КОЛЛОИДНЫЙ ЖУРНАЛ, 2025, том 87, № 3, с. 187–201

УДК 541.6

ПРИМЕНЕНИЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ФАЗОВОГО ПОВЕДЕНИЯ ИНТЕРПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ КОМПЛЕКСОВ В ВОДНО-СОЛЕВЫХ СРЕДАХ

© 2025 г. И. В. Григорян[1, 2, *], Л. А. Антюфриева[3], А. П. Григорян[1, 4], А. А. Коригодский[5], Ц. Чень[5], Ш. Ян[5], В. А. Пигарева[6], А. Е. Тищенко[1], Г. Б. Хомутов[1, 2], А. В. Сыбачин[5, *]

[1] Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,

Москва, Ленинские горы, 1-2, 199991 Россия

[2] Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова РАН,

Москва, 125009 Россия

[3]Сколковский институт науки и технологий, Инновационный центр Сколково,

Москва, 121205 Россия

[4]Факультет космических исследований МГУ имени М.В. Ломоносова,

Москва, Ленинские горы, 1-52, 199991 Россия

[5]Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,

Москва, Ленинские горы, 1-3, 199991 Россия

[6]Институт элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова,

Москва, ул. Вавилова, 28-1, 119334 Россия

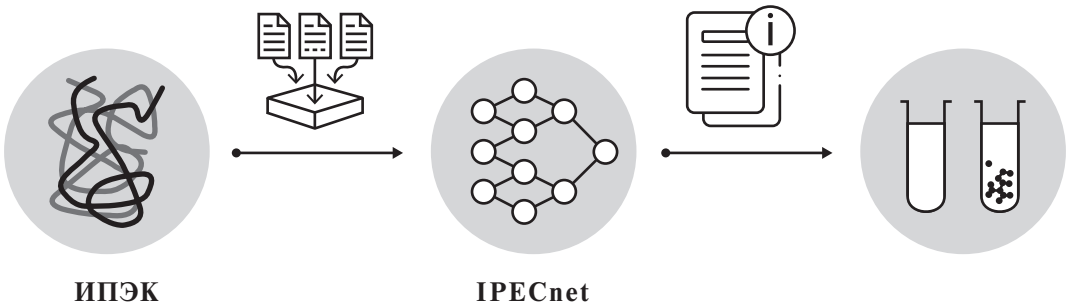
**e-mail: sybatchin@mail.ru*

Поступила в редакцию 30.01.2025 г.
После доработки 02.03.2025 г.
Принята к публикации 05.03.2025 г.

Водно-солевые растворы интерполиэлектролитных комплексов (ИПЭК) представляют собой классический пример «умных» систем, фазовое равновесие в которых регулируется множеством факторов, связанных как с параметрами полимерных компонентов, так и с физическими и химическими свойствами среды. В данной работе представлена модель, созданная на основе машинного обучения, для прогнозирования области существования водорастворимых ИПЭК. Предложен подход независимого учета физико-химических свойств полиэлектролитов и свойств среды. Разработанная модель универсальна и может быть использована для прогнозирования свойств многокомпонентных систем различной химической природы.

Ключевые слова: машинное обучение, ИИ, интерполиэлектролитные комплексы, ИПЭК, IPECnet, polyBERT, фазовые разделения, полиэлектролиты, водно-солевые растворы, растворы полимеров

DOI: 10.31857/S0023291225030028, **EDN:** TAYVPY



ВВЕДЕНИЕ

Водно-солевые растворы интерполиэлектролитных комплексов (ИПЭК) – продуктов взаимодействия противоположно заряженных полиэлектролитов – представляют собою класс так называемых «умных полимеров», поскольку их формирование и физико-химические свойства можно обратимо регулировать путем изменения множества внешних факторов, таких как pH, ионная сила, температура среды и пр. [1–6]. Традиционный интерес к таким «умным полимерам» вызван возможностью их применения в широком спектре задач, включая выделение белков и нуклеиновых кислот, внутриклеточную доставку ДНК, создание биоцидных покрытий, функциональных мембран, использование в качестве структурообразователей сыпучих систем, систем очистки воды и т.д. [1, 4, 7–20]. Электростатические нестехиометрические интерполиэлектролитные комплексы в водно-солевых растворах могут быть сформированы, когда полиэлектролит заданного заряда, именуемый «лиофилизирующим» (ЛПЭ), имеет мольный избыток мономерных звеньев по отношению к противоположно заряженному полиэлектролиту, именуемому «блокирующим» (БПЭ). Данный комплекс содержит как области нескомпенсированного заряда, являющиеся гидрофильными, так и гидрофобные блоки, обусловленные областями, где реализуются кулоновские взаимодействия мономерных звеньев противоположно заряженных полиэлектролитов, а растворимость данных комплексов определяется в первую очередь гидрофобно-гидрофильным балансом системы [1, 3, 5, 18, 21, 22]. Также растворимость комплексов зависит от природы функциональных групп полимеров, плотности заряда на макромолекулах, степеней полимеризации БПЭ и ЛПЭ и их соотношения [3, 23–29]. Отдельно стоит отметить, что одно и то же значение состава ИПЭК, выраженное в молярном отношении мономерных звеньев [БПЭ]/[ЛПЭ], может соответствовать принципиально различной структуре комплекса в зависимости от соотношений длин цепей макромолекул (рис. 1) [30]. Последний фактор является принципиально важным, поскольку энергия Гиббса формирования электростатических комплексов с одинаковым значением [БПЭ]/[ЛПЭ], но с различными значениями степеней полимеризации реагирующих полиэлектролитов будет иметь одинаковую энтальпийную составляющую, т.к. число формирующихся солевых связей одинаково, но при этом различную энтропийную составляющую. В свою очередь, энтропийный фактор является ключевым в процессе формирования ИПЭК [3, 21].

Одним из ключевых свойств, которые позволяют относить ИПЭК к «умным» полимерам, является способность обратимо претерпевать фазовое разделение в водно-солевых средах [1, 6, 25, 30–34]. Это реализуется за счет возможности переноса цепей БПЭ как внутри ИПЭК, так и между отдельными ИПЭК и свободными ЛПЭ [34]. Введение низкомолекулярного электролита в систему, т.е. повышение ионной силы раствора, в первую очередь оказывает влияние на конформацию ЛПЭ, а также частично разрушает интерполиэлектролитные солевые связи [35–40]. В результате в системе начинают сосуществовать стехиометричный водонерастворимый полиэлектролитный комплекс (СПЭК) и водорастворимый комплекс, состав которого может отличаться от исходного состава комплекса в гомогенной системе. Дальнейшее увеличение ионной силы приводит к смещению равновесия в сторону формирования нерастворимого СПЭК [6, 41]. Последующий рост ионной силы в конечном итоге приводит к разрушению интерполиэлектролитных солевых связей и формированию гомогенной системы, в которой ЛПЭ и БПЭ находятся в растворе, но не взаимодействуют [1, 3, 6, 23].

В ходе нашей работы в качестве мы будем анализировать влияние низкомолекулярного электролита NaCl в качестве параметра, определяющего ионную силу раствора. Другим ключевым параметром, влияющим на фазовые равновесия в водно-солевых растворах ИПЭК, является состав исходной смеси φ = [БПЭ]/[ЛПЭ], отражающий соотношение противоположно заряженных полиэлектролитов в системе, в частных случаях состав смеси может соответствовать составу ИПЭК. В ранних исследованиях было продемонстрировано, что при последовательном добавлении раствора БПЭ к раствору ЛПЭ формирование водорастворимого комплекса наблюдается вплоть до критического значения $\varphi < 1$, при этом с ростом значения φ концентрация низкомолекулярного электролита, приводящая к фазовому разделению в системе, значительно снижается [1, 21, 24].

Несмотря на тот факт, что фазовые равновесия в водно-солевых растворах ИПЭК исследованы и описаны во множестве публикаций, предсказание возможности формирования водорастворимого ИПЭК в смесях заданного состава φ и заданной ионной силы все еще является неразрешенной задачей, которая может быть решена путем анализа данных и построения предсказательной модели.

Машинное обучение (Machine Learning, ML) – передовой метод, который существенно меняет современные подходы к исследованиям и разработкам в различных научных областях, включая химию [42–54]. Традиционные методы расчета и моделирования в химии (например, квантово-механические расчеты, молекулярная динамика) зачастую оказываются недостаточно гибкими и производительными для решения сложных многопараметрических задач. Во-первых, химические процессы нередко протекают на разных масштабах (от атомарного до макроскопического), что требует учета большого числа взаимодействующих факторов. Во-вторых, многие явления слабо описываются строгими аналитическими уравнениями, так как содержат нелинейные зависимости

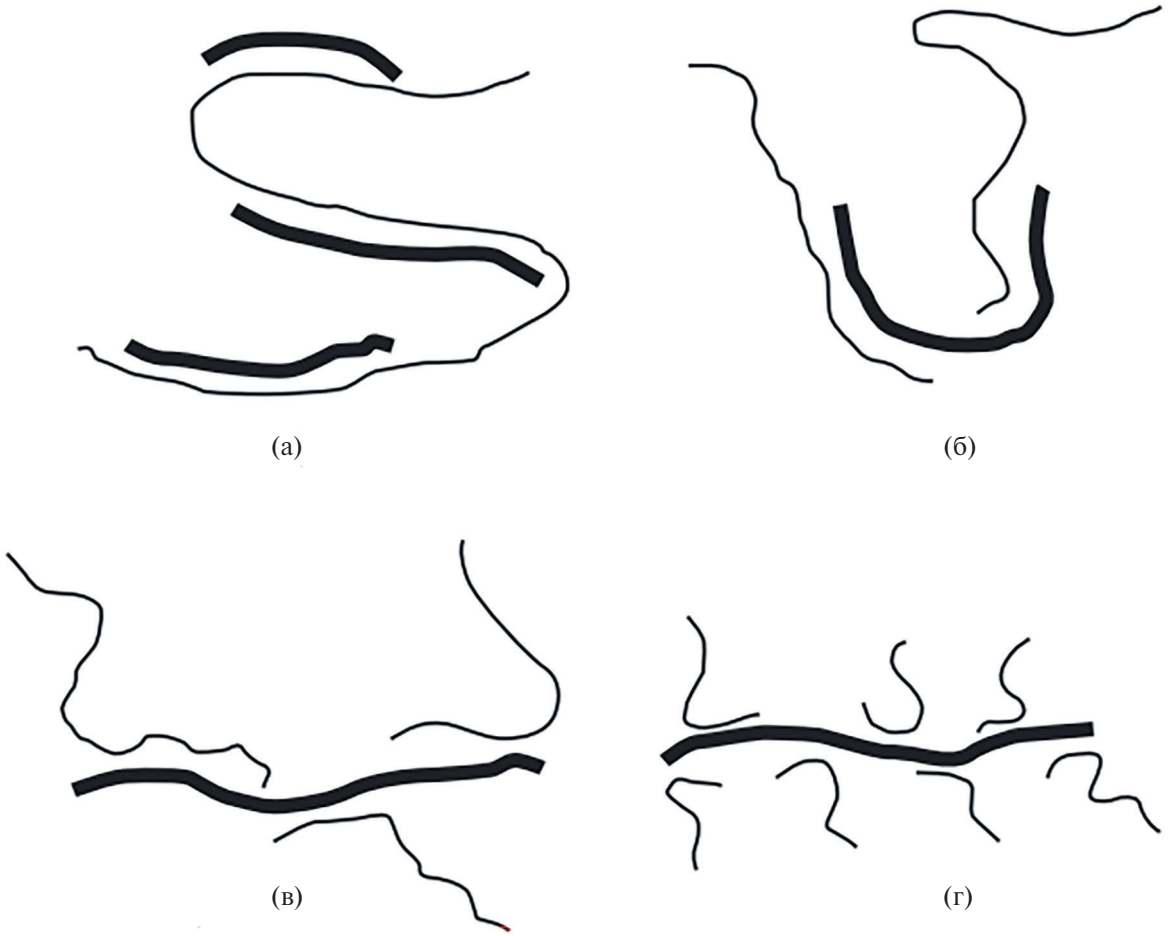


Рис. 1. Схема ИПЭК, сформированных парами ЛПЭ и БПЭ с различными соотношениями степеней полимеризации. Длина цепи ЛПЭ больше длины цепи БПЭ (а), длина цепи ЛПЭ соизмерима с длиной цепи БПЭ (б), длина цепи ЛПЭ меньше длины цепи БПЭ (в) и длина цепи ЛПЭ много меньше длины цепи БПЭ (г). Воспроизведено из статьи [30] с разрешения правообладателя.

и многоступенчатые механизмы. В-третьих, объемы доступных экспериментальных и вычислительных данных стремительно растут, делая классические методы (опирающиеся на заранее известные формулы или упрощенные модели) все менее эффективными в плане времени расчета и точности прогноза.

В отличие от традиционных подходов, машинное обучение (МО) не пытается напрямую вывести универсальную формулу для описания системы. Вместо этого знание о сложных закономерностях «кодируется» в структуре обученной модели (например, нейронной сети), которая формируется на основе реальных данных. Это позволяет обрабатывать и анализировать многомерные, часто неоднородные наборы данных, обнаруживая скрытые корреляции, которые трудно, а порой и невозможно выявить классическими методами. Благодаря этому МО помогает быстрее находить оптимальные решения, прогнозировать свойства материалов или реакций, а также выявлять ключевые факторы, влияющие на эффективность химических процессов. Таким образом, гибкость и способность работать с большими объемами сложных данных делают машинное обучение перспективным инструментом в тех ситуациях, когда традиционные методы оказываются недостаточными.

Использование методов машинного обучения в химических исследованиях и в химической промышленности становится все более востребовано в связи с быстро растущим объемом экспериментальных данных и необходимостью решения задач, требующих низкой затраты вычислительных ресурсов при сохранении высокой точности [55–62]. Машинное обучение открывает новые горизонты для прогнозирования физико-химических свойств веществ, моделирования сложных химических процессов, что позволяет существенно ускорять разработки новых материалов и способствует оптимизации технологий производства.

Использование машинного обучения может значительно снизить временные и финансовые затраты

при выполнении обыденных химических задач. В результате удается автоматизировать рутинные задачи, что делает использование машинного обучения необходимым условием.

Целью данной работы является разработка модели машинного обучения для определения области водорастворимости ИПЭК, образованных различными парами заряженных полиэлектролитов, в зависимости от условий среды формирования комплексов и свойств полимерных компонент. Разработка такой модели позволит сократить время на подбор состава ИПЭК для решения научных и прикладных задач и выявить ключевые факторы, влияющие на их формирование.

Анализ литературы показывает перспективность использования методов машинного обучения в химии для автоматизации обработки данных и прогнозирования свойств молекул и материалов. Однако на данный момент нет работ, решающих проблему прогнозирования свойств ИПЭК с использованием методов машинного обучения. Вероятно, это связано с трудностями, возникающими при попытках применить методы машинного обучения для работы с многокомпонентными системами. Это проявляется в сложности выбора дескрипторов для многокомпонентной системы, а также в отсутствии предварительно обученных моделей.

Наша работа направлена на демонстрацию возможности применения методов машинного обучения для работы с многокомпонентными химическими системами, в частности, для работы с ИПЭК.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Материалы

В работе были использованы полистиролсульфонат натрия (ПССNa) со средними степенями полимеризации 340 и 2430; неалкилированный поли-4-винилпиридин (ПВП) со средними степенями полимеризации 570 и 1520, а также полиаллиламин гидрохлорид (ПАА) со средней степенью полимеризации 190 (все Sigma-Aldrich, США). При приготовлении водных растворов к ПВП был добавлен 1 эквивалент по молям мономерных звеньев HCl. Химические формулы использованных полимеров представлены в Приложении.

Ацетат натрия, хлорид натрия, соляная кислота – все Реахим (Россия) марки ч.д.а. – использовали без дополнительной очистки. Во всех экспериментах была использована бидистиллированная вода.

Методы

Фазовые равновесия в водно-солевых растворах противоположно заряженных полиэлектролитов исследовали методом турбидиметрии по стандартной методике [30]. Турбидиметрические измерения осуществляли на УФ-спектрофотометре ПЭ-5400УФ (Экрос, Россия) в кварцевых кюветах при длине волны 320 нм.

Модель для машинного обучения

ИПЭК является многокомпонентной системой, водорастворимость которой определяется разно- образными свойствами. Хорошо известно, что для предсказания свойств полимеров можно использовать информацию, содержащуюся в химической структуре мономерных звеньев, а также физико-химические свойства самих молекул [63]. Логично предположить, что для предсказания свойства водорастворимости двухкомпонентной полимерной системы, коей является ИПЭК, допустимо использовать физико-химические свойства полимерных компонент комплекса, свойства среды, в которой наблюдается формирование комплексы, а также химические структуры мономерных звеньев полимерных компонент.

Одной из ключевых задач, которую необходимо решить при построении модели, является отсутствие разработанных алгоритмов и предобученных моделей машинного обучения для работы со сложными многокомпонентными химическими системами, в том числе интерполиэлектролитными комплексами. Таким образом, решение задачи предсказания свойств интерполиэлектролитных комплексов побуждает авторов разрабатывать общие подходы работы с многокомпонентными химическими системами с использованием методов машинного обучения.

Еще одной задачей, которую необходимо решить при разработке модели, является проблема размерности. Одновременный учет свойств обеих полимерных компонент комплекса приводит к существенному повышению размерности признакового пространства. В рамках решаемой задачи размерность признакового пространства сопоставима по порядку с размером тренировочной выборки (188 свойств и 296 точек), что осложняет применение классических методов машинного обучения.

Кроме того, отсутствует единый подход по учету как свойств компонент сложной системы, так и свойств среды, общих для системы в целом. Данная проблема становится еще более актуальной при работе с полимерами, отличающимися своей сложной структурой.

Выбор методов, используемых в данном исследовании, определяется вышеописанными трудностями, возникающими при постановке задачи.

Задача предсказания свойства водорастворимости ИПЭК представляет собой задачу бинарной классификации, где 0 – комплекс водорастворим при данных условиях, 1 – комплекс водонерастворим и наблюдается частичное фазовое разделение.

Для решения задачи предсказания свойств индивидуальных полимеров также могут быть использованы разнообразные эмбеддинги химической структуры мономерного звена. Передовым подходом для получения эмбеддингов на основе химии мономера является использование модели трансформера polyBERT [64]. Эта модель используется для предсказания свойств полимеров на основе их структуры и для генерации новых потенциально синтезируемых полимеров с заданными свойствами. На данный момент polyBERT является наиболее значительной моделью для генерации эмбеддингов полимеров. Однако учет химических фингерпринтов предполагает существенное расширение признакового пространства, допустимого при возможности кратного увеличения размера датасета, что не представляется возможным в рамках выполнения нашей задачи.

Таким образом, признаковое пространство формируется на основе физико-химических свойств среды и физико-химических свойств полимеров. Первая категория включает концентрацию низкомолекулярной соли в водном объеме, отношение степеней полимеризации блокирующего и лиофилизирующего полимеров. В данной модели мы ограничиваем данные использованием только одной простой соли – хлорида натрия – как наиболее используемым 1:1 электролитом, добавляемым в интерполиэлектролитные системы.

Вторая категория включает степени полимеризации полимеров, а также физико-химические свойства мономеров блокирующего и лиофилизирующего полимеров, полученные с использованием библиотеки RDKit на основе SMILES представления химической структуры мономера. Выбор признаков представляет собой набор наиболее востребованных признаков из библиотеки RDKit, которые могли быть получены для полимеров, использованных в работе.

Общее число использованных в модели свойств такой природы = 181. Полный список использованных свойств представлен на GitHub проекта (см. Сопроводительные материалы).

Параметры модели

Модели были обучены с использованием Yandex DataSphere в среде c1.8 (8 vCPU, 0 GPU) с 64 Гб оперативной памяти в течение 200 эпох. В качестве функции потерь использовалась BCEWithLogitsLoss. Для защиты от переобучения были использованы оптимизатор AdamW (lr = 1 e-3), планировщик ReduceLROnPlateau (factor = 0.5, patience = 3).

Полносвязная нейронная сеть была построена на основе nn.Linear с функцией активации nn.ReLu() из библиотеки torch. В качестве дополнительного регуляризатора использовался nn.DropOut(0.5). Переобучение моделей контролировалось с использованием TensorBoard(). В DataLoader использовались батчи размером 32.

Контрольная модель

В качестве контрольной модели для решения задачи классификации была исследована модель, основанная на физико-химических характеристиках мономеров и особенностях окружающей среды. Характеристики окружающей среды и физико-химические характеристики мономеров были преобразованы в единый вектор размером (188 × 1), который подавался на входе модели. Модель состоит из трех полносвязных слоев, в качестве функции активации используется ReLU(), DropOut(0.5) в качестве дополнительного метода регуляризации. Качественная структура модели представлена на рис. 2. Подробная структура модели и код представлены на GitHub проекта (см. Приложение).

IPECnet

В данной модели предлагается подход на основе независимого учета признаков каждого полимера. Так, физико-химические свойства каждого полимера после нормализации (StandardScaler()) были независимо поданы на вход полносвязных сетей с целью уменьшения их размерностей. Далее объединенный вектор на основе эмбеддингов каждого полимера был пропущен через единый полносвязный слой и сконкатенирован с вектором свойств среды, который содержит признаки, общие для системы. Объединенный вектор пропускается через полносвязные слои, на выходе которых нормализованный таргет 1 или 0. Качественная структура модели представлена на рис. 3. Подробная структура модели и код представлены на GitHub проекта (см. Приложение).

База данных

В качестве источников данных использовались публикации различных групп за длительный период времени, начиная с 1980-х годов [5, 21, 24, 65–68]. Также были использованы экспериментальные данные из фазовых диаграмм, полученных для пар противоположно заряженных полиэлектролитов, описанных в экспериментальной части (см. данные в Приложении). Параметром, определяющим водорастворимость ИПЭК, был критический состав смеси φ = [БПЭ]/[ЛПЭ], отражающий молярное отношение заряженных мономерных звеньев БПЭ к заряженным звеньям ЛПЭ, которое соответствует разделению фаз в растворе ИПЭК в водно-солевой среде.

Для построения моделей машинного обучения учитывалось взаимодействие полностью заряженных цепочек линейных синтетических полиэлектролитов. Пары противоположно заряженных полиэлектролитов были либо сильными pH-независимыми

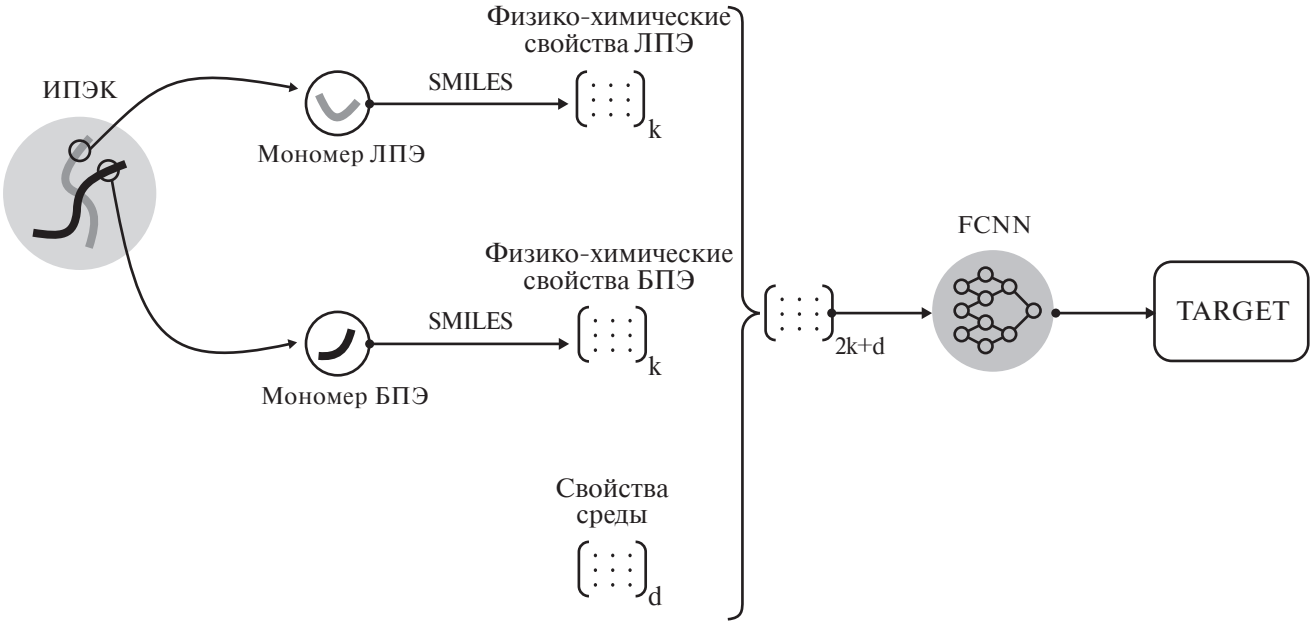


Рис. 2. Принципиальная схема контрольной модели.

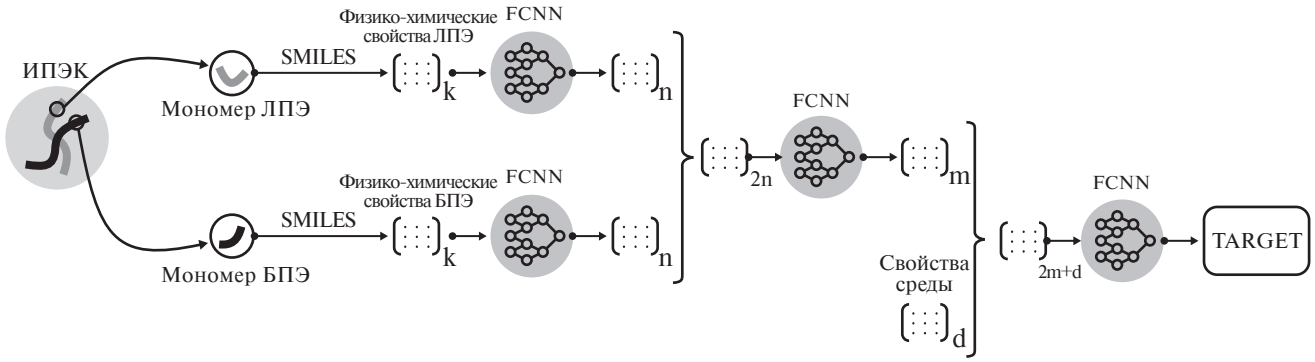


Рис. 3. Принципиальная схема модели IPECnet.

полиэлектролитами пар сильных полиэлектролитов, либо слабыми полиэлектролитами в среде с pH, соответствующим полностью заряженной форме этого слабого полиэлектролита.

База данных содержит 296 критических значений φ – 296 пар поликатион/полианион с физико-химическими свойствами полимеров, химическими структурами мономерных звеньев, а также значением таргета. Данные были отобраны для достижения большей вариативности выборки и обеспечения универсальности модели. Собранный набор данных состоит из данных о полимерах различной химической природы с разной степенью полимеризации, а также об условиях окружающей среды, которые обеспечивают растворимость комплексов в воде. Как поликатионы, так и полианионы представлены в наборе данных (ЛПЭ и БПЕ соответственно), что обеспечило повышение обобщающей способности модели.

Список исследованных в работе полимеров можно найти в табл. 1 в Приложении.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Ограничения модели

Модель была разработана для линейных полностью заряженных пар ЛПЭ и БПЭ. Для сильных полиэлектролитов, таких как поликатионы с кватернизованными аминогруппами или полианионы на основе сульфоната, pH среды не влияет диссоциациию их функциональных групп, но полианионы на основе карбоксилата или поликатионы с первичными, вторичными и третичными аминогруппами остаются полностью заряженными только в сильнощелочных или кислых средах соответственно.

Несмотря на то, что комплексообразование слабого полиэлектролита с противоположно заряженным полиэлектролитом смещает степень ионизации при определенном pH среды, расширяя диапазон pH существования полностью заряженных мономерных звеньев в полимерной цепи [21], в предложенной нами модели для набор данных были использованы только комплексы, сформированные при таких pH среды, которые гарантировали, что как ЛПЭ, так и БПЭ заряжены на 100%. Другими словами, ИПЭК, соответствующие модели, должны быть образованы либо обоими сильными ЛПЭ и БПЭ независимо от pH среды, либо парой сильных и слабых противоположно заряженных полиэлектролитов в кислой среде для слабых поликатионов на основе аминов и в щелочной среде для слабых полианионов соответственно. Формирование ИПЭК на основе двух слабых полиэлектролитов не рассматривалось в ходе машинного обучения.

Анализ данных

Выбор пар поликатионов и полианионов был обусловлен их востребованностью в качестве объектов изучения различными научными группами по всему миру. Кроме того, значительная часть исследуемых полимеров является коммерчески доступными. Общие правила выбора пар полимеров были следующими: структура гомополимера, содержание заряда в каждом мономерном звене, известные степени полимеризации, хлорид натрия в виде простой соли в водной среде.

Для проверки обобщающей способности модели в тестовую выборку была включена пара полиэлектролитов- полиметилметакрилат натрия и поли-*N*-этил-4-винилпиридиний бромид, – как обладающая большой вариативностью выборки по степеням полимеризации ЛПЭ и БПЭ. В дополнение была проанализирована система на основе полидиаллилдиметиламмоний хлорида в качестве ЛПЭ и полиакрилата натрия в качестве БПЭ [65], как объектов, чьи пары ИПЭК не были включены в тренировочную выборку.

Для анализа качества моделей были использованы классические метрики классификации AUC, F1-score и Accuracy с оптимальными порогами. Для оценки значимости различий в показателях различных моделей был использован подход, основанный на бутстрэп, таким образом были получены 90%-доверительные интервалы для каждой метрики. Результаты сравнения метрик моделей представлены ниже на рис. 4.

Обе рассмотренные модели продемонстрировали относительно высокое качество. При этом обнаружены значимые различия между средними значениями метрик Bootstrap-выборок ($p < 0.05$) согласно непараметрическому U-критерию Манна-Уитни. Так, контрольная модель, основанная на объединении физико-химических свойств мономеров и свойств среды без независимого учета свойств полимеров, уступает модели IPECnet, что может говорить о важности независимого учета свойств компонент системы, а также о важности добавления вектора свойств среды на последних слоях в ходе обучения модели.

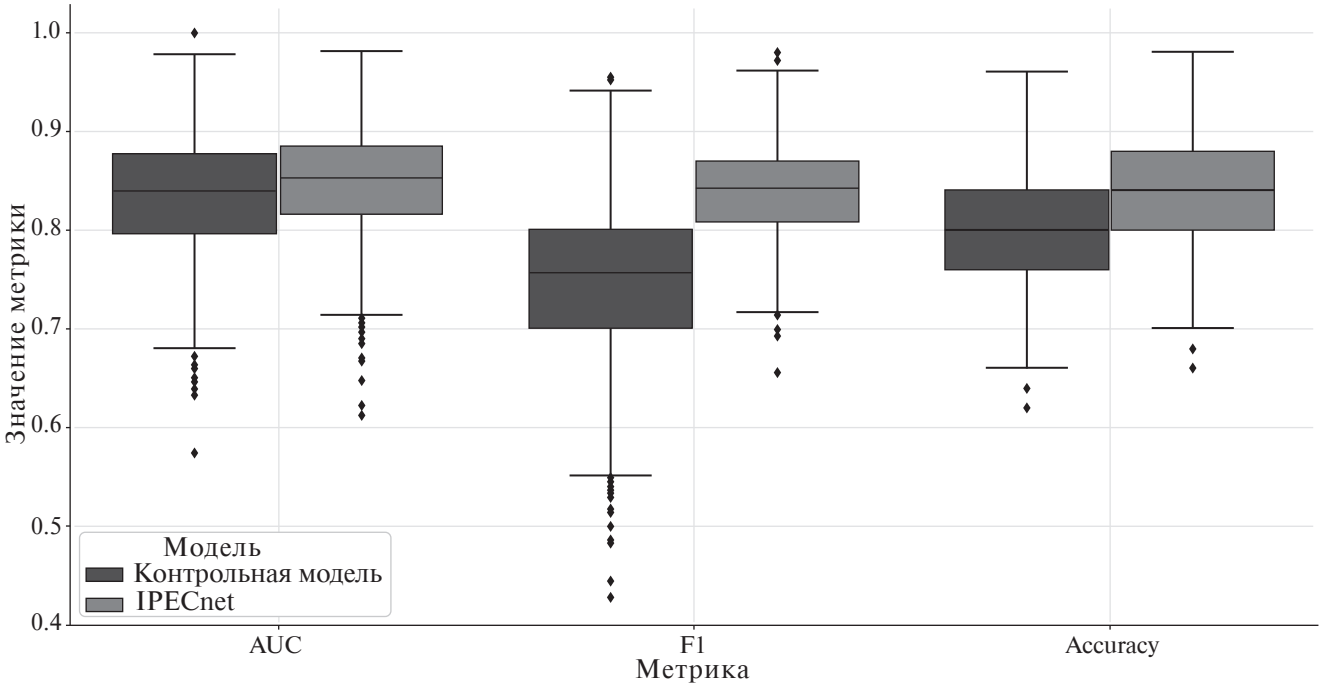


Рис. 4. Значения метрик AUC, F1-score, Accuracy для Контрольной модели и IPECnet.

Модель IPECnet предназначена для решения задачи прогнозирования растворимости ИПЭК в воде для решения широкого круга прикладных задач. Однако описанные в данной работе подходы для независимого учета физико-химической структуры полимеров и их химической структуры, по мнению авторов, могут быть применены и для решения других задач прогнозирования свойств многокомпонентных химических систем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе работы удалось построить две модели, с достаточной точностью позволяющие предсказывать свойство водорастворимости ИПЭК.

Результаты анализа моделей продемонстрировали, что модель IPECnet превосходит контрольную модель по всем исследованным метрикам: AUC, F1-score и Accuracy. Средние значения метрик у модели IPECnet значимо выше, что свидетельствует об ее лучшей обобщающей способности в задаче бинарной классификации. Кроме того, модель IPECnet показывает меньший разброс значений, что указывает на ее более высокую стабильность.

Контрольная модель, напротив, демонстрирует большую вариативность метрик и наличие выбросов с низкими значениями, что свидетельствует о нестабильности ее работы. Особенно заметны слабые результаты контрольной модели по метрике F1-score, которая отражает баланс между точностью и полнотой, а также наличие низких значений AUC в отдельных случаях.

Для оценки F1-score и Accuracy используются пороги (трэшхолды), подобранные на основе валидационной выборки. Модель IPECnet имеет порог 0.5, что делает ее оптимальной для работы с несбалансированными выборками. В то же время для контрольной модели оптимальный порог составляет 0.7, что говорит о завышенном Precision и заниженном Recall.

Вопрос о необходимости использования при построении модели эмбеддингов химических структур полимерных компонент остается открытым и может быть дополнительно исследован с увеличением количества данных в наборе данных.

Анализ полученных результатов позволяет авторам предположить, что, несмотря на ограниченный объем экспериментальных данных и сложности системы, можно достичь необходимой обобщающей способности модели при решении узкопрофильной задачи предсказания водорастворимости ИПЭК и без рассмотрения химической структуры мономеров с использованием специфических дескрипторов, в частности polyBERT. Согласно литературным данным, это может быть связано, среди прочего, с большим влиянием свойств среды на формирование водорастворимой системы или появление фазового разделения. Другими словами, параметр окружающей среды (например, концентрация соли) в большей степени определяет возможность образования водорастворимого комплекса для выбранной пары полиэлектролитов. Однако модель IPECnet построена с учетом возможности модификации для использования всех параметров, которые могут повлиять на работу системы, что может представлять интерес для исследователей в области применения искусственного интеллекта в химии полимеров и многокомпонентных системах. Открытый код модели, ссылка на который приведена в приложении, позволяет исследователям самостоятельно дополнять массив данных для обучения модели за счет собственных результатов, повышая таким образом точность рассчетов.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Некоммерческого Фонда развития науки и образования «Интеллект». Молодой ученый И.В. Григорян благодарит за поддержку Фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС», а также Фонд содействия инновациям. Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова.

Часть работы, включающая в себя экспериментальное исследование фазового равновесия в системах, выполнена в рамках Государственного задания № 075-00276-25-00 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации с использованием научного оборудования Центра коллективного пользования ИНЭОС РАН.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Izumrudov V.A., Mussabayeva B.K., Kassymova Z.S., Klivenko A.N., Orazzhanova L.K.* Interpolyelectrolyte complexes: advances and prospects of application // Russ. Chem. Rev. 2019. V. 88. P. 1046–1062. https://doi.org/10.1070/RCR4877
2. *Fares H.M., Schlenoff J.B.* Equilibrium overcompensation in polyelectrolyte complexes // Macromolecules. 2017. V. 50. № 10. P. 3968–3978. https://doi.org/10.1021/acs.macromol.7b00665
3. *Fu J., Schlenoff J.B.* Driving forces for oppositely charged polyion association in aqueous solutions: enthalpic, entropic, but not electrostatic // J. Am. Chem. Soc. 2016. V. 138. № 3. P. 980–990. https://doi.org/10.1021/jacs.5b11878
4. *Meka V.S., Sing M.K.G., Pichika M.R., Nali S.R., Kolapalli V.R.M., Kesharwani P.* A comprehensive

review on polyelectrolyte complexes // Drug Discov. Today. 2017. V. 22. № 11. P. 1697–1706.
https://doi.org/10.1016/j.drudis.2017.06.008

5. *Dautzenberg H.* Polyelectrolyte complex formation in highly aggregating systems. 1. Effect of salt: polyelectrolyte complex formation in the presence of NaCl // Macromolecules. 1997. V. 30. № 25. P. 7810–7815.
https://doi.org/10.1021/ma970803f
6. *Kabanov V. A.* Fundamentals of polyelectrolyte complexes in solution and the bulk // In: Decher G., Schlenoff J. B. (Eds.) Multilayer thin films: sequential assembly of nanocomposite materials. Weinheim: Wiley-VCH. 2003. P. 47–86.
https://doi.org/10.1002/3527600574.ch2
7. *Prajapati B.G., Sharma J.B., Sharma S., Trivedi N.D., Gaur M., Kapoor D.U.* Harnessing polyelectrolyte complexes for precision cancer targeting: a comprehensive review // Med Oncol. 2024. V. 41. № 6. P. 145.
https://doi.org/10.1007/s12032-024-02354-0
8. *Bertin A.* Polyelectrolyte complexes of DNA and polycations as gene delivery vectors // In: Müller M. (Ed.) Polyelectrolyte complexes in the dispersed and solid state II. Advances in polymer science. Berlin: Springer. 2013. V. 256. P. 155–188.
https://doi.org/10.1007/12_2013_218
9. *Durmaz E.N., Baig M.I., Willott J.D., de Vos W.M.* Polyelectrolyte complex membranes via salinity change induced aqueous phase separation // ACS Appl. Polym. Mater. 2020. V. 2. № 7. P. 2612–2621.
https://doi.org/10.1021/acsapm.0c00255
10. *Chen J., He R., Chen H., Hu B., Tokay B., Zhang Y.-B., He T.* Kinetic aspects of salinity stability of layer-by-layer polyelectrolyte nanofiltration membranes: Impact of soaking time, types of ions and crosslinking // J. Membrane Sci. 2024. V. 709. P. 123087.
https://doi.org/10.1016/j.memsci.2024.123087
11. *Bediako J.K., El Ouardi Y., Massima Mouele E.S., Mensah B., Repo E.* Polyelectrolyte and polyelectrolyte complex-incorporated adsorbents in water and wastewater remediation – A review of recent advances // Chemosphere. 2023. V. 325. P. 138418.
https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.138418
12. *Li J., van Ewijk G., van Dijken D.J., van der Gucht J., de Vos W.* Single-step application of polyelectrolyte complex films as oxygen barrier coatings // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2021. V. 13. № 18. P. 21844–21853.
https://doi.org/10.1021/acsami.1c05031
13. *Panova I.G., Sybachin A.V., Spiridonov V.V., Kydralieva K., Jorobekova S., Zezin A.B., Yaroslavov A.A.* Non-stoichiometric interpolyelectrolyte complexes: Promising candidates for protection of soils // Geoderma. 2017. V. 307. P. 91–97.
https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2017.08.001
14. *Chen M., Xu R., Wu Y., Xiong J., Keleş S.Z., Hankins N.P.* Application of polyelectrolytes for contaminant removal and recovery during water and wastewater treatment: A critical review // J. Water Proc. Eng. 2024. V. 64. P. 105528.
https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2024.105528
15. *Zezin A.B., Mikheikin S.V., Rogacheva V.B., Zansokhova M.F., Sybachin A.V., Yaroslavov A.A.* Polymeric stabilizers for protection of soil and ground against wind and water erosion // Adv. Colloid Interface Sci. 2015. V. 226. P. 17–23.
https://doi.org/10.1016/j.cis.2015.06.006
16. *Akintola J., Chen Y., Digby Z.A., Schlenoff J.B.* Antifouling coatings from glassy polyelectrolyte complex films // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2023. V. 15. № 43. P. 50058–50068.
https://doi.org/10.1021/acsami.3c11744
17. *Grigoriev D.O., Kohler K., Skorb E., Shchukin D.G., Mohwald H.* Polyelectrolyte complexes as a ''smart'' depot for self-healing anticorrosion coatings // Soft Matter. 2009. V. 5. № 7. P. 1426–1432.
https://doi.org/10.1039/B815147D
18. *Pigareva V.A., Senchikhin I.N., Bolshakova A.V., Sybachin A.V.* Modification of polydiallyldimethylammonium chloride with sodium polystyrenesulfonate dramatically changes the resistance of polymer-based coatings towards wash-off from both hydrophilic and hydrophobic surfaces // Polymers. 2022. V. 14. № 6. P. 1247–1260.
https://doi.org/10.3390/polym14061247
19. *Mkrtchyan K.V., Pigareva V.A., Zezina E.A., Kuznetsova O.A., Semenova A.A., Yushina Y.K., Tolordava E.R., Grudistova M.A., Sybachin A.V., Klimov D.I., Abramchuk S.S., Yaroslavov A.A., Zezin A.A.* Preparation of biocidal nanocomposites in x-ray irradiated interpolyelectrolyte complexes of polyacrylic acid and polyethylenimine with Ag-ions // Polymers. 2022. V. 14. № 20. P. 4417.
https://doi.org/10.3390/polym14204417
20. *Donath E., Sukhorukov G. B., Caruso F., Davis S.A., Möhwald H.* Novel hollow polymer shells by colloid-templated assembly of polyelectrolytes // Angew. Chem. Int. Ed. 1998. V. 37. № 16. P. 2201–2205.
https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3773(19980904)37:16%3C2201::AID-ANIE2201%3E3.0.CO;2-E
21. *Pergushov D.V., Zezin A.A., Zezin A.B., Müller A.H.E.* Advanced functional structures based on interpolyelectrolyte complexes // In: Müller M. (Ed.) Polyelectrolyte complexes in the dispersed and solid state I. Advances in polymer science. Berlin: Springer. 2013. V. 255. P. 129–160.
https://doi.org/10.1007/12_2012_182
22. *Tirrell M.* Polyelectrolyte complexes: Fluid or solid? // ACS Cent Sci. 2018. V. 4. № 5. P. 532–533.
https://doi.org/10.1021/acscentsci.8b00284

23. *Kabanov V.A.* Polyelectrolyte complexes in solution and in bulk // Russ. Chem. Rev. 2005. V. 74. № 1. P. 3–20.
https://doi.org/10.1070/RC2005V074N01ABEH001165

24. *Mende M., Buchhammer H.M., Schwarz S., Petzold G., Jaeger W.* The stability of polyelectrolyte complex systems of poly(diallydimethyl-ammonium chloride) with different polyanions // Macromol. Symp. 2004. V. 211. № 1. P. 121–133.
https://doi.org/10.1002/masy.200450709

25. *Izumrudov V.A., Paraschuk V.V., Sybachin A.V.* Controlled phase separations in solutions of polyelectrolyte complexes—Potential for gene delivery // J. Drug Delivery Sci. Technol. 2006. V. 16. № 4. P. 267–274.
https://doi.org/10.1016/S1773-2247(06)50049-8

26. *Izumrudov V.A., Lim S.K.* The effect of charge and length of a blocking polycation on phase separation in aqueous salt-containing solutions of nonstoichiometric polyelectrolyte complexes // Polym. Sci. Ser. B. 1998. V. 40. P. 459–465.

27. *Pergushov D.V., Izumrudov V.A., Zezin A.B., Kabanov V.A.* Stability of interpolyelectrolyte complexes in aqueous saline solutions – effect of the degree of polymerization of polyions // Polym. Sci. Ser. B. 1995. V. 37. P. 1739–1746.

28. *Davydova O.V., Zelikin A.N., Kargov S.I., Izumrudov V.A.* Conformation of polyelectrolyte chains in dilute aqueous solutions investigated by conductometry, 1. influence of the degree of polymerization on the conformation of flexible vinylic polyanions and rigid native DNA // Macromol. Chem. Phys. 2001. V. 202. № 8. P. 1361–1367.
https://doi.org/10.1002/1521-3935(20010501)202:8%3C1361::AID-MACP1361%3E3.0.CO;2-N

29. *Zhang Y., Yildirim E., Antila H.S., Valenzuela L.D., Sammalkorpi M., Lutkenhaus J.L.* The influence of ionic strength and mixing ratio on the colloidal stability of PDAC/PSS polyelectrolyte complexes // Soft Matter. 2015. V. 11. № 37. P. 7392–7401.
https://doi.org/10.1039/c5sm01184a

30. *Izumrudov V.A., Sybachin A.V.* Phase separation in solutions of polyelectrolyte complexes: The decisive effect of a host polyion // Polym. Sci. Ser. A. 2006. V. 48. № 10. P. 1098–10104.
https://doi.org/10.1134/S0965545X06100117

31. *Konyal E., Cengiz H.Y., Müftüler A., Deligöz H.* Monitoring the salt stability and solvent swelling behavior of PAH-based polyelectrolyte multilayers by quartz crystal microbalance with dissipation // Polym. Eng. Sci. 2023. V. 63. № 10. P. 3328–3342.
https://doi.org/10.1002/pen.26447

32. *Jha P.K., Desai P.S., Li J., Larson R.G.* pH and salt effects on the associative phase separation of oppositely charged polyelectrolytes // Polymers. 2014. V. 6. № 5. P. 1414–1436.
https://doi.org/10.3390/polym6051414

33. *Saikaew R., Meesorn W., Zoppe J.O., Weder C., Dubas S.T.* Influence of the salt concentration on the properties of salt-free polyelectrolyte complex membranes // Macromol. Mater. Eng. 2019. V. 304. № 9. P. 1900245.
https://doi.org/10.1002/mame.201900245

34. *Изумрудов В.А., Касаикин В.А, Ермакова Л.Н., Зезин А.Б.* Исследование водорастворимых полиэлектролитных комплексов неэквимольного состава // Высокомол. соед. 1978. Т. А20. №2. С. 400–406.

35. *Perry S.L., Li Y., Priftis D., Leon L., Tirrell M.* The effect of salt on the complex coacervation of vinyl polyelectrolytes // Polymers. 2014. V. 6. № 6. P. 1756–1772.
https://doi.org/10.3390/polym6061756

36. *Stevens M., Plimpton S.* The effect of added salt on polyelectrolyte structure // Eur. Phys. J. B. 1998. V. 2. P. 341–345.
https://doi.org/10.1007/s100510050257

37. *Carrillo J.M.Y., Dobrynin A.V.* Polyelectrolytes in salt solutions: molecular dynamics simulations // Macromolecules. 2011. V. 44. № 14. P. 5798–5816.
https://doi.org/10.1021/ma2007943

38. *Chituru S.V., Das S., Majumdar S.* Impact of specific ion effects and electrostatic interactions on a polyelectrolyte-polyampholyte complex // Discov. Chem. Eng. 2024. V. 4. P. 6.
https://doi.org/10.1007/s43938-024-00043-y

39. *Zelikin A.N., Litmanovich A.A., Paraschuk V.V., Sybatchin A.V., Izumrudov V.A.* Conformational changes of aliphatic ionenes in water-salt solutions as a factor controlling stability of their complexes with calf thymus DNA // Macromolecules. 2003. V. 36. № 3. P. 2066–2071.
https://doi.org/10.1021/ma021361x

40. *Pergushov D.V., Izumrudov V.A., Zezin A.B., Kabanov V.A.* Effect of low-molecular-mass salts on the behaviour of water-soluble nonstoichiometric polyelectrolyte complexes // Poly. Sci. Ser. B. 1993. V. 35. № 7. P. 844–849.

41. *Izumrudov V.A., Kharenko O.A., Kharenko A.V., Gulyayeva Zh.G., Kasaikin V.A., Zezin A.B., Kabanov V.A.* Behaviour of non-stoichiometric polyelectrolyte complexes in aqueous salt solutions // Polymer Science U.S.S.R. 1980. V. 22. P. 767–776.

42. *Digby Z.A., Yang M., Lteif S., Schlenoff J.B.* Salt resistance as a measure of the strength of polyelectrolyte complexation // Macromolecules. 2022. V. 55. № 3. P. 978–988.
https://doi.org/10.1021/acs.macromol.1c02151

43. *Boiko D.A., Kozlov K.S., Burykina J.V., Ilyushenkova V.V., Ananikov V.P.* Fully automated unconstrained analysis of high-resolution mass spectrometry data with machine learning // J. Am. Chem. Soc. 2022. V. 144. № 32. P. 14590–14606.
https://doi.org/10.1021/jacs.2c03631

44. *Shi Y.-F., Yang Z.-X., Ma S., Kang P.-L., Shang C., Hu P., Liu Z.-P.* Machine learning for chemistry: basics and applications // Engineering. 2023. V. 27. P. 70–83.
https://doi.org/10.1016/j.eng.2023.04.013

45. *LeCun Y., Bengio Y., Hinton G.* Deep learning // Nature. 2015. V. 521. P. 436–444.
https://doi.org/10.1038/nature14539

46. *Jumper J., Evans R., Pritzel A., Green T., Figurnov M., Ronneberger O., Tunyasuvunakool K., Bates R., Žídek A., Potapenko A., et al.* Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold // Nature. 2021. V. 596. P. 583–589.
https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2

47. *Dobbelaere M.R., Plehiers P.P., van de Vijver R., Stevens C.V., van Geem K.M.* Machine learning in chemical engineering: strengths, weaknesses, opportunities, and threats // Engineering. 2021. V. 7. № 9. P. 1201–1211.
https://doi.org/10.1016/j.eng.2021.03.019

48. *Zhou T., Song Z., Sundmacher K.* Big Data creates new opportunities for materials research: a review on methods and applications of machine learning for materials design // Engineering. 2019. V. 5. № 6. P. 1017–1026.
https://doi.org/10.1016/j.eng.2019.02.011

49. *Chen W., Iyer A., Bostanabad R.* Data centric design: a new approach to design of microstructural material systems // Engineering. 2022. V. 10. P. 89–98.
https://doi.org/10.1016/j.eng.2021.05.022

50. *Delaney J.S.* ESOL: Estimating aqueous solubility directly from molecular structure // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 2004. V. 44. № 3. P. 1000–1005.
https://doi.org/10.1021/ci034243x

51. *Thebelt A., Wiebe J., Kronqvist J., Tsay C., Misener R.* Maximizing information from chemical engineering data sets: Applications to machine learning // Chem. Eng. Sci. 2022. V. 252. P. 117469.
https://doi.org/10.1016/j.ces.2022.117469

52. *Keith J.A., Vassilev-Galindo V., Cheng B., Chmiela S., Gastegger M., Müller K.-R., Tkatchenko A.* Combining machine learning and computational chemistry for predictive insights into chemical systems // Chem. Rev. 2021. V. 121. № 16. P. 9816–9872.
https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00107

53. *Lengauer T., Sander O., Sierra S., Thielen A., Kaiser R.* Bioinformatics prediction of HIV coreceptor usage // Nature Biotechnology. 2007. V. 25. P. 1407–1410.
https://doi.org/10.1038/nbt1371

54. *Senior A.W., Evans R., Jumper J., Kirkpatrick J., Sifre L., Green T., Qin C., Žídek A., Nelson A.W., Bridgland A., et al.* Improved protein structure prediction using potentials from deep learning // Nature. 2020. V. 577. P. 706–710.
https://doi.org/10.1038/s41586-019-1923-7

55. *Tkatchenko A.* Machine learning for chemical discovery // *Nature Communications*. 2020. V. 11. P. 4125.
https://doi.org/10.1038/s41467-020-17844-8

56. *Coe J. P.* Machine learning configuration interaction // J. Chem. Theory Comput. 2018. V. 14. № 11. P. 5739–5749.
https://doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00849

57. *Zaspel P., Huang B., Harbrecht H., von Lilienfeld O.A.* Boosting quantum machine learning models with a multilevel combination technique: Pople diagrams revisited // J. Chem. Theory Comput. 2019. V. 15. № 3. P. 1546–1559.
https://doi.org/10.48550/arXiv.1808.02799

58. *Snyder J. C., Rupp M., Hansen K., Blooston L., Müller K.-R., Burke K.* Orbital-free bond breaking via machine learning // J. Chem. Phys. 2013. V. 139. P. 224104.
https://doi.org/10.1063/1.4834075

59. *Snyder J.C., Rupp M., Hansen K., Müller K.-R., Burke K.* Finding density functionals with machine learning // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108. P. 253002.
https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.253002

60. *Bogojeski M., Vogt-Maranto L., Tuckerman M. E., Müller K.-R., Burke K.* Quantum chemical accuracy from density functional approximations via machine learning // Nat. Commun. 2020. V. 11. P. 5223.
https://doi.org/10.1038/s41467-020-19093-1

61. *de la Torre J. G., Hern J.G., Lopez Martinez M.C.* Prediction of solution properties of flexible-chain polymers // Eur. J. Phys. 2008. V. 29. P. 945–956.
https://doi.org/10.1088/0143-0807/29/5/008

62. *Gribova V., Navalikhina A., Lysenko O., Calligaro C., Lebaudy E., Deiber L., Senger B., Lavalle P., Vrana N.E.* Prediction of coating thickness for polyelectrolyte multilayers via machine learning // Sci Rep. 2021. V. 11. P. 18702.
https://doi.org/10.1038/s41598-021-98170-x

63. *Dral P. O., von Lilienfeld O. A., Thiel W.* Machine learning of parameters for accurate semiempirical quantum chemical calculations // J. Chem. Theory Comput. 2015. V. 11. № 5. P. 2120–2125.
https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00141

64. *Kuenneth C., Ramprasad R.* polyBERT: A chemical language model to enable fully machine-driven ultrafast polymer informatics // Nature Communications. 2023. V. 14. P. 4099.
https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-2116998/v1

65. *Pigareva V.A., Bolshakova A.V., Marina V.I., Sybachin A.V.* Water-soluble interpolyelectrolyte complex based on poly(diallyldimethylammonium chloride) and sodium polyacrylate as a component for creating stable biocidal coatings // Colloid Journal. 2023. V. 85. P. 433–441.
https://doi.org/10.1134/S1061933X23600100

66. *Dautzenberg H., Karibyants N.* Polyelectrolyte complex formation in highly aggregating systems: Effect of salt – response to subsequent addition of NaCl // Macromolecular Chemistry and Physics. 1999. V. 200. P. 118–125.
https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3935(19990101)200:1%3C118::AID-MACP118%3E3.0.CO;2-K

67. *Gulyaeva Z.G., Aldoshina I.V., Zansokhova M.F., Rogacheva V.B., Zezin A.B., Kabanov V.A.* Phase separation in water-salt solutions of polyelectrolyte complexes // Polymer Science U.S.S.R. 1990. V. 32. P. 714–722.

68. *Jukić J., Korade K., Milisav A.-M., Marion I.D., Kovačević D.* Ion-specific and solvent effects on PDADMA–PSS complexation and multilayer formation // Colloids and Interfaces. 2021. V. 5. № 3. P. 38.
https://doi.org/10.3390/colloids5030038

APPLICATION OF MACHINE LEARNING FOR PREDICTING PHASE BEHAVIOR OF INTERPOLYELECTROLYTE COMPLEXES IN WATER–SALT MEDIA

I. V. Grigoryan[a, b], L. A. Antiufrieva[c], A. P. Grigoryan[a, d], A. A. Korigodsky[e], C. Junyang[e], Y. Shuxiong[e], V. A. Pigareva[f], A. E. Tishchenko[a], G. B. Khomutov[a, b], A. V. Sybachin[e]

[a] *Department of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 199991 Russia*

[b] *Kotelnikov Institute of Radioengineering and Electronics, Russian Academy of Sciences, Moscow, 125009 Russia*

[c] *Skolkovo Institute of Science and Technology, Skolkovo Innovation Center, Moscow, 121205 Russia*

[d] *Department of Space Research, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 199991 Russia*

[e] *Department of Chemistry, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 199991 Russia*

[f] *Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119334 Russia*

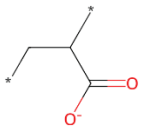
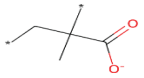
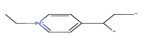
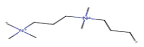
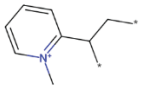
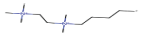
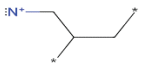
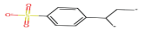
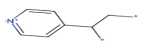
Water-salt solutions of interpolyelectrolyte complexes (IPEC) are a classic example of “smart” systems, the phase equilibrium in which is regulated by many factors associated with both the parameters of the polymer components and the physical and chemical properties of the environment. This paper presents a model created on the basis of machine learning for predicting the region of existence of water-soluble IPECs. An approach is proposed for independently taking into account the physicochemical properties of polyelectrolytes and the properties of the environment. The developed model is universal and can be used to predict the properties of multicomponent systems of various chemical natures.

Keywords: Machine learning, AI, interpolyelectrolyte complexes, IPEC, IPECnet, phase separation, polyelectrolytes, water-salt media, polymer solutions

ПРИЛОЖЕНИЕ

Датасет и структуры модели доступны в репозитории проекта на GitHub https://github.com/IlyaBoss2414/IPECnet

Таблица 1. Структурные формулы полиэлектролитов, использованные в работе

PC/PA index	Полимер	
1	Полиакрилат натрия [*]C(C[*])C(=O)[O-]	
2	Полиметакрилат натрия [*]C(C)(C[*])C(=O)[O-]	
3	Поли-*N*-этил-4-винилпиридиний бромид [*]CC([*])c1cc[n+](CC)cc1	
4	3,3-ионен бромид [*][N+](C)(C)CCC[N+](C)(C)CCC[*]	
5	Поли-*N*-винилпиридиний метилсульфат [*]CC([*])c1[n+](C)c(C)ccc1	
6	2,4-ионен бромид [*][N+](C)(C)CC[N+](C)(C)CCCC[*]	
7	2,8-ионе бромид [*][N+](C)(C)CC[N+](C)(C)CCCCCCCC[*]	
8	Полиаллиламин гидрохлорид [*]CC([*])C[N+]	
9	Полистиролсульфонат натрия [*]CC([*])c1ccc(S(=O)(=O)[O-])cc1	
10	Поли-4-винилпиридиний гидрохлорид [*]CC([*])c1cc[n+]cc1	

Фазовые диаграммы для пар противоположно заряженных полиэлектролитов, представленных в Экспериментальной части.

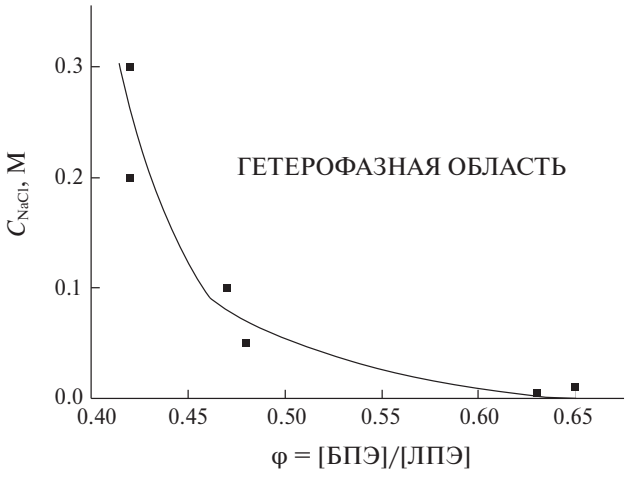


Рис. П1. Зависимость концентрации соли NaCl, вызывающей фазовое разделение в водно-солевых растворах ИПЭК различного состава. БПЭ – ПАА, ЛПЭ – ПССNa со степенью полимеризации 340. Ацетатный буфер, pH 5.

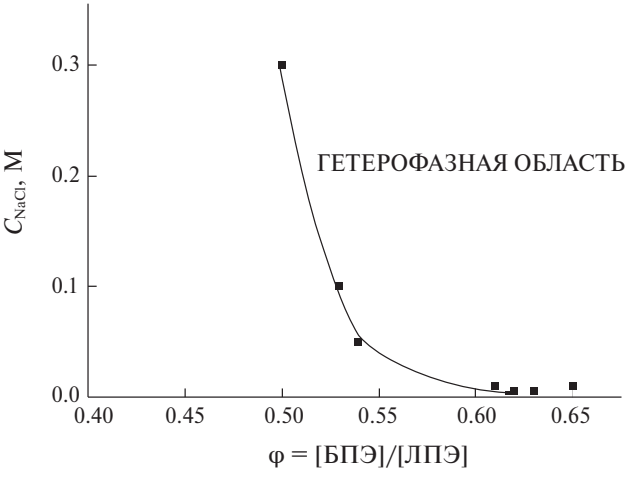


Рис. П3. Зависимость концентрации соли NaCl, вызывающей фазовое разделение в водно-солевых растворах ИПЭК различного состава смеси. БПЭ - ПЭП со степенью полимеризации 1520, ЛПЭ – ПСCNa со степенью полимеризации 2430. Ацетатный буфер, pH 5.

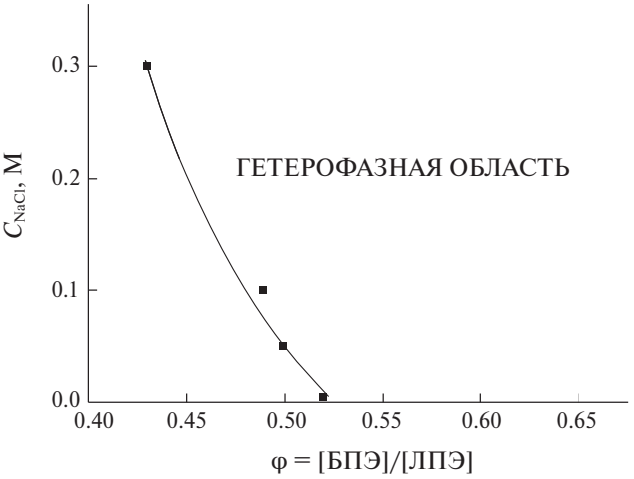


Рис. П2. Зависимость концентрации соли NaCl, вызывающей фазовое разделение в водно-солевых растворах ИПЭК различного состава смеси. БПЭ – ПЭП со степенью полимеризации 570, ЛПЭ – ПСCNa со степенью полимеризации 2430. Ацетатный буфер, pH 5.

Детализированные схемы моделей, представленных в работе

“Контрольная модель” “IPECnet”

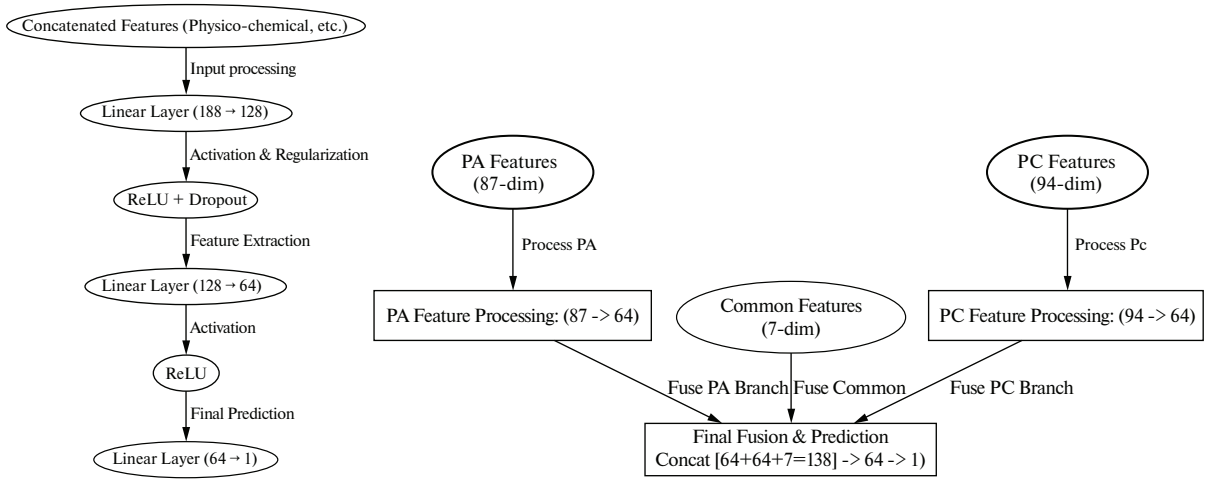


Рис. П4. Схемы моделей “Контрольная модель” (слева) и “IPECnet” (справа).