

## SYNTHIA™ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОГО РЕТРОСИНТЕЗА

Седов Я.Р.

*Мерк, 115054, Москва, Валовая, 35  
e-mail: Yaroslav.Sedov@external.merckgroup.com*

Компьютерное планирование химического синтеза стало одним из самых сложных вызовов для современной органической химии. Несмотря на десятилетия исследований и множество искусных подходов, упоминания в литературе об успешно просчитанном компьютером пути синтеза и затем реализованном на практике долго не появлялись. Недостатками компьютерной модели, помимо прочего, являлись небольшая база химических превращений, невозможность рационально ориентироваться в огромном многообразии синтетических возможностей и недостаток алгоритмов, предсказывающих как отдельные шаги могут быть совмещены для проведения лучшего или, по крайней мере, возможного синтеза. На основе более чем десятилетних исследований различных последовательностей химических реакций мы разработали модуль de novo ретросинтеза на платформе Synthia (теперь просто Synthia), который объединяет теорию последовательностей реакций, современные высокопроизводительные вычисления, искусственный интеллект и экспертные химические знания для быстрого моделирования синтеза, приводящего к заданным химическим соединениям (в том числе и ранее неописанным). Синтезы восьми разнообразных и значимых с медицинской точки зрения соединений, были впервые рассчитаны программой Synthia без человеческого вмешательства и затем осуществлены в лаборатории. Все рассмотренные синтезы были успешными, и либо улучшали предыдущие подходы, либо стали первым подтвержденным решением на пути к поставленной цели<sup>1</sup>.

### Литература

1. Tomasz Klucznik, Barbara Mikulak-Klucznik, Michael P. McCormack Chem 2018, Pages 522-532.