести.</li> </ul>	

## 5-HT Digital Hub Chemistry & Health

В Германии развернута инициатива (один из 12 цифровых хабов), через сформированную экосистему поддерживающая компании химической и медицинской промышленности в реализации цифровых инноваций<sup>69</sup>. Цифровая платформа объединяет отраслевые гиганты, университеты и перспективные стартапы. Кроме цифровой экосистемы, 5-HT Digital Hub Chemistry & Health предлагает принять участие в специальных программах:

- 5-HT X-Linker — презентации стартапов цифровой химии и цифровой медицины потенциальным инвесторам;
- 5-HT Digital Qualifier — постановка реальных рыночных задач перед студентами университетов от стартапов и крупных компаний;
- 5-HT Softlanding — поддержка иностранных стартапов для выхода на немецкий рынок (сопровождение гида, бесплатный офис на четыре недели);
- Chem-Match — мероприятие по установлению деловых контактов между стартапами и химической промышленностью;
- онлайн-семинары и др.

<sup>69</sup> 5-HT Digital Hub Chemistry & Health // 5-HT. URL: <https://www.5-ht.com/en> (дата обращения: 14.02.2022).

Источники: официальный сайт Universal Materials Incubator, 5-HT Digital Hub Chemistry & Health

В России отсутствует системная специализированная поддержка проведения НИОКР в области цифровых технологий в химии. Исследования передовой химии могут финансироваться действующими научными фондами и институтами развития (Российским научным фондом, Фондом содействия инновациям, Фондом «Сколково» и др.) лишь в рамках стандартных программ поддержки.

Позитивно можно оценить запуск в конце 2021 года совместного проекта Фонда «Сколково» и акселератора Mendeleev при поддержке Минпромторга России и экспертной поддержке РХТУ — конкурса «Химия инноваций», где в качестве проектных тематик обозначены направления новой химии: цифровое моделирование, аддитивные технологии, биоинформатика и др.

Еще одним перспективным институтом поддержки способен стать ИНТЦ «Долина Менделеева» на базе РХТУ — проект по созданию инфраструктурной экосистемы выращивания новых технологических компаний с предоставлением налоговых и неналоговых льгот.

Учитывая мировые тренды роста объемов инвестиций в технологии и стартапы передовой химии, а также критическую значимость этих технологий для обеспечения развития химической промышленности в целом, особенно в тех наукоемких секторах, где Россия не является лидером, целесообразно на государственном уровне обеспечить условия для создания и развития рынка передовой химии. В научных фондах и институтах развития имеет смысл начать специальные программы поддержки проведения НИОКР в области новой химии. На базе ИНТЦ «Долина Менделеева» может быть развернута цифровая платформа, аналогичная хабу 5-HT, с запуском программ поддержки технологических стартапов и быстрорастущих компаний передовой химии. Формирующиеся на платформе партнерства помогут преодолеть общие вызовы химических компаний и обеспечить вклад в российскую науку.

# Заключение

Развитие отраслевой промышленности, и в первую очередь наукоёмких секторов, зависит от технологической базы, сформированной в результате проведения НИОКР. Цифровые технологии, оказавшие серьезное влияние на сектор исследований и разработок, привели к появлению новой химии — науки о синтезе новых веществ и разработке новых материалов с применением новых цифровых и устойчивых междисциплинарных инструментов, где драйвером становятся технологии искусственного интеллекта.

Лаборатории с искусственным интеллектом AI-driven Lab — главный источник инноваций в химии в будущем — выполняют исследования быстрее, эффективнее и дешевле, чем традиционные. Создание и развитие новых лабораторий по модели, близкой к AI-driven Lab, обеспечит важнейшие конкурентные преимущества вузам, научно-исследовательским организациям и бизнес-компаниям.

Для решения сложных научных задач и формирования необходимых для развития науки данных должны быть созданы специальные консорциумы, объединяющие всех стейкхолдеров, — вузы, научные организации, коммерческие компании разного уровня развития и форм собственности. Такие партнерства нуждаются в поддержке государства, чтобы формировать общую экосистему передовой химии, способную порождать новые технологии и бизнесы.

С учетом того, что результаты развития химии отражаются на всех отраслях науки и техники, формирование сектора передовой химии призвано обеспечить значимый экономический и социальный эффект. Во-первых, передовая химия способна преодолеть разрыв между исследованиями и разработками и химической промышленностью российских компаний. Во-вторых, появятся новые бизнес-модели химических НИОКР. В-третьих, может быть обеспечен переход к совершенно новым рынкам перспективной специализации России в целом и ее субъектов в частности.

# Библиография

## На русском языке

1. Акт правительства Российской Федерации «О мерах по привлечению ведущих ученых в российские образовательные организации высшего образования, научные учреждения и государственные научные центры Российской Федерации» от 09.04.2010 № 220 // Гарант. — 2010 (с изм. и дополн. в ред. от 04.05.2021).
2. Артем Оганов о России, науке, Боге и искусственном интеллекте // Сколково. URL: old.sk.ru/news/b/press/archive/2020/09/29/artem-oganol-rossii-nauke-boge-i-iskusstvennom-intellekte.aspx (дата обращения: 11.02.2022).
3. В Сколтехе открылась лаборатория компьютерного дизайна новых материалов // Сколково. URL: old.sk.ru/news/b/press/archive/2019/09/09/v-skoltehe-otkrylas-laboratoriya-kompyuternogo-dizayna-novuyh-materialov.aspx (дата обращения: 11.02.2022).
4. Воздух несвободы. Что заставляет российских ученых уезжать за границу? // Русская служба Би-би-си. URL: bbc.com/russian/features-57028917 (дата обращения: 11.02.2022).
5. Константин Новоселов создает лабораторию «умных» материалов в МФТИ // Коммерсантъ. URL: kommersant.ru/doc/4683651 (дата обращения: 11.02.2022).
6. Международный научный центр SCAMT // Университет ИТМО. URL: scamt.ifmo.ru/ru/ (дата обращения: 11.02.2022).
7. Новый патент Сколтехе: анод из нанотрубок повысит эффективность калий-ионных аккумуляторов // Skoltech. URL: skoltech.ru/2021/03/novyy-patent-skolteha-anod-iz-nanotrubok-povysit-effektivnost-kalij-ionnyh-akkumulyatorov/ (дата обращения: 11.02.2021).
8. Определено строение материала нового типа // Научная Россия. URL: scientificrussia.ru/articles/opredeleno-stroenie-novoj-struktury (дата обращения: 11.02.2022).
9. «Пролить свет» под правильным углом // Коммерсантъ. URL: kommersant.ru/doc/4540238 (дата обращения: 11.02.2022).
10. Работа, поиск персонала и публикация вакансий // HeadHunter. URL: hh.ru/ (дата обращения: 11.02.2022).
11. СИБУР диджитал // СИБУР. URL: sibur.digital/ (дата обращения: 11.02.2022).
12. Ученые создали универсальное вещество-основу для сенсоров широкого профиля // РИА Новости. URL: ria.ru/20211018/sfu-1754972217.html (дата обращения: 11.02.2022).
13. Ученые Университета ИТМО разработали способ создания элементов плазмоники // РНФ. URL: rscf.ru/news/presidential-program/sposob-sozdaniya-elementov-plazmoniki/ (дата обращения: 11.02.2022).

14. Физики из Красноярска вошли в топ лучших научных рецензентов мира // Наш Красноярский край. URL: gnkk.ru/news/fiziki-iz-krasnoyarska-voshli-v-top-luchsh/?utm\_source=yxnews&utm\_medium=desktop&utm\_referrer=https%3A%2F%2Fyandex.ru%2Fnews%2Fsearch%3Ftext%3D (дата обращения: 11.02.2022).
15. Это прорыв: десять самых важных технологий 2021 года // РБК. URL: trends.rbc.ru/trends/innovation/606ecf189a79470e64285ce2 (дата обращения: 11.02.2022).

## На английском языке

### Научные статьи

16. Artemii S. Ivanov, Konstantin G. Nikolaev, Alexander S. Novikov, Stanislav O. Yurchenko, Kostya S. Novoselov, Daria V. Andreeva, and Ekaterina V. Skorb. The Journal of Physical Chemistry Letters 2021 12 (7). 2017-2022. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.1c00007
17. Artemii S. Ivanov, Konstantin G. Nikolaev, Anna A. Stekolshchikova, Weini T. Tesfatsion, Stanislav O. Yurchenko, Kostya S. Novoselov, Daria V. Andreeva, Maya Yu. Rubtsova, Mikhail F. Vorovitch, Aydar A. Ishmukhametov, Alex M. Egorov, and Ekaterina V. Skorb ACS Applied Bio Materials 2020 3 (11), DOI: 10.1021/acsbam.0c00954.
18. Barradas A. O., Amorim I. M. Applications of Artificial Neural Networks in Biofuels // Advanced Applications for Artificial Neural Networks. — Риека: IntechOpen, 2018.
19. Burger B., Maffettone P. M., Gusev V. V. et al. A mobile robotic chemist // Nature. — 2020. — № 583.
20. Churchman C. West Wicked Problems // Management Science. — 1967. — №14 (4). — С. 141-142.
21. Duncan Timothy V. Applications of nanotechnology in food packaging and food safety: Barrier materials, antimicrobials and sensors // Journal of Colloid and Interface Science. — 2011. — № 363 (1).
22. Egorova K., Galushko A., Dzhemileva L., D'yakonov, V., Ananikov V. Building bio-Profiles for common catalytic reactions // Green Chem. — 2021. — № 23.
23. Esfahani M., Sadegh Aghapour A., Zoheir D., Mostafa Dadashi F., Ahmad R., Joyner E., Isabel C. E., Mojtaba A., Lauren F. G., Amirsharar R. E., Anwar S., Negin K. Nanocomposite membranes for water separation and purification: Fabrication, modification, and applications // Separation and Purification Technology. — 2019. — № 213.
24. Fantke P., Cinquemani C., Yaseneva P., De Mello J., Schwabe H., Ebeling B., Lapkin A. Transition to sustainable chemistry through digitalization // Chem. — 2021. — № 7 (11).
25. Ganesh K., Deqing Z., Scott J.M., Rossen K., Chirik P., Kozlowski M., Zimmerman J., Brooks B., Savage P., Allen D., Voutchkova-Kostal A. Green Chemistry: A Framework for a Sustainable Future // Organometallics. — 2021. — № 40 (12).
26. Graham N., Lee R. J., Darren A. W., Bing Joe H., Hongxian H. Sustainability of Battery Technologies: Today and Tomorrow // ACS Sustainable Chemistry & Engineering. — 2021. — № 9 (19).
27. Joshi R. P., Kumar N. Artificial Intelligence for Autonomous Molecular Design: A Perspective // Molecules. — 2021. — № 26 (22)
28. Levin K., Cashore B., Bernstein S. et al. Overcoming the tragedy of super wicked problems: constraining our future selves to ameliorate global climate change // Policy Sci. — 2012. — № 45. — С. 123-152.
29. Lifset R. 3D Printing and Industrial Ecology // Journal of Industrial Ecology. — 2017. — №21 (S1)
30. MacLeod B. P., Parlante F. G. L., Morrissey T. D., Häse F., Roch L. M., Dettelbach K. E., Moreira R., et al. Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials // Science Advances. — 2020. — №6 (20).
31. Nikolay V. Ryzhkov, Konstantin G. Nikolaev, Artemii S. Ivanov, and Ekaterina V. Skorb (2021) Infochemistry and the Future of Chemical Information Processing Annual Review of Chemical And Biomolecular Engineering, Vol. 12:63-95. DOI: doi.org/10.1146/annurev-chembioeng-122120-023514
32. Nowak G., Fic G. Machine Learning Approach to Discovering Cascade Reaction Patterns. Application to Reaction Pathways Prediction // Journal of Chemical Information and Modeling. — 2009. — № 49 (6).
33. Ong M. Y., Nomanbhay S., Kusumo F., Raja Shahrzuzaman R. M. H., Shamsuddin A. H. Modeling and Optimization of Microwave-Based Bio-Jet Fuel from Coconut Oil: Investigation of Response Surface Methodology (RSM) and Artificial Neural Network Methodology (ANN) // Energies. — 2021. — № 14 (2).
34. Orbay K., Miranda R., Orbay M. INVITED ARTICLE: Building Journal Impact Factor Quartile into the Assessment of Academic Performance: A Case Study // Participatory Educational Research. — 2020. — № 7 (2).
35. P. R. Yaashikaa, P. Senthil Kumar, A. Saravanan, Dai-Viet N. Vo. Advances in biosorbents for removal of environmental pollutants: A review on pretreatment, removal mechanism and future outlook // Journal of Hazardous Materials. — 2021. — № 420.

36. Putra R., Maulana A., Saputro A. Study on building machine learning model to predict biodegradable-ready materials // AIP Conference Proceedings. — 2019. — № 2088 (1).
37. Romashov L. V. et al. Atom-economic Approach to the Synthesis of  $\alpha$ -(Hetero)aryl-substituted Furan Derivatives from Biomass // Chemistry — An Asian Journal. — 2022. — № 17 (1).
38. Sang-Won P., Andrew D. D., Nilesh R. D., Youngseon S., Hyung J. K., YounJoon J. Computer Simulation Study of Graphene Oxide Supercapacitors: Charge Screening Mechanism // The Journal of Physical Chemistry Letters. — 2016. — № 7 (7).
39. Sha W., Guo Y., Yuan Q., Tang S., Zhang X., Lu S., Guo X., Cao Y., Cheng S. Artificial Intelligence to Power the Future of Materials Science and Engineering // Advanced Intelligent Systems. — 2020. — № 2 (4).
40. Shekhar S., Sharma S., Kumar A., Taneja A., Sharma B. The framework of nanopesticides: a paradigm in biodiversity // Material Advances. — 2021. — № 2 (20).
41. Smith M. J., Weinberger C., Bruna E. M., Allesina S. The Scientific Impact of Nations: Journal Placement and Citation Performances // PLoS ONE. — 2014. — № 9 (10).
42. Thakur A., Mishra A. P., Panda B., Rodríguez D. C. S., Gaurav I., Majhi B. Application of Artificial Intelligence in Pharmaceutical and Biomedical Studies // Curr Pharm Des.. — 2020. — № 26 (29).
43. Tietze T., Szulc P., Smykowski D., Sitka A., Redzicki R. Application of Phase Change Material and Artificial Neural Networks for Smoothing of Heat Flux Fluctuations // Energies. — 2021. — № 14 (12).
44. Vasylenko A., Gamon J., Duff B. V. Element selection for crystalline inorganic solid discovery guided by unsupervised machine learning of experimentally explored chemistry // Nature Communications. — 2021. — № 12.
45. Wang L., Kruk S., Koshelev K., Kravchenko I., Luther-Davies B., Kivshar Y. Nonlinear Wavefront Control with All-Dielectric Metasurfaces // Nano Letters. — 2018. — № 18 (6).
46. Wenhong Y., Timothy T. F., Wen-Hua S. Machine Learning in Catalysis, From Proposal to Practicing // ACS Omega. — 2020. — № 5 (1).
47. Xiaofeng J., Conghui L., Tailin X., Lei S., Xueji Z. Artificial intelligence biosensors: Challenges and prospects // Biosensors and Bioelectronics. — 2020. — № 165.
48. Zimmerman J., Anastas P., Erythropel H., Leitner W. Designing for a green chemistry future // Science. — 2020. — № 367 (6476).
- Интернет-источники**
49. 5-HT Digital Hub Chemistry & Health // 5-HT. URL: <https://www.5-ht.com/en> (дата обращения: 14.02.2022).
50. ABOUT THE MODEL: Chemical Leasing at Glance // Chemical leasing. URL: [chemicalleasing.com/chemicalleasing-at-glance/](http://chemicalleasing.com/chemicalleasing-at-glance/) (дата обращения: 11.02.2022).
51. AI & Blockchain: Chemical industry insights and actions // Accenture. URL: [accenture.com/us-en/insights/chemicals/ai-blockchain-chemical-industry](http://accenture.com/us-en/insights/chemicals/ai-blockchain-chemical-industry) (дата обращения: 11.02.2022).
52. AI Is Throwing Battery Development Into Overdrive // Wired. URL: [wired.com/story/ai-is-throwing-battery-development-into-overdrive/](http://wired.com/story/ai-is-throwing-battery-development-into-overdrive/) (дата обращения: 11.02.2022).
53. Artem Abakumov // Skoltech. URL: [faculty.skoltech.ru/people/artemabakumov](http://faculty.skoltech.ru/people/artemabakumov) (дата обращения: 11.02.2022).
54. Artificial Intelligence: A Game Changer for the Chemical Manufacturing Industry // NC State University. URL: [cnr.ncsu.edu/news/2020/03/artificial-intelligence-chemical-industry/](http://cnr.ncsu.edu/news/2020/03/artificial-intelligence-chemical-industry/) (дата обращения: 11.02.2022).
55. At 25.7% CAGR, Solar Panels Market size Expected to Reach USD 902.55 Bn, Globally by 2028, says Brandessence Market Research // PR Newswire. URL: [prnewswire.com/news-releases/at-25-7-cagr-solar-panels-market-size-expected-to-reach-usd-902-55-bn-globally-by-2028-says-brandessence-market-research-301460328.html](http://prnewswire.com/news-releases/at-25-7-cagr-solar-panels-market-size-expected-to-reach-usd-902-55-bn-globally-by-2028-says-brandessence-market-research-301460328.html) (дата обращения: 11.02.2022).
56. At 28.1% CAGR, EV Battery Market Size is Projected to Grow from USD 27.30 Billion in 2021 to USD 154.90 Billion in 2028 // Globe Newswire. URL: [globenewswire.com/news-release/2021/10/27/2321353/0/en/At-28-1-CAGR-EV-Battery-Market-Size-is-Projected-to-Grow-from-USD-27-30-Billion-in-2021-to-USD-154-90-Billion-in-2028.html](http://globenewswire.com/news-release/2021/10/27/2321353/0/en/At-28-1-CAGR-EV-Battery-Market-Size-is-Projected-to-Grow-from-USD-27-30-Billion-in-2021-to-USD-154-90-Billion-in-2028.html) (дата обращения: 11.02.2022).
57. Average R&D cost to develop a pharmaceutical compound from discovery to launch from 2010 to 2020, by study cohort // Statista. URL: [statista.com/statistics/825727/randd-cost-for-new-pharma-compounds-by-cohort/](http://statista.com/statistics/825727/randd-cost-for-new-pharma-compounds-by-cohort/) (дата обращения: 11.02.2022).
58. Bayer, Aalto and HUS expand collaboration — artificial intelligence to support clinical drug trials // Aalto University. URL: [aalto.fi/en/news/bayer-aalto-and-hus-expand-collaboration-artificial-intelligence-to-support-clinical-drug](http://aalto.fi/en/news/bayer-aalto-and-hus-expand-collaboration-artificial-intelligence-to-support-clinical-drug) (дата обращения: 11.02.2022).
59. BP Energy Outlook 2018 edition // BP. URL: [bp.com/content/dam/bp/business-sites/en/global/corporate/pdfs/energy-economics/energy-outlook/bp-energy-outlook-2018.pdf?\\_x\\_tr\\_sl=en&\\_x\\_tr\\_tl=ru&\\_x\\_tr\\_hl=ru&\\_x\\_tr\\_pto=sc](http://bp.com/content/dam/bp/business-sites/en/global/corporate/pdfs/energy-economics/energy-outlook/bp-energy-outlook-2018.pdf?_x_tr_sl=en&_x_tr_tl=ru&_x_tr_hl=ru&_x_tr_pto=sc) (дата обращения: 11.02.2022).
60. Building the Best Battery // QuantumScape. URL: [quantumscap.com/](http://quantumscap.com/) (дата обращения: 11.02.2022).
61. C&EN's 2021 10 Start-Ups to Watch // C&EN. URL: [cen.acs.org/business/start-ups/CENs-2021-10-Start-Ups-to-Watch-cleantech/99/i42?utm\\_source=mostread&utm\\_medium=mostread&utm\\_campaign=CEN](http://cen.acs.org/business/start-ups/CENs-2021-10-Start-Ups-to-Watch-cleantech/99/i42?utm_source=mostread&utm_medium=mostread&utm_campaign=CEN) (дата обращения: 11.02.2022).
62. C&EN's Global Top 50 chemical firms for 2021 // C&EN. URL: [cen.acs.org/business/finance/CENs-Global-Top-50-2021/99/i27](http://cen.acs.org/business/finance/CENs-Global-Top-50-2021/99/i27) (дата обращения: 11.02.2022).
63. Carbon Capture, Utilization, and Storage (CCUS) Market 2022 // Allied Market Research. URL: [alliedmarketresearch.com/carbon-capture-and-utilization-market-A12116](http://alliedmarketresearch.com/carbon-capture-and-utilization-market-A12116) (дата обращения: 11.02.2022).
64. Chemical (Re)action: Growth in a circular economy // Accenture. URL: [accenture.com/us-en/insights/chemicals/chemical-reaction-circular-economy](http://accenture.com/us-en/insights/chemicals/chemical-reaction-circular-economy) (дата обращения: 11.02.2022).
65. Chemical Industry — Surviving or Thriving in the Next Normal? // CHEManager. URL: [chemanager-online.com/en/news/chemical-industry-surviving-or-thriving-next-normal](http://chemanager-online.com/en/news/chemical-industry-surviving-or-thriving-next-normal) (дата обращения: 11.02.2022).
66. Chemical Industry Vision 2030: A European Perspective // AT Kearney. URL: [kearney.com/chemicals/article?/a/chemical-industry-vision-2030-a-european-perspective](http://kearney.com/chemicals/article?/a/chemical-industry-vision-2030-a-european-perspective) (дата обращения: 11.02.2022).
67. Chemistry Consortium in the NFDI // NFDI4Chem. URL: [nfdi4chem.de/](http://nfdi4chem.de/) (дата обращения: 11.02.2022).
68. Circular Economy // INEOS. URL: [ineos.com/sustainability/circular-economy/](http://ineos.com/sustainability/circular-economy/) (дата обращения: 11.02.2022).
69. Circular Economy // LG Chem. URL: [lgchem.com/sustainability/esh-management/strategy/circular-economy](http://lgchem.com/sustainability/esh-management/strategy/circular-economy) (дата обращения: 11.02.2022).
70. Circular Economy at BASF // BASF. URL: [basf.com/global/en/who-we-are/sustainability/we-drive-sustainable-solutions/circular-economy.html](http://basf.com/global/en/who-we-are/sustainability/we-drive-sustainable-solutions/circular-economy.html) (дата обращения: 11.02.2022).
71. Citrine Informatics // Citrine. URL: [citrine.io/](http://citrine.io/) (дата обращения: 11.02.2022).
72. Collaborating with leading universities to meet global energy demand // ExxonMobil. URL: [corporate.exxonmobil.com/Climate-solutions/University-and-National-Labs-partnerships/Collaborating-with-leading-universities-to-meet-global-energy-demand#MassachusettsInstituteofTechnology](http://corporate.exxonmobil.com/Climate-solutions/University-and-National-Labs-partnerships/Collaborating-with-leading-universities-to-meet-global-energy-demand#MassachusettsInstituteofTechnology) (дата обращения: 11.02.2022).
73. Companies // European Startups. URL: [app.europeanstartups.co/companies](http://app.europeanstartups.co/companies) (дата обращения: 11.02.2022).
74. Computer system predicts products of chemical reactions // MIT News. URL: [news.mit.edu/2017/computer-system-predicts-products-chemical-reactions-0627](http://news.mit.edu/2017/computer-system-predicts-products-chemical-reactions-0627) (дата обращения: 13.02.2022).



75. CORSIA Implementation Elements // ICAO. URL: [icao.int/environmental-protection/CORSIA/Pages/implementation-elements.aspx](https://www.icao.int/environmental-protection/CORSIA/Pages/implementation-elements.aspx) (дата обращения: 11.02.2022).
76. COVID-19 is challenging the way we think of chemical industry trends. This is how // World Economic Forum. URL: [weforum.org/agenda/2021/03/chemical-industry-trends-forecasting-resilience/](https://www.weforum.org/agenda/2021/03/chemical-industry-trends-forecasting-resilience/) (дата обращения: 11.02.2022).
77. Digitalization // BASF. URL: [basf.com/global/en/who-we-are/digitalization.html](https://www.basf.com/global/en/who-we-are/digitalization.html) (дата обращения: 11.02.2022).
78. Disruptive forces in the industrial sectors Global executive survey // McKinsey & Company. URL: [mckinsey.com/~/media/mckinsey/industries/automotive%20and%20assembly/our%20insights/how%20industrial%20companies%20can%20respond%20to%20disruptive%20forces/disruptive-forces-in-the-industrial-sectors.ashx](https://www.mckinsey.com/~/media/mckinsey/industries/automotive%20and%20assembly/our%20insights/how%20industrial%20companies%20can%20respond%20to%20disruptive%20forces/disruptive-forces-in-the-industrial-sectors.ashx) (дата обращения: 11.02.2022).
79. ETC/WMG E Report 2/2021: Business Models in a Circular Economy // Eionet Portal. URL: [eionet.europa.eu/etc/etc-wmge/products/etc-wmge-reports/business-models-in-a-circular-economy](https://www.eionet.europa.eu/etc/etc-wmge/products/etc-wmge-reports/business-models-in-a-circular-economy) (дата обращения: 11.02.2022).
80. Food Nanotechnology Market to record a CAGR of 25.32% by 2025 // PR Newswire. URL: [prnewswire.com/news-releases/food-nanotechnology-market-to-record-a-cagr-of-25-32-by-2025-technavio-301474651.html](https://www.prnewswire.com/news-releases/food-nanotechnology-market-to-record-a-cagr-of-25-32-by-2025-technavio-301474651.html) (дата обращения: 11.02.2022).
81. Genesis Therapeutics Secures \$52M Series A to Further Accelerate AI Innovation and to Launch Drug Discovery & Development Pipeline // Businesswire. URL: <https://www.businesswire.com/news/home/20210202005297/en/Genesis-Therapeutics-Secures-52M-Series-A-to-Further-Accelerate-AI-Innovation-and-to-Launch-Drug-Discovery-Development-Pipeline> (дата обращения: 15.01.2022).
82. Global Bio-Based Materials Market Size Is Expected To Reach About USD 87 Billion by 2026, at a CAGR of 26.5%: Facts & Factors // Globe Newswire. URL: [globenewswire.com/news-release/2021/12/17/2354362/0/en/Global-Bio-Based-Materials-Market-Size-Is-Expected-To-Reach-About-USD-87-Billion-by-2026-at-a-CAGR-of-26-5-Facts-Factors.html](https://www.globenewswire.com/news-release/2021/12/17/2354362/0/en/Global-Bio-Based-Materials-Market-Size-Is-Expected-To-Reach-About-USD-87-Billion-by-2026-at-a-CAGR-of-26-5-Facts-Factors.html) (дата обращения: 11.02.2022).
83. Global Synthetic Biology Market Report 2021: Market to Reach \$28.8 Billion by 2026 — Oligonucleotides & Synthetic DNA is Projected to Account for \$16.1 Billion // Globe Newswire. URL: [globenewswire.com/news-release/2022/01/21/2370810/28124/en/Global-Synthetic-Biology-Market-Report-2021-Market-to-Reach-28-8-Billion-by-2026-Oligonucleotides-Synthetic-DNA-is-Projected-to-Account-for-16-1-Billion.html](https://www.globenewswire.com/news-release/2022/01/21/2370810/28124/en/Global-Synthetic-Biology-Market-Report-2021-Market-to-Reach-28-8-Billion-by-2026-Oligonucleotides-Synthetic-DNA-is-Projected-to-Account-for-16-1-Billion.html) (дата обращения: 11.02.2022).
84. GREEN AND SUSTAINABLE CHEMISTRY: FRAMEWORK MANUAL // UNEP. URL: [wedocs.unep.org/handle/20.500.11822/34338](https://wedocs.unep.org/handle/20.500.11822/34338) (дата обращения: 11.02.2022).
85. Growth and innovation in the chemical industry // Accenture. URL: [accenture.com/us-en/insights/chemicals/chemical-growth-and-innovation](https://www.accenture.com/us-en/insights/chemicals/chemical-growth-and-innovation) (дата обращения: 11.02.2022).
86. Guided by AI, robotic platform automates molecule manufacture // MIT News. URL: [news.mit.edu/2019/automate-molecule-production-ai-0808](https://news.mit.edu/2019/automate-molecule-production-ai-0808) (дата обращения: 13.02.2022).
87. How Big Tech got so big: Hundreds of acquisitions // The Washington Post. URL: [washingtonpost.com/technology/interactive/2021/amazon-apple-facebook-google-acquisitions/](https://www.washingtonpost.com/technology/interactive/2021/amazon-apple-facebook-google-acquisitions/) (дата обращения: 11.02.2022).
88. How Quantum Computing can benefit chemistry // Covestro. URL: [covestro.com/press/how-quantum-computing-can-benefit-chemistry/](https://www.covestro.com/press/how-quantum-computing-can-benefit-chemistry/) (дата обращения: 11.02.2022).
89. If you're into efficiency, COMPLEASE™ is for you // SAFECHEM. URL: [safechem.com/en/metal-cleaning/complease](https://www.safechem.com/en/metal-cleaning/complease) (дата обращения: 11.02.2022).
90. Industry 5.0 // European Commission. URL: [ec.europa.eu/info/research-and-innovation/research-area/industrial-research-and-innovation/industry-50\\_en](https://ec.europa.eu/info/research-and-innovation/research-area/industrial-research-and-innovation/industry-50_en) (дата обращения: 11.02.2022).
91. Innovation // BASF. URL: [report.basf.com/2020/en/managements-report/our-strategy/innovation.html](https://www.basf.com/2020/en/managements-report/our-strategy/innovation.html) (дата обращения: 11.02.2022).
92. Innovation in chemicals // Deloitte. URL: [www2.deloitte.com/us/en/insights/industry/oil-and-gas/chemical-innovation.html](https://www2.deloitte.com/us/en/insights/industry/oil-and-gas/chemical-innovation.html) (дата обращения: 11.02.2022).
93. Let's drive sustainable chemistry together // SusChem. URL: [suschem.org/](https://www.suschem.org/) (дата обращения: 11.02.2022).
94. Lithium-ion Battery Recycling Market to rise at CAGR of 21.43 % through 2030 — Report by Market Research Future (MRFR) // Globe Newswire. URL: [globenewswire.com/news-release/2021/12/06/2346181/0/en/Lithium-ion-Battery-Recycling-Market-to-rise-at-CAGR-of-21-43-through-2030-Report-by-Market-Research-Future-MRFR.html](https://www.globenewswire.com/news-release/2021/12/06/2346181/0/en/Lithium-ion-Battery-Recycling-Market-to-rise-at-CAGR-of-21-43-through-2030-Report-by-Market-Research-Future-MRFR.html) (дата обращения: 11.02.2022).
95. Machine-learning Atomistic Modeling of Corrosion Postdoctoral Researcher // C&EN. URL: [chemistryjobs.acs.org/job/36059/machine-learning-atomistic-modeling-of-corrosion-postdoctoral-researcher/](https://www.ceramics.org/ceramics/machine-learning-atomistic-modeling-of-corrosion-postdoctoral-researcher/) (дата обращения: 11.02.2022).
96. Making Smart Materials Smarter With Multiphysics Simulation // Digital Engineering 247. URL: [digitalengineering247.com/article/making-smart-materials-smarter-multiphysics-simulation/](https://www.digitalengineering247.com/article/making-smart-materials-smarter-multiphysics-simulation/) (дата обращения: 11.02.2022).
97. Market share of chemical industry's sales worldwide from 2009 to 2020, by region // Statista. URL: [statista.com/statistics/263136/global-market-share-in-the-chemical-industry-by-region/](https://www.statista.com/statistics/263136/global-market-share-in-the-chemical-industry-by-region/) (дата обращения: 11.02.2022).
98. Master's student or intern: Artificial Intelligence in Chemistry and Material Science // IBM Research Europe. URL: [zurich.ibm.com/careers/2021\\_009.html](https://www.zurich.ibm.com/careers/2021_009.html) (дата обращения: 11.02.2022).
99. Material Informatics Market Size to Surpass US\$ 782.2 Mn by 2030 // GlobeNewswire. URL: [globenewswire.com/en/news-release/2022/01/24/2372050/0/en/Material-Informatics-Market-Size-to-Surpass-US-782-2-Mn-by-2030.html](https://www.globenewswire.com/en/news-release/2022/01/24/2372050/0/en/Material-Informatics-Market-Size-to-Surpass-US-782-2-Mn-by-2030.html) (дата обращения: 11.02.2022).
100. Nanopesticide Market By Type (Insecticides, Herbicides, Fungicides, Others), By Application (Production, Protection, Harvesting, Packaging, Others)- Growth, Share, Opportunities & Competitive Analysis, 2019-2027 // Credence Research. URL: [credenceresearch.com/report/nanopesticide-market](https://www.credenceresearch.com/report/nanopesticide-market) (дата обращения: 11.02.2022).
101. Neste donates 750 000 euros to Aalto University // Aalto University. URL: [aalto.fi/en/news/neste-donates-750-000-euros-to-aalto-university](https://www.aalto.fi/en/news/neste-donates-750-000-euros-to-aalto-university) (дата обращения: 11.02.2022).
102. New AI tool developed by University of Liverpool researchers accelerates discovery of truly new materials // EurekAlert. URL: [eurekalert.org/news-releases/929009](https://www.eurekalert.org/news-releases/929009) (дата обращения: 11.02.2022).
103. Nokia donates seed funding to Aalto University for launching an industrial PhD program on quantum technology // Aalto University. URL: [aalto.fi/en/news/nokia-donates-seed-funding-to-aalto-university-for-launching-an-industrial-phd-program-on](https://www.aalto.fi/en/news/nokia-donates-seed-funding-to-aalto-university-for-launching-an-industrial-phd-program-on) (дата обращения: 11.02.2022).
104. Oganov, Artem R. // Scopus. URL: [scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701334785](https://scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701334785) (дата обращения: 11.02.2022).
105. On the look for new renewable raw materials // Nokian Tyres. URL: [nokiantyres.com/company/sustainability/products/tires-and-renewable-raw-materials/](https://www.nokiantyres.com/company/sustainability/products/tires-and-renewable-raw-materials/) (дата обращения: 11.02.2022).
106. Optimizing the chemicals value chain with AI // IBM. URL: [ibm.com/downloads/cas/Y4ZD7MVD](https://www.ibm.com/downloads/cas/Y4ZD7MVD) (дата обращения: 11.02.2022).
107. Organic Electronic Market 2022 // Allied Market Research. URL: [alliedmarketresearch.com/printed-organic-and-flexible-electronics-market](https://www.alliedmarketresearch.com/printed-organic-and-flexible-electronics-market) (дата обращения: 11.02.2022).
108. Pande Lab at Stanford University // Medium. URL: [medium.com/@pandelab](https://www.medium.com/@pandelab) (дата обращения: 13.02.2022).
109. Pande Lab at Stanford University // Pande Lab. URL: [pandelab.org/about#bio](https://www.pandelab.org/about#bio) (дата обращения: 13.02.2022).
110. pandegroup // GitHub. URL: [github.com/pandegroup](https://github.com/pandegroup) (дата обращения: 13.02.2022).
111. Personalized medicine // National Cancer Institute. URL: [cancer.gov/publications/dictionaries/cancer-terms/def/personalized-medicine](https://www.cancer.gov/publications/dictionaries/cancer-terms/def/personalized-medicine) (дата обращения: 11.02.2022).

112. Phase Change Material Market by type (Inorganic, Organic), Application (Building & Construction, HVAC, Cold Chain & Packaging, Electronics, Textile) and Region (North America, Europe, APAC, Rest of World) — Global Forecasts to 2026 // MarketsandMarkets. URL: marketsandmarkets.com/Market-Reports/advanced-phase-change-material-pcm-market-1087.html (дата обращения: 11.02.2022).
113. PhD or post-doctoral researcher: Organic Chemistry for Autonomous Lab Development and Operation // IBM Research Europe. URL: zurich.ibm.com/careers/2021\_054.html (дата обращения: 11.02.2022).
114. Precision Medicine Market Size Worth USD 126.14 Billion by 2025 at 12.48% CAGR — Report by Market Research Future (MRF) // Globe Newswire. URL: globenewswire.com/en/news-release/2021/07/12/2261393/0/en/Precision-Medicine-Market-Size-Worth-USD-126-14-Billion-by-2025-at-12-48-CAGR-Report-by-Market-Research-Future-MRF.html (дата обращения: 11.02.2022).
115. Principal Investigators in Machine Learning in Biomedicine (f/m/x) // New Scientist Jobs. URL: jobs.newscientist.com/en-gb/job/1401737580/principal-investigators-in-machine-learning-in-biomedicine-f-m-x-/ (дата обращения: 11.02.2022).
116. Publications // Zeng Laboratory. URL: zenggroup.org/publications/ (дата обращения: 13.02.2022).
117. RoboRXN: Automating Chemical Synthesis // IBM. URL: ibm.com/blogs/research/2020/08/roborxn-automating-chemical-synthesis/ (дата обращения: 11.02.2022).
118. Science Horizons Leading-edge science for sustainable prosperity over the next 10-15 years // Royal Society of Chemistry. URL: rsc.org/globalassets/04-campaigning-outreach/campaigning/science-horizons/science-horizons-report.pdf (дата обращения: 11.02.2022).
119. Scientists make digital breakthrough in chemistry that could revolutionize the drug industry // CNBC. URL: https://www.cnbc.com/2020/10/24/how-a-digital-breakthrough-could-revolutionize-drug-industry.html (дата обращения: 15.01.2022).
120. SciVal // SciVal. URL: scival.com/landing (дата обращения: 11.02.2022).
121. Scopus // Scopus. URL: scopus.com/ (дата обращения: 11.02.2022).
122. Smart Material Market Worth \$98.2 Billion By 2025 | CAGR: 13.5% // Grand View Research. URL: grandviewresearch.com/press-release/global-smart-materials-market (дата обращения: 11.02.2022).
123. State and Trends of Carbon Pricing 2020 // World Bank. URL: openknowledge.worldbank.org/bitstream/handle/10986/33809/9781464815867.pdf (дата обращения: 11.02.2022).
124. Sustainable and circular business models for the chemical industry // Sitra. URL: media.sitra.fi/2020/05/28111719/sustainable-and-circular-business-models-for-the-chemical-industry.pdf (дата обращения: 11.02.2022).
125. Sustainable Aviation Fuel Market by Fuel Type (Biofuel, Hydrogen Fuel, Power to Liquid Fuel, Gas to Liquid), Biofuel Manufacturing Technology (FT-SPK, HEFA-SPK, ATJ-SPK, HFS-SIP, CHJ), Biofuel Blending Capacity, Platform, Region - Global Forecast to 2030 // MarketsandMarkets. URL: marketsandmarkets.com/Market-Reports/sustainable-aviation-fuel-market-70301163.html (дата обращения: 11.02.2022).
126. Technology // Twist Bioscience. URL: twistbioscience.com/technology (дата обращения: 11.02.2022).
127. The evolution of digital R&D in chemicals // Accenture. URL: accenture.com/\_acnmedia/PDF-158/Accenture-Digital-Research-And-Development-Chemicals.pdf (дата обращения: 11.02.2022).
128. The Future of Petrochemicals Towards more sustainable plastics and fertilisers // INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. URL: iea.blob.core.windows.net/assets/bee4ef3a-8876-4566-98cf-7a130c013805/The\_Future\_of\_Petrochemicals.pdf?\_x\_tr\_sl=en&\_x\_tr\_tl=ru&\_x\_tr\_hl=ru&\_x\_tr\_pto=sc (дата обращения: 11.02.2022).
129. The future of work in chemicals // Deloitte. URL: www2.deloitte.com/content/dam/Deloitte/us/Documents/energy-resources/us-the-future-of-work-in-chemicals-pov.pdf (дата обращения: 11.02.2022).
130. The Matter Lab // University of Toronto. URL: matter.toronto.edu/ (дата обращения: 11.02.2022).
131. THE MOST VALUABLE MATCH // Excess Materials Exchange. URL: excessmaterialsexchange.com/en\_us/ (дата обращения: 11.02.2022).
132. The State of Industrial Digital Transformation // ptc. URL: ptc.com/en/resources/iiot/white-paper/state-of-industrial-digital-transformation (дата обращения: 11.02.2022).
133. These Countries Have Banned Animal Testing (2021) // Cruelty Free Soul. URL: crueltyfreesoul.com/animal-testing-banned-countries/ (дата обращения: 11.02.2022).
134. Topic Prominence in Science // Elsevier. URL: elsevier.com/solutions/scival/features/topic-prominence-in-science (дата обращения: 11.02.2022).
135. TRUCIRCLE™ portfolio and services // SABIC. URL: sabc.com/en/sustainability/circular-economy/trucircle-portfolio-and-services (дата обращения: 11.02.2022).
136. U.S. Department of Energy Publishes New Energy Savings Forecast for Solid-State Lighting // Office of Energy Efficiency & Renewable Energy. URL: energy.gov/eere/ssl/articles/us-department-energy-publishes-new-energy-savings-forecast-solid-state-lighting (дата обращения: 11.02.2022).
137. Universal Materials Incubator // UMI. URL: umi.co.jp/en/ (дата обращения: 14.02.2022).
138. Welcome to the Open Reaction Database! // Open Reaction Database. URL: docs.open-reaction-database.org/en/latest/ (дата обращения: 11.02.2022).
139. What We Do // Zymergen. URL: zymergen.com/what-we-do/ (дата обращения: 11.02.2022).
140. Why refinery-petrochemical integration is the downstream trend to watch // Wood Mackenzie. URL: woodmac.com/news/opinion/why-refinery-petrochemical-integration-is-the-downstream-trend-to-watch/ (дата обращения: 11.02.2022).
141. Why the future of oil is in chemicals, not fuels // C&EN. URL: cen.acs.org/business/petrochemicals/future-oil-chemicals-fuels/97/i8 (дата обращения: 11.02.2022).
142. Zhoushan Green Petrochemical Base // NS Energy. URL: nsenergybusiness.com/projects/zhoushan-green-petrochemical-base/ (дата обращения: 11.02.2022).



# Приложение 1

## Примеры глобальных стартапов, привлекающие капитал ведущих инвесторов

№ п/п	Наименование компании	Публичный запуск	Финансирование		Тематика проекта
			Млн долл. США	Инвесторы	
Медицина					
1	Strike Pharma (strikepharma.com, Швеция)	2021	1,2	Almi Invest	Разработка нового класса <b>токсидов иммуноконъюгатов</b> для прорыва в лечении онкологических заболеваний
2	Celeris Therapeutics (celeristx.com, Австрия)	2021	1	Longevitytech.fund, R42 Group, APEX Ventures	Платформа прогнозирования и проектирования компонентов молекул, автоматизация последующих химических и биологических задач. Платформа совмещает: <b>молекулярный дизайн, автоматизированный синтез и биологическую валидацию результатов</b>
3	Rome Therapeutics (rometx.com, Кембридж, Массачусетс, США)	2020	130	GV, Arch Venture Partners, Partners Innovation Fund, Section 32 и др.	Разработка новых методов лечения рака и аутоиммунных заболеваний с использованием возможностей <b>репитома (повторяющихся последовательностей генома)</b> . Компания создала платформу для анализа данных, благодаря ей идентифицируется заболевание, строится прогноз, прогнозируется реакция на методы лечения
4	KOJIN THERAPEUTICS (kojintx.com, Кембридж, Массачусетс, США)	2020	30	Polaris Partners, Newpath Partners и Cathay Health	Биофармацевтическая компания, разрабатывающая новые <b>таргетные терапевтические препараты, основанные на состоянии клеток и биологии ферроптоза</b>
5	EIKON THERAPEUTICS (eikontx.com, США)	2019	684	Column Group, Foresite Capital, Innovation Endeavors и Lux Capital	Биофармацевтическая компания, использующая революционную технологию <b>визуализации отдельных молекул</b> на стыке химии, инженерии и биологии, для поиска новых способов лечения опасных заболеваний. Платформа открытий Eikon основана на революционных инновациях ее основателей (Нобелевская премия, 2014)
6	ATAI Life Sciences AG (atai.life, Германия)	2018	384	Alpha Wave Global, Apeiron Investment Group, Pura Vida Investments, Thiel Capital, Subversive Capital, Fearless Ventures, Catalio Capital Management, Woodline Partners, Highline Capital Management, Neo Kuma Ventures	Разработка инновационных лекарственных средств для персонализированной психологической и психиатрической медицины, в частности использование технологии <b>интраназальных наполнителей на основе зольгеля</b> , которая может создать новые лекарственные препараты с уникальными и оптимизированными способами доставки различных активных ингредиентов
7	MOBILion SYSTEMS (mobilionsystems.com, Филадельфия, США)	2015	115	D1 Capital Partners, aMoon, Agilent Technologies, IP Group, Hostplus, Cultivation Capital и др. (нераскрытые инвесторы)	Идентификация и анализ сложных молекул посредством <b>аналитического прибора SLIM (с использованием технологии электрического поля)</b> , превосходящий жидкостную хроматографию и масс-спектрометрию

№ п/п	Наименование компании	Публичный запуск	Финансирование		Тематика проекта
			Млн долл. США	Инвесторы	
Материалы					
1	Sudoc (sudoc.com, Шарлоттсвилль, Вирджиния; Бостон; Питтсбург; Сан-Хуан, Пуэрто-Рико, США)	2020	10	Семейный фонд Хантера Льюиса	Экологичные коммерческие чистящие средства с окислительными катализаторами, которые самоуничтожаются. В центре внимания: эффективные и безопасные продукты для разложения токсичных материалов. Технология: <b>суперультразабавленные окислительные катализаторы</b>
2	Natural Fiber Welding (naturalfiberwelding.com, США)	2015	30,8	Ralph Lauren, Allbirds, Smart Shirts, BMW i Ventures, Ethos Capital, For Good Ventures и Prairie Crest Capital	Создание экономики замкнутого цикла вокруг мягких товаров. Основное направление: растительные материалы для производства текстильных изделий. Технология: <b>сварка волокон и полимеризация масла</b> . Химия, лежащая в основе Clagus, — это технология, на которой Хаверхалс основал NFW: сварка волокон. Разборка продукта для вторичной переработки приводит к дальнейшему укорачиванию волокон. Создание натуральных биоразлагаемых полимеров для производства новых материалов, в первую очередь текстиля
Энергетика					
1	Focused Energy (focused-energy.world, Германия)	2021	15	Marc Lore, Prime Movers Lab, Alex Rodriguez, Tony Florence	Развитие технологий <b>лазерного инерциального управляемого термоядерного синтеза</b> с фокусом на альтернативной энергетике
2	Hyme (hyme.energy, Дания)	2021	12	Heartland A/S	Сетевое решение для <b>хранения тепловой энергии на основе расплавленных солей</b> для интеграции устойчивой энергии в энергетическую систему. Подход к химическому контролю позволяет использовать недорогие и стабильные гидроксидные соли в компактных высокотемпературных накопителях энергии до 700 °C
3	LionVolt (lionvolt.com, Нидерланды)	2020	6	BOM Brabant Ventures, Sake Bosch, Innovation Industries	Разработка новых <b>3D-твердотельных аккумуляторов</b> . Их отличает повышенная безопасность, высокая производительность и использование устойчивых материалов, не содержащих тяжелых металлов, в рамках циркулярной экономики. Lion Volt предлагает новаторскую 3D-твердотельную технологию для аккумуляторов следующего поколения, которые на 100 % безопасны, весят на 50 % меньше, а производительность у них на 200 % выше, чем у современных литий-ионных аккумуляторов
4	C-ZERO (czero.energy, Калифорния, США)	2018	11,5	Breakthrough Energy Ventures, Eni Next, Mitsubishi Heavy Industries и AP Ventures	Разработка жидкого катализатора, который может открыть эру бирюзового водорода. Фокус: бирюзовый водород. Технология: <b>высокотемпературная жидкость, катализирующая пиролиз метана до водорода и элементарного углерода</b>

№ п/п	Наименование компании	Публичный запуск	Финансирование		Тематика проекта
			Млн долл. США	Инвесторы	
5	Enerpoly (enerpoly.com, Швеция)	2018	2,8	Impact, Propel Capital, Vinnova, European Innovation Council, Swedish Energy Agency, Sting	Компания, занимающаяся технологиями хранения энергии нового поколения, является пионером в области химии <b>цинк-ионных аккумуляторов</b>
6	Northvolt (northvolt.com, Стокгольм, Швеция)	2016	4000	Goldman Sachs, Baillie Gifford, EIT InnoEnergy, Norrsken VC, Fjärde Ap-Fonden (Ap4), Första Ap-Fonden (Ap1), Scania, AMF, Daniel Ek, Andra Ap-Fonden (Ap2), Tredje Ap-Fonden (Ap3), Baron Capital, Volkswagen Group, Compagnia di San Paolo, Cristina Stenbeck, ATP, IMAS Foundation, Stena Metall, Bridford Investments, OMERS Capital Markets, PCS Holding и др.	Производитель литий-ионных аккумуляторов. Проекты <b>зеленых батарей с уменьшенным на 80 % углеродным следом</b> по сравнению с батареями, изготовленными с использованием угольной энергии
7	Factorial Energy (factorialenergy.com, Уоберн, Массачусетс, США)	2013	65	Gatemoore Capital Management и Wave Equity Partners	Вывод на рынок аккумуляторов с твердыми электролитами на полимерной основе. В фокусе: высокоэнергетические аккумуляторы для электромобилей. Технология: <b>батарея с твердым электролитом на полимерной основе и литий-металлическим анодом</b>
8	Neoen (neoen.com, Париж, Франция)	2008	77,1	Credit Agricole, Louis Dreyfus Natural Gas, Bpifrance Omnes Capital	Один из ведущих производителей <b>зеленых электростанций и накопителей энергии</b> , производитель энергии исключительно из возобновляемых источников
Экология					
1	Carbo Culture (carboculture.com, Финляндия)	2017	7	True Ventures, Lifeline Ventures, Albert Wenger, Maija Itkonen, Paul Bragiel, David Helgason, Dan Bragiel, Cherry Ventures, Übermorgen Ventures, Moaffak Ahmed	Разработка <b>биоугольных реакторов</b> , в которых используется высокое давление и высокая температура для <b>преобразования растительных отходов в биоуголь</b> — сверхстабильный углеродный материал
2	Cyclopure (cyclopure.com/lab, Чикаго, США)	2016	7,5	Национальный научный фонд, Ирвин Джейкобс, Национальный институт науки о здоровье и окружающей среде	Технология очистки воды с использованием <b>молекул β-циклодекстрина и др.</b>

№ п/п	Наименование компании	Публичный запуск	Финансирование		Тематика проекта
			Млн долл. США	Инвесторы	
3	SCW Systems (scwsystems.com/ Maatschappij, Нидерланды)	2016	16,9	Invest-NL	Создание технологии <b>сверхкритического (водного) газирования</b> . Это инновационная технология, которая <b>преобразует потоки органических отходов</b> , таких как осадки сточных вод, сельскохозяйственная биомасса, органические вещества и отходы промышленности, в <b>экологически чистое сырье для химической промышленности и экологически чистое топливо для энергетической промышленности</b> . Превращение происходит при высоком давлении и температуре выше стадии сверхкритической жидкости. На выходе получается <b>метан и зеленый водород</b>
4	Apix Analytics (apixanalytics.com, Франция)	2014	18,9	Bpifrance, Demeter Partners, BNP Paribas, Engie Rassembleurs d'Energies, Kreaxi, Banque Populaire Occitane, Supernova Invest, ALIAD (Air Liquide)	Производство миниатюрных (в 20 раз меньше высокопроизводительных лабораторных хроматографов) и модульных <b>газоанализаторов для промышленного анализа и использования OEM-производителями</b>
5	Mosaic Materials (mosaicmaterials.com, США)	2014	Нет данных	Baruch Future Ventures, Evok Innovations	<b>Металлоорганические каркасы</b> , улавливающие углекислый газ
6	Polystyvert (polystyvert.com, Канада)	2011	15	Cycle Capital Management, Angès Québec Capital, Angès Quebec, Energy Foundry	Разработка <b>раствора и технологий для переработки полистирола</b> . Благодаря этим технологиям рециркуляции или регенерации Polystyvert создал экономику замкнутого цикла для полистирола, что благотворно повлияло на состояние окружающей среды
7	QuantumScape (quantumscape.com, Калифорния, США)	2010	1119	Билл Гейтс, Capricorn Investment Group, Qatar Investment Authority, TriplePoint Capital, SAIC Motor, Continental, Breakthrough Energy Ventures, Volkswagen Group, Fidelity	Литий-металлические аккумуляторы. Технология: твердотельная литий-металлическая батарея — это батарея, которая заменяет полимерный сепаратор, используемый в обычных литий-ионных батареях, на <b>твердотельный сепаратор</b> . <b>Замена сепаратора позволяет заменить угольный или кремниевый анод, используемый в обычных литий-ионных батареях, на литий-металлический анод</b> . Анод из металлического лития более энергоемкий, чем обычные аноды, что позволяет аккумулятору хранить большее количество энергии в том же объеме. В некоторых твердотельных конструкциях для формирования анода используется избыток лития, но конструкция QuantumScape является «безанодной» в том смысле, что батарея изготавливается без анода в разряженном состоянии, а анод формируется на месте при первой зарядке

№ п/п	Наименование компании	Публичный запуск	Финансирование		Тематика проекта
			Млн долл. США	Инвесторы	
Прочие сферы					
1	VOTA BIOSCIENCES (vota.bio, США)	2019	118	BASF, Matrix Partners China, Meituan, Sequoia Capital China, Source Code Capital и др.	Технология: <b>ферментная инженерия</b> и информационные технологии. Фактически цифровая платформа Vota Freeway имеет цикличную конструкцию, отражая союз цифровых технологий и робототехники в передовых автономных лабораториях. Данные, полученные при проектировании и создании искусственно созданных организмов, возвращаются на этап проектирования и повторно входят в цикл для дальнейшего совершенствования процесса
2	Meatable (meatable.com, Дельфт, Нидерланды)	2018	64,6	Good Seed Ventures, Альберт Венгер, BlueYard Capital, Таавет Хинрикус, Джеффри Лейден, Ричард Клауснер, BlueYard Capital, DSM Venturing, фонд Гумбольдта	Разработка нового поколения чистого <b>мяса, выращенного из клеток животных, с использованием последних достижений в исследованиях стволовых клеток</b>
3	BIOPHERO (biophero.com, Копенгаген, Дания)	2016	20,5	DCVC Bio, FMC Ventures, Novo Holdings, Novo Seeds, Syngenta Group Ventures и Syddansk Innovation, а также сумма грантов Европейского Союза в рамках проектов Olefine и Phera	Выращивание <b>феромонов насекомых в дрожжевых клетках для устойчивой борьбы с вредителями</b> . Технология: производство половых феромонов насекомых в крупных ферментерах. Начав со скромного ферментера объемом 1 л в 2018, BioPhero привлекла 3,5 млн долл. США от консорциума, в который входил агрохимический гигант Syngenta. К 2020 деньги помогли команде расширить ферментер до 180 тыс. л. В настоящее время BioPhero готовится к коммерческому запуску своих первых продуктов при поддержке раунда финансирования в размере 17 млн долл., объявленного в феврале 2021
4	Citrine (citrine.io, США)	2013	36,3	UMI, Showa Denko, AGC, Michelin и LANXESS	Citrine Informatics — платформа информатики материалов для разработки материалов и химических веществ на основе данных. Разработчик <b>первой платформы искусственного интеллекта для исследований и разработок материалов и химикатов</b>

№ п/п	Наименование компании	Публичный запуск	Финансирование		Тематика проекта
			Млн долл. США	Инвесторы	
Прочие сферы					
5	Cascade SAS (lightcascade.com, Франция)	2012	7,9	European Innovation Council	Cascade разрабатывает <b>люминесцентные составы, состоящие из оптически активных веществ, которые взаимодействуют со светом, создавая эффект «светового каскада»</b> . Эти составы интегрировали в основной материал, чтобы обеспечить желаемые оптические характеристики для конечного использования, включая сельскохозяйственное и фотоэлектрическое применение. Зпатентованные добавки CASCADE позволяют избирательно преобразовывать падающее излучение естественного солнечного света или любого искусственного света в длины волн, наиболее эффективно воспринимаемые световыми рецепторами растений, солнечных элементов, водорослей, человеческого глаза и т. д.
6	Ynsect (ynsect.com, Франция)	2011	271	Talis Capital, Bpifrance, Demeter Partners, Eurazeo, VisVires New Protein (VVNP), Quadia, Crédit Agricole, Caisse d'Epargne, Picardie Investissement	<b>Повышение продуктивности белка.</b> Выращивание насекомых для производства высококачественных натуральных ингредиентов премиум-класса для питания и здоровья людей, животных и растений

Источники:

1. C&EN's 2021 10 Start-Ups to Watch // ACS. URL: [acs.org/business/start-ups/CENS-2021-10-Start-Ups-to-Watch-cleantech/99/i42?utm\\_source=mostread&utm\\_medium=mostread&utm\\_campaign=CEN](https://acs.org/business/start-ups/CENS-2021-10-Start-Ups-to-Watch-cleantech/99/i42?utm_source=mostread&utm_medium=mostread&utm_campaign=CEN) (дата обращения: 10.02.2022).
2. Это прорыв: десять самых важных технологий 2021 года // РБК. URL: [trends.rbc.ru/trends/innovation/606ecf189a79470e64285ce2](https://trends.rbc.ru/trends/innovation/606ecf189a79470e64285ce2) (дата обращения: 10.02.2022).
3. Презентация для инвесторов, 12.08.2021 г. // QuantumScape. URL: [ir.quantumscape.com/events-and-presentations/presentations/presentation-details/2021/Investor-Presentation/default.aspx](https://ir.quantumscape.com/events-and-presentations/presentations/presentation-details/2021/Investor-Presentation/default.aspx) (дата обращения: 10.02.2022).
4. Universal Materials Incubator Ltd. (UMI) Announces Strategic Investment in Citrine Informatics // Citrine Informatics. URL: [citrine.io/media-post/umi-announces-strategic-investment-in-citrine-informatics/](https://citrine.io/media-post/umi-announces-strategic-investment-in-citrine-informatics/) (дата обращения: 10.02.2022).
5. Companies // European Startups. URL: [app.europeanstartups.co/companies](https://app.europeanstartups.co/companies) (дата обращения: 11.02.2022).

## Приложение 2

# БЫСТРОРАСТУЩИЕ РЫНКИ ПЕРЕДОВОЙ ХИМИИ

### Нанопестициды

Рост рынка дополнительно стимулируется машинным обучением и искусственным интеллектом, которые позволяют определять и предсказывать поведение наночастиц в почве и растительности на основе наборов данных, что обеспечивает возможности моделирования на этапе НИОКР<sup>70</sup>.

Ожидается, что мировой рынок нанопестицидов будет расти в среднем на 15 % в год и достигнет более 940 млн долларов США в 2027<sup>71,72</sup>. Наноинсектициды — крупнейший сегмент, на долю которого приходится свыше 40 % общей выручки рынка. COVID-19 оказал сильное негативное влияние на рынок, однако ужесточение регулирующих законодательств развитых стран в области применения пестицидов стимулирует рост рынка. Нанопестициды сокращают негативное воздействие на окружающую среду.

### Нанотехнологии пищевой индустрии

В смежном с сельскохозяйственной отраслью секторе пищевой промышленности также имеется быстрорастущий рынок, где применяются химические нанотехнологии. Динамика рынка пищевых нанотехнологий во многом определяется растущим внедрением новых цифровых инструментов для повышения производительности сельского хозяйства<sup>73</sup>.

К 2025 году прогнозируется среднегодовой темп роста отрасли до 25 %. Один из самых объёмных и динамично развивающихся сегментов — наноматериалы для пищевой упаковки, помогающие продлить срок хранения продуктов.

Ключевые технологии рынка: полимерные нанокомпозиты в качестве упаковочных материалов с высокими барьерными свойствами, наночастицы серебра в качестве мощных противомикробных агентов, а также наносенсоры на основе наноматериалов для проведения анализа пищи<sup>74</sup>.

### Материальная информатика

Направление материалов получило, пожалуй, наибольшее преимущество с т. зр. проведения НИОКР. Большие данные, высокие вычислительные мощности и передовые алгоритмы глубокого обучения способствуют широкому применению ИИ в области материальной информатики. Искусственный интеллект выявляет закономерности и формирует модели прогнозирования. В этом отличие данной сферы от вычислительной химии, где компьютер — всего лишь калькулятор, использующий введенные человеком формулы<sup>75</sup>. Рынок складывается из платформенных решений, таких как Citrine Informatics — платформы информатики материалов для разработки материалов и химических веществ на основе данных<sup>76</sup>.

Объем рынка в 2021 году составил 91,7 млн долларов США с прогнозируемыми темпами роста до 27 % к 2030 году. Инновации в области искусственного интеллекта и масштабные достижения в инфраструктурах данных дали импульс развитию отрасли. Применение материальной информатики для поиска новых решений оказалось успешным. Одним из ярких примеров можно назвать открытие новых сверхтвердых материалов<sup>77</sup>.

70 Shekhar S., Sharma S., Kumar A., et al (2021) The framework of nanopesticides: a paradigm in biodiversity. *Materials Advances* 2:6569–6588. DOI: /10.1039/d1ma00329a.

71 Credence Research. URL: credenceresearch.com/report/nanopesticide-market.

72 Shekhar S., Sharma S., Kumar A., et al (2021) The framework of nanopesticides: a paradigm in biodiversity. *Materials Advances* 2:6569–6588. DOI: /10.1039/d1ma00329a.

73 Technavio. URL: prnewswire.com/news-releases/food-nanotechnology-market-to-record-a-cagr-of-25-32-by-2025—technavio-301474651.html.

74 Duncan TV (2011) Applications of nanotechnology in food packaging and food safety: Barrier materials, antimicrobials and sensors. *Journal of Colloid and Interface Science* 363:1–24. DOI: /10.1016/j.jcis.2011.07.017.

75 Sha W., Guo Y., Yuan Q., et al (2020) Artificial Intelligence to Power the Future of Materials Science and Engineering. *Advanced Intelligent Systems* 2:1900143. DOI: /10.1002/aisy.201900143.

76 Citrine. URL: citrine.io.

77 Precedence Research. URL: globenewswire.com/en/news-release/2022/01/24/2372050/0/en/Material-Informatics-Market-Size-to-Surpass-US-782-2-Mn-by-2030.html.

## Умные материалы

Это технологически сложные материалы, которые могут воспринимать широкий спектр стимулов окружения и реагировать на них. Их свойства и поведение в конечном продукте можно предсказывать благодаря цифровым решениям, позволяющим проводить компьютерные симуляции<sup>78</sup>.

Мировой рынок умных материалов достигнет объема в 98,2 млрд долларов к 2025 году, а среднегодовой темп роста составит 13,5 % в течение прогнозируемого периода. Ожидается, что более широкое использование рынков двигателей, датчиков и конструкционных материалов усилит спрос на умные материалы в ближайшие несколько лет<sup>79</sup>.

Рынок включает такие технологические решения, как материалы с памятью формы, пьезоэлектрические, электрострикционные, магнестрикционные и электрохромные материалы. Все они широко применяются в промышленности — как и ферромагнитные сплавы с памятью формы, электроактивные полимеры, проводящие полимеры и приводы из углеродных нанотрубок.

78 Digital Engineering. URL: [digitalengineering247.com/article/making-smart-materials-smarter-multiphysics-simulation](https://digitalengineering247.com/article/making-smart-materials-smarter-multiphysics-simulation).

79 Grandview Research. URL: [grandviewresearch.com/press-release/global-smart-materials-market](https://grandviewresearch.com/press-release/global-smart-materials-market).

80 Allied Market Research. URL: [alliedmarketresearch.com/printed-organic-and-flexible-electronics-market](https://alliedmarketresearch.com/printed-organic-and-flexible-electronics-market).

81 Tietze T., Szulc P., Smykowski D., et al (2021) Application of Phase Change Material and Artificial Neural Networks for Smoothing of Heat Flux Fluctuations. *Energies* 14:3531. DOI: /10.3390/en14123531.

82 Markets and Markets. URL: [marketsandmarkets.com/Market-Reports/advanced-phase-change-material-pcm-market-1087.html](https://marketsandmarkets.com/Market-Reports/advanced-phase-change-material-pcm-market-1087.html).

## Органическая электроника

Это еще один из рынков, зависящих от материалов, поэтому для него имеют существенное значение прогностические возможности искусственного интеллекта, помогающие находить наиболее эффективные материалы.

Ожидается, что объем мирового рынка органической электроники вырастет до 159 млрд долларов к 2027 году с темпами роста в среднем на 21 % с 2020 по 2027 годы. Драйвером развития выступают преимущества органической электроники перед неорганической (механическая гибкость, легкий вес, низкая стоимость). Поскольку органические устройства легче утилизировать, их производство растет по всему миру. Органическая электроника работает с низким энергопотреблением, обеспечивая энергосбережение<sup>80</sup>.

Ключевые технологии: органические светодиоды, органические полевые транзисторы, органические проводники, материалы для фотовольтаики.

## Материалы с фазовым переходом

Материалы с фазовым переходом — это вещества, которые поглощают или выделяют большое количество «скрытого» тепла, когда они претерпевают изменение своего агрегатного состояния. При совместном использовании алгоритмов машинного обучения и подобных материалов можно контролировать изменение температуры сырья, что является универсальной и необходимой функцией для многих производств и продуктов<sup>81</sup>.

Объем рынка должен достичь 1 млрд долларов к 2026 году при среднегодовом темпе роста 16 %. На развитии отрасли негативно сказываются недостаточная осведомленность промышленности и легковоспламеняемость материалов. Тем не менее, широкий спектр применения материалов с фазовым переходом и их значимость для многих промышленных сфер обеспечивают рост рынка<sup>82</sup>.



## Синтетическая биология

Развитие биотехнологии все сильнее зависит от использования больших данных о взаимосвязях и закономерностях в области химии.

Рынок синтетической биологии, оцениваемый в 6,4 млрд долларов в 2020 году, по прогнозам, вырастет до 28,8 млрд к 2026 году, увеличившись в среднем на 28,1 % за анализируемый период. Предполагается, что такой сегмент, как олигонуклеотиды и синтетическая ДНК, будет увеличиваться со среднегодовым темпом роста 29,5 % и достигнет 16,1 млрд долларов. Такая динамика объясняется растущим потреблением синтетической РНК, синтетической ДНК и синтетических генов, которые используются во множестве направлений. В условиях пандемии COVID-19 ученые рассматривают синтетическую биологию как способ ускорить процесс разработки вакцин. Другие факторы, способствующие расширению рынка, включают увеличение числа организаций, занимающихся исследованиями в области синтетической биологии, растущий спрос на гибридных животных, умножение разливов нефти в океане, улучшение финансирования НИОКР по разработке лекарств и повышение спроса на устойчивые энергетические ресурсы, в частности биотопливо<sup>83</sup>.

Ключевые технологии: генетическая и посттрансляционная модификация, технологические решения в области синтеза ДНК, инженерии генома, применения транскрипции *in vitro*, форматов непрерывной и бесклеточной эволюции.

<sup>83</sup> Global News Wire. URL: [globenewswire.com/news-release/2022/01/21/2370810/28124/en/Global-Synthetic-Biology-Market-Report-2021-Market-to-Reach-28-8-Billion-by-2026-Oligonucleotides-Synthetic-DNA-is-Projected-to-Account-for-16-1-Billion.html](https://globenewswire.com/news-release/2022/01/21/2370810/28124/en/Global-Synthetic-Biology-Market-Report-2021-Market-to-Reach-28-8-Billion-by-2026-Oligonucleotides-Synthetic-DNA-is-Projected-to-Account-for-16-1-Billion.html).

<sup>84</sup> Global News Wire. URL: [globenewswire.com/en/news-release/2021/07/12/2261393/0/en/Precision-Medicine-Market-Size-Worth-USD-126-14-Billion-by-2025-at-12-48-CAGR-Report-by-Market-Research-Future-MRFR.html](https://globenewswire.com/en/news-release/2021/07/12/2261393/0/en/Precision-Medicine-Market-Size-Worth-USD-126-14-Billion-by-2025-at-12-48-CAGR-Report-by-Market-Research-Future-MRFR.html).

<sup>85</sup> NIH. URL: [cancer.gov/publications/dictionaries/cancer-terms/def/personalized-medicine](https://cancer.gov/publications/dictionaries/cancer-terms/def/personalized-medicine).

## Персонализированная медицина

Новое направление здравоохранения быстро развивается в последние годы. Тема индивидуальных лекарств находится в центре внимания исследователей и индустрии, работающих над общим секвенированием генома человека. Передовые технические достижения проложили путь к новым научным и бизнес-моделям. Рынок быстро растет во всем мире и достигнет своего пика в ближайшие несколько лет.

Прогнозируется, что к 2025 году рынок достигнет объема 126 млрд долларов при среднегодовом темпе 12,5 %. Рост рынка точной медицины будет поддерживаться за счет сотрудничества фармацевтического и биотехнологического секторов с отраслями здравоохранения, работающими с большими данными, в течение прогнозируемого периода<sup>84</sup>.

Последние достижения в области решений персонализированной медицины (сверхвысокопроизводительное секвенирование и секвенирование следующего поколения) позволили врачам лучше понимать состояние здоровья своих пациентов и разрабатывать конкретные методы лечения для каждого пациента в отдельности. Персонализированная медицина включает использование таргетной терапии для лечения определенных типов раковых клеток, таких как HER2-положительные клетки рака молочной железы, или тестирование на онкомаркеры для диагностики рака. Направление также называется прецизионной медициной<sup>85</sup>.

## Солнечная энергетика

Рынок солнечной энергетика напрямую зависит от научных достижений в области материалов. Существенное значение для него имеют также прогностические возможности искусственного интеллекта для поиска наиболее эффективных для выработки электроэнергии соединений.

Солнечная энергетика переживает в последние годы существенный подъем благодаря спросу на возобновляемые источники энергии и инициативам в области устойчивой энергетика. В январе 2022 года ЕС предложил новую ставку НДС 0 % на солнечные батареи. Налоговые льготы и научно-исследовательские разработки также способствовали росту производства солнечной энергии в США — еще одном регионе, где активно развивается рынок. Некоторые штаты обязали поставщиков закупать определенную часть энергии за счет запасов возобновляемых источников, при этом самыми популярными остаются фотоэлектрические солнечные модули<sup>86</sup>.

К основным технологиям рынка относятся решения в области фотовольтаики, например солнечные панели различных типов.

86 Global News Wire. URL: [prnewswire.com/news-releases/at-25-7-cagr-solar-panels-market-size-expected-to-reach-usd-902-55-bn-globally-by-2028—says-brandessence-market-research-301460328.html](https://prnewswire.com/news-releases/at-25-7-cagr-solar-panels-market-size-expected-to-reach-usd-902-55-bn-globally-by-2028—says-brandessence-market-research-301460328.html).

87 Wired. URL: [wired.com/story/ai-is-throwing-battery-development-into-overdrive/](https://wired.com/story/ai-is-throwing-battery-development-into-overdrive/).

88 Global News Wire. URL: [globenewswire.com/news-release/2021/10/27/2321353/0/en/At-28-1-CAGR-EV-Battery-Market-Size-is-Projected-to-Grow-from-USD-27-30-Billion-in-2021-to-USD-154-90-Billion-in-2028.html](https://globenewswire.com/news-release/2021/10/27/2321353/0/en/At-28-1-CAGR-EV-Battery-Market-Size-is-Projected-to-Grow-from-USD-27-30-Billion-in-2021-to-USD-154-90-Billion-in-2028.html).

89 Global News Wire. URL: [globenewswire.com/news-release/2021/12/06/2346181/0/en/Lithium-ion-Battery-Recycling-Market-to-rise-at-CAGR-of-21-43-through-2030-Report-by-Market-Research-Future-MRFR.html](https://globenewswire.com/news-release/2021/12/06/2346181/0/en/Lithium-ion-Battery-Recycling-Market-to-rise-at-CAGR-of-21-43-through-2030-Report-by-Market-Research-Future-MRFR.html).

## Аккумуляторы для электромобилей

Рынок аккумуляторных батарей может получить стимул к росту за счет применения ИИ, поскольку его прогностические способности создают наиболее удачные решения в области химии материалов для эффективного сохранения электроэнергии при минимальной стоимости<sup>87</sup>.

Объем мирового рынка аккумуляторов для электромобилей в 2020 году составил 22 млрд долларов. Прогнозируется его увеличение до 155 млрд долларов в 2028 году при среднегодовом темпе роста 28,1 % в период 2021-2028 годов. В настоящее время основной источник энергии для электромобилей — литий-ионные аккумуляторы. Согласно оценочному отчету, представленному Комиссией по международной торговле США (USITC) в 2018 году, на литий-ионные аккумуляторы приходится более 70 % рынка аккумуляторных батарей. Кроме того, стоимость аккумуляторов за киловатт-час упала и составила менее 200 долларов в 2019 году по сравнению с 1000 долларов в 2010 году. Предполагается, что это будет способствовать росту рынка аккумуляторов для электромобилей<sup>88</sup>.

Рынок представлен в основном следующими технологиями: никель-металлогидридные, литий-ионные, свинцово-кислотные аккумуляторы.

## Переработка литий-ионных аккумуляторов

Рынок переработки аккумуляторов во многом зависит от химических технологий. Во-первых, ценны качественные методы их утилизации. Во-вторых, на базе переработанных материалов можно производить новые полезные вещества и материалы.

К 2030 году мировой рынок переработки литий-ионных аккумуляторов достигнет 24 млрд долларов при среднегодовом темпе роста 21,4 %. Потребность в электромобилях с батарейным питанием усиливается и приводит к росту рынка в прогнозируемый период. В развитых и развивающихся странах произошел сдвиг парадигмы в сторону транспортного парка с низким уровнем выбросов углерода, способствующий развитию отрасли. Появление различных типов электромобилей на протяжении многих лет привело к тому, что срок службы большого числа аккумуляторов подходит к концу. Тренд на чистую энергию будет также служить надежным источником роста для рынка в прогнозируемый период<sup>89</sup>.

## Зеленое авиатопливо

На этапе исследования рынок биотоплива в целом может получать преимущества за счет применения нейронных сетей. Их использование обеспечивает надежность, точность, способность к быстрому обучению в самых сложных моделях при прогнозировании параметров качества биотоплива<sup>90</sup>. То же верно и для отдельных сегментов рынка (например, реактивного биотоплива): ИИ способен изменить подход в исследованиях как один из цифровых инструментов анализа<sup>91</sup>.

Ожидается, что рынок устойчивого авиационного топлива увеличится с 219 млн долларов в 2021 году до 15 млрд к 2030 году при среднегодовом темпе роста 60,8 % в течение прогнозируемого периода. Большой вклад в развитие отрасли внесло расширение авиакомпаниями коммерческих парков самолетов в связи с увеличением количества авиаперевозок. Это, в свою очередь, стимулирует спрос на экологичное авиатопливо в соответствии со стратегиями по сокращению выбросов парниковых газов<sup>92</sup>.

С т. зр. социальных и экономических выгод наиболее перспективными устойчивыми видами авиационного топлива являются синтетическое, экологически чистое реактивное, биореактивное и водородное топливо.

## Улавливание и утилизация углерода

Благодаря технологическим достижениям расширяется деятельность по разведке и добыче нефти и газа на шельфе, что способствует внедрению методов повышения нефтеотдачи закачкой газа, включая использование двуокиси углерода для добычи сырой нефти. Все эти факторы в совокупности ведут к росту сектора<sup>93</sup>.

Мировой рынок улавливания, утилизации и хранения углерода оценивался в 1,9 млрд долларов в 2020 году и, по прогнозам, достигнет 7 млрд долларов к 2030 году, увеличившись в среднем на 13,8 % в период с 2021 по 2030 годы. Улавливание, утилизация и хранение углерода — это процесс улавливания углекислого газа в результате сжигания топлива или промышленных процессов, транспортировки этого CO<sub>2</sub> по морю или трубопроводу, а также использования в качестве ресурса для создания ценных продуктов и услуг или постоянного хранения глубоко под землей в геологических формациях. Глобальный спрос здесь обусловлен в первую очередь растущим вниманием к сокращению выбросов CO<sub>2</sub>, поддержкой правительственных инициатив и растущим спросом на методы CO<sub>2</sub>-EOR. Чтобы уменьшить углеродный след, правительства многих развитых и развивающихся стран (США, Нидерланды, Великобритания, Китай, Индия) создают большое количество заводов по улавливанию и хранению CO<sub>2</sub>. Ожидается, что этот фактор будет способствовать росту рынка в течение прогнозируемого периода.

<sup>90</sup> Barradas A. O., Amorim I. M. Applications of Artificial Neural Networks in Biofuels. In: El-Shahat A, editor. *Advanced Applications for Artificial Neural Networks*. London: IntechOpen. DOI: 10.5772/intechopen.70691.

<sup>91</sup> Ong M. Y., Nomanbhay S., Kusumo F., et al (2021) Modeling and Optimization of Microwave-Based Bio-Jet Fuel from Coconut Oil: Investigation of Response Surface Methodology (RSM) and Artificial Neural Network Methodology (ANN). *Energies* 14:295. DOI: /10.3390/en14020295.

<sup>92</sup> Markets and Markets. URL: [marketsandmarkets.com/Market-Reports/sustainable-aviation-fuel-market-70301163.html](https://marketsandmarkets.com/Market-Reports/sustainable-aviation-fuel-market-70301163.html).

<sup>93</sup> Allied Market Research. URL: [alliedmarketresearch.com/carbon-capture-and-utilization-market-A12116](https://alliedmarketresearch.com/carbon-capture-and-utilization-market-A12116).

## Биоразлагаемые материалы

Нейронные сети и другие алгоритмы используют наборы данных с описаниями соединений и в результате способны классифицировать биоразлагаемость с довольно высокой точностью<sup>94</sup>.

Размер рынка биоразлагаемых материалов оценивается в 14 млрд долларов в 2020 году и, как ожидается, достигнет приблизительно 87 млрд долларов к 2026 году при среднегодовом темпе роста 26,5 %. Стабильная стоимость сельскохозяйственного сырья по сравнению с продуктами нефтехимии, вероятно, увеличит использование и популярность материалов на биологической основе в мире. Эта продукция к тому же экологически чистая: она может быть переработана и не способствует выбросу парниковых газов в атмосферу. Кроме того, материалы на биологической основе помогают минимизировать зависимость экономики от нефти, а их биоразлагаемые свойства снижают токсичное воздействие на среду<sup>95</sup>. Регулирующие нормативы, например Европейский REACH, подталкивают производителей в направлении использования подобных материалов и их оценки. Растущая необходимость в них в совокупности с цифровыми инструментами позволит рынку в дальнейшем динамично развиваться.

Перспективны технологии получения материалов на биологической основе из возобновляемого сырья на базе органических полимеров из кукурузы, крахмала и сахарного тростника, которые разлагаются в окружающей среде в течение года.

<sup>94</sup> Putra R. I. D., Maulana A. L., Saputro A. G. (2019) Study on building machine learning model to predict biodegradable-ready materials. AIP Conference Proceedings. DOI: /10.1063/1.5095351.

<sup>95</sup> Global News Wire. URL: [globenewswire.com/news-release/2021/12/17/2354362/0/en/Global-Bio-Based-Materials-Market-Size-Is-Expected-To-Reach-About-USD-87-Billion-by-2026-at-a-CAGR-of-26-5-Facts-Factors.html](https://globenewswire.com/news-release/2021/12/17/2354362/0/en/Global-Bio-Based-Materials-Market-Size-Is-Expected-To-Reach-About-USD-87-Billion-by-2026-at-a-CAGR-of-26-5-Facts-Factors.html).

Разработке доклада предшествовала форсайт-сессия «Фронтиры в новых науках», организованная Фондом «Центр стратегических разработок «Северо-Запад» совместно с Фондом поддержки инноваций и молодежных инициатив Санкт-Петербурга при поддержке Правительства Санкт-Петербурга и Министерства науки и высшего образования России.

**Дата проведения:** 9-10 ноября 2021 года

**Формат:** конференция и совместная работа в группах по направлениям

**Направления:** новая химия, синтетическая биология, искусственный интеллект в промышленности, «зеленый переход» в промышленности и городах

**Участники:** 168 участников, представляющих российские вузы, научные организации и бизнес-компании из 19 субъектов РФ

**Результаты по каждому из направлений:**

- определены тренды развития тематик научных исследований в фокусе до 2030 и 2050 годов;
- определены наиболее актуальные темы для проведения высокорисковых исследований BlueSkyResearch;
- спроектированы программы подготовки ключевых исследователей школы PI.



ISBN 978-5-9909736-5-7

