

**INTEGRATION OF COMPUTER CHEMISTRY AND ARTIFICIAL INTELLIGENCE:
PROSPECTS FOR THE DEVELOPMENT OF SCIENCE AND TECHNOLOGY****N.T.Manapov, N.N. Kozhabekova***Abai Kazakh national pedagogical university, Almaty, Kazakhstan***E-mail: nurlanm66@mail.ru*

Abstract. This article discusses the integration of computational chemistry and artificial intelligence (AI), their role in science and technology, as well as the possibilities of their application in the fields of scientific research and education. An individual analysis of branches of related fields of computer chemistry and AI is carried out. Computer technologies are considered as an important tool in modern science and the educational process, as they provide new opportunities for researchers, students and teachers, and contribute to the development of professional and scientific tasks. Also, the information space and computer programs allow you to quickly find and process the necessary data, as well as carry out individual work. The interconnection of AI and computational chemistry is the basis of transformative solutions in scientific research and industrial innovation. Combining these areas makes it possible to model molecules and chemical processes, develop new drugs and materials, ensure environmental sustainability, and deeply interpret complex chemical, biological, and ecological systems. Therefore, the potential of computational chemistry and AI remains an important resource for scientific research and technological progress. In conclusion, the article notes that the combination of these two industries plays a major role in determining innovative breakthroughs and new solutions.

Keywords: artificial intelligence (AI), computer chemistry, quantum chemistry, materials science, innovative materials, medicines, modeling, molecular interactions, environmental sustainability.

Manapov Nurlan Tursymbekovich	<i>Senior lecturer; E-mail: nurlanm66@mail.ru</i>
Kozhabekova Nazym Nurkdyrovna	<i>Candidate of Chemical Sciences; E-mail: kojabekova@mail.ru</i>

**КОМПЬЮТЕРЛІК ХИМИЯ МЕН ЖАСАНДЫ ИНТЕЛЛЕКТІНІҢ ҮЙЛЕСІМІ: ҒЫЛЫМ
МЕН ТЕХНОЛОГИЯНЫҢ БОЛАШАҒЫНА БАҒЫТ****Н.Т. Манапов, Н.Н. Қожабекова***Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,***E-mail: nurlanm66@mail.ru*

Citation: Manapov N.T., Kozhabekova N.N. Integration Of Computer Chemistry And Artificial Intelligence: Prospects For The Development Of Science And Technology. *Chem. J. Kaz.*, **2025**, 3(91), 155-170. (In Kaz.). DOI: <https://doi.org/10.51580/2025-3.2710-1185.44>

Түйіндемe. Бұл мақалада компьютерлік химия мен жасанды интеллектінің (ЖИ) интеграциясы, олардың ғылым мен технологиядағы рөлі және ғылыми-зерттеу мен білім беру бағыттарындағы қолдану мүмкіндіктері талқыланады. Компьютерлік химия мен ЖИ-нің түйісу салаларының тармақтарына жеке-жеке талдау жасалынады. Компьютерлік технологиялар заманауи ғылым мен білім беру үрдісінде маңызды құрал ретінде қарастырылады, өйткені олар ғылыми-зерттеу қызметкерлерінің, білім алушылар мен оқытушылардың шығармашылығына жаңа мүмкіндіктер ұсынып, кәсіби және ғылыми міндеттерін дамытуға септігін тигізеді. Сондай-ақ, ақпараттық желілер мен компьютерлік бағдарламалар қажетті мәліметтерді жылдам табу мен өңдеуге, сонымен қатар жекелей жұмыс жүргізуіне мүмкіндік береді. ЖИ мен компьютерлік химияның өзара байланысы ғылыми зерттеулердегі және өнеркәсіптік инновацияларда трансформациялық шешімдердің негізі болып табылады. Бұл салалардың бірігуі молекулалар мен химиялық процестерді модельдеу, жаңа дәрілік препараттар мен материалдарды әзірлеу, экологиялық тұрақтылықты қамтамасыз ету, сондай-ақ күрделі химиялық, биологиялық және экологиялық жүйелерді терең түсіндіруге мүмкіндік береді. Сондықтан, компьютерлік химия мен ЖИ-нің әлеуеті ғылыми-зерттеу мен технологиялық прогресс үшін маңызды ресурс болып қала береді. Мақала қорытындысында, осы екі саланың бірігуі инновациялық серпілістер мен жаңа шешімдерді анықтауда үлкен рөл атқаратыны атап өтіледі.

Түйінді сөздер: жасанды интеллект (ЖИ), компьютерлік химия, кванттық химия, материалтану, инновациялық материалдар, дәрілік заттар, модельдеу, молекулалық өзара әрекеттесу, экологиялық тұрақтылық.

Манапов Нұрлан Тұрсымбекұлы

аға оқытушы

Қожабекова Назым Нұрқыдырқызы

химия ғылымдарының кандидаты

1. Кіріспе.

Қазіргі уақытта химия ғылымы мен технологияның даму қарқыны ақпараттық технологиялардың, соның ішінде компьютерлік химия мен жасанды интеллектінің (ЖИ) қолданысымен тығыз байланысты болып тұр. Компьютерлік химия химиялық қосылыстар мен процестерді зерттей отырып, оларды модельдеу үшін компьютерлік құралдар мен химияға арналған компьютерлік бағдарламаларды қолданады. Ал ЖИ – алгоритмдерді жетілдіру мен мәліметтерді өңдеу мүмкіндіктерін жақсартады. Бұл екі сала арасындағы интеграция ғылыми-зерттеу жұмыстарында, білім беру мен өнеркәсіптік жаңашылдықтарда ауқымды өзгерістер мен жаңа мүмкіндіктер туғызуда.

Білім беру процесінде компьютерлік технологиялар мен бағдарламаларды қолдану ғылыми-зерттеу қызметкерлерінің, оқытушылар мен білім алушылардың шығармашылығына кең жол ашады, сондай-ақ танымдық процестерді сапалы түрде өзгертеді. Заманауи зерттеулер ақпараттық технологиялардың мүмкіндігі арқылы зерттеу нысандарының және білім алудың тиімділігін арттыруда. Әлеуметтік желі ресурстары мен компьютерлік бағдарламалар ғылыми зерттеушілердің, білім алушылардың шығармашылық жұмыстарын дамытуда маңызды рөл атқарады.

Аталған мақалада компьютерлік химия мен ЖИ-нің біріктірілген әлеуеті, олардың ғылым мен практикалық салалардағы ықпалы және ғылыми-зерттеу нәтижелерінің қоғамға деген пайдасы қарастырылады. Бұл

ғылыми-зерттеулер инновациялық жобаларды жүзеге асыру мен тыңғылықты есептеу әдістерінің дамуына негіз болды, соның нәтижесінде ғылыми прогресс онтайландырылған процесс пен жаңа шешімдерді туғызды. Қарқынды дамып келе жатқан жасанды интеллекті (ЖИ) мен компьютерлік химияның өзара тоғысуы заманауи инновациялардың дамуына септігін тигізері сөзсіз. Бұл мақалада компьютерлік химия мен ЖИ-нің бір-бірімен байланысы, олардың біріктірілген әлеуеті мен түрлендіруші мүмкіншіліктері қарастырылады.

Мақаланың негізгі мақсаты – компьютерлік химия мен ЖИ-нің тиімді интеграциясы арқылы өрістейтін инновациялық шешімдердің маңыздылығын, артықшылықтарын және болашағын көрсету.

2. Әдістер.

Қазіргі уақытта ғылыми-зерттеу жұмыстарының едәуір бөлігі қоғам өмірінің, ғылымның, білімнің әртүрлі салаларын компьютерлендіру және ақпараттандыру мәселесіне арналған. Мысал ретінде, педагогикалық жоғары оқу орындарының студенттері мен оқытушыларының кәсіби қызметте компьютерлік технологияларды пайдалануға даярлау мәселесі А.А. Абдукадыров, В.Д. Алексеев, В.П. Беспалько, Ю.С. Брановский, Я.А. Ваграменко, В.М. Заварыкина, В.А. Извозчикова, Э.И. Кузнецова, М.П. Лапчика, И.А. Румянцева, Ю.К. Кузнецовтың және т. б. ғалымдардың еңбектерінде көрініс тапты [2].

Студенттің компьютер алдында жұмыс жасауы, базалық білімді меңгеруге кететін уақытын едәуір қысқартады. Білім алушы интернет байланыстары арқылы керекті ақпараттарды табу, алу және оларды өңдеуге машықтанады [3].

Компьютерлік ақпараттық технологияларды ғылыми-зерттеу мен білім беру саласында қолдану, бір жағынан, ғылыми-зерттеу қызметкерлерінің, оқытушылар мен білім алушылардың шығармашылығына кең мүмкіндіктер ашады, кәсіби және ғылыми-зерттеу міндеттерін шешу барысындағы мүмкіндіктерін кеңейтеді, ал екінші жағынан, педагогтарға кәсіби қызметінде компьютерлік технологияларды пайдалану дайындығы тұрғысынан оқытуға басқа да сапалы жоғары талаптар қояды [1].

Жаһандық білім беру жүйесіне енудің ең жылдам жолы – жаһандық ақпараттық қоғамдағы коммуникация үлгісі болып саналатын ғылыми-зерттеу мен білім беру мекемелерінің ғаламдық желіні пайдалануына жағдай жасау. Ғылыми-зерттеу жұмысын орындау барысында әлеуметтік желіні пайдалану көптеген мәселелерді шешуді жеңілдетеді [4].

Химияны оқыту тәжірибесінде ақпараттық технологияларды қолдаудың әртүрлі формаларын қолдануға болады. Ең қарапайым және тиімді әдіс - бұл үлкен әлеуетке ие және білім беру процесінің мазмұны мен ұйымдастырушылық ерекшеліктеріне сүйене отырып, оларды қолдану әдістерін өзгертуге мүмкіндік беретін дайын бағдарламалық өнімдерді пайдалану [6].

Қазіргі уақытта классикалық компьютерлік химия алгоритмдері де, терең оқыту тәсілдері де химияның барлық салаларына еніп кетті: органикалық және бейорганикалық химия, физикалық химия, зат құрылысы, катализ, дәрілік химия, аналитикалық химия, материалтану және т.б. [9].

Химияның «Компьютерлік химия» саласы химияға арналған компьютерлік бағдарламалардың көмегімен оқыту әдісінің бағыттарының бірі және компьютерлік модельдеуді қолданатын кванттық химияның бір тармағы.

Кванттық химия - молекулалық құрылымдар мен химиялық құбылыстарды түсіну үшін кванттық механиканы қолдануға бағытталған химияның ерекше бір саласы.

Компьютерлік химия молекулалардың қасиеттерін, олардың әрекетін анықтау, зерттеу және болжау үшін әртүрлі тәсілдер қолданады [7].

Дәлме-дәл есептеулер кластерлері мен суперкомпьютерлер компьютерлік химияның тиімділігі мен дәлдігін арттыруда маңызды рөл атқарады, оның трансформациялық жетістіктері үшін ЖИ құрылымдарымен интеграциясын қолдайды.

Компьютерлік химия мен жасанды интеллектінің түйісуі, инновациялық жаңашылдықтардың қарқынын үдете бастады. Атап айтсақ, бейорганикалық және органикалық полимерлер алу, дәрі-дәрмек жасау мен медицина саласында, материалтануда, молекулалық биологияда, гендік инженерияда, қоршаған ортаны талдау барысында кеңінен қолдануда.

Енді осы айтылған салалардың тармақтарына нақты мысалдармен, компьютерлік химияның есептеу әдістері жасанды интеллектімен бірлесе отырып зерттейтін бағыттарына толықтай тоқтала кетсек:

1. Компьютерлік химия мен ЖИ-нің түйіндесуі материалтану мен техниканың жаңа дәуіріне жол ашты, бұл бейімделген қасиеттері бар озық материалдарды жобалауға және оңтайландыруға мүмкіндік берді. Материалдардың сипаттамасын модельдеу және құрылымдық тұрақтылығын болжау арқылы зерттеушілер заманауи энергия көздеріне, аэроғарыштық қолданбаларға және тұрақты инфрақұрылымға арналған инновациялық материалдарды әзірлеуді жеделдете түсті. Компьютерлік химия мен ЖИ-нің құрылымдарының қиылысуы материалдардың келесі буынын жасауды жеделдетіп, осы салаларда бұрын-соңды болмаған жетістіктерге жол ашты. Атап айтсақ: озық материалдардың жобалануы, биоматериалдар, күрделі жүйелерді модельдеу, энергетикалық материалдар, металдар мен қорытпалар.

Бұл мысалдар компьютерлік химия мен жасанды интеллектінің интеграциясының материалтану мен техникадағы жаңашылдықтар мен тиімділікті арттыру үшін маңызды рөл атқаратынын көрсетеді;

2. Қоршаған ортаға әртүрлі факторлардың тигізетін әсерлерін анықтауға және оны зерттеуге жасанды интеллекті мен компьютерлік химия айтарлықтай қолданыс тапты. Жасанды интеллект негізіндегі модельдеу мен болжамды модельдеуді біріктіру қоршаған ортаны бағалауды түбегейлі

өзгертеді, экологиялық қауіптерді азайту және тұрақты тәжірибелерді ілгерілету үшін жаңа құралдарды ұсынады.

Жалпы алғанда, компьютерлік химия мен жасанды интеллектінің қоршаған ортаны зерттеудегі интеграциясы экологиялық зерттеулердің нәтижелілігін арттырып, қоршаған орта мәселелерін саралауға мүмкіндік береді. Бұл саладағы инновациялар экологиялық жүйелердің тұрақтылығын қамтамасыз етуге және адам денсаулығына, экожүйелерге және табиғатқа әсер ететін факторларды басқаруға бағытталған зерттеулердің негізін қалауда;

3. Хемоинформатика – компьютерлік химияның есептеу әдістері жасанды интелекстімен біріге отырып, есептеу бағытындағы заңдылықтары мен түзетулерді анықтауға көмектесетін химиялық ақпараттың үлкен деректер жиынын талдау үшін қолданылады. Хемоинформатика – компьютерлік химия мен жасанды интеллектінің (ЖИ) бірігуі арқылы химиялық мәліметтерді талдаудың арнайы бағыты.

Осы арқылы хемоинформатика зерттеушілерге химиялық шешімдерді қабылдау процесін тездетіп, молекулалық дизайны мен дәрі-дәрмектерді дамытуда жаңа мүмкіндіктер ұсынды;

4. Буып-түйетін тұтыну өнімдері – орау немесе қаптау материалдарын жобалау және оларды сынау кезінде қолдану. Бұл процесстің бірнеше негізгі кезеңдері бар: материалдардың таңдауын зерттеу, модельдеу және симуляция, дизайны және прототиптеу, сынау және талдау, экологиялық аспектілер.

Осылайша, буып-түйетін тұтыну өнімдері үшін орау немесе қаптау материалдарын жобалау мен сынау кезінде компьютерлік химияның есептеу әдістері тұтынушылардың қажеттіліктерін, өнімнің сапасын және экологияны ескеруді қамтамасыз етеді;

5. Қажетті дәрі-дәрмектерді айқындап және оның қасиеттерін анықтау бағытында, сонымен қатар фармацевтикалық зерттеулер мен дайындамалар саласында ЖИ-мен бірге компьютерлік химия дәрілік заттарды жасау үрдісінде төңкеріс жасады. Молекулалық өзара әрекеттесулерін талдау және байланыстыру ұқсастықтарын есептеуге байланысты болжамды модельдерді пайдалану арқылы, жасалатын дәрі-дәрмектің құрамына кіретін компоненттерді анықтау үшін жұмсалатын уақытты едәуір қысқартты. Компьютерлік химия мен ЖИ-нің бұл бірігуі жаман аурулар мен медициналық мәселелерді шешуге жаңа үміт ұсынып, өмірді сақтайтын дәрілердің дамуын жеделдетуге септігін тигізуде;

6. Протеин/антиденелер инженериясы - компьютерлік химияның есептеу әдістері ақуыз тізбегін жобалау және ақуыз құрылымдарын болжау үшін қолданылады.

Бұл инженерияның негізінде жиналған мәліметтер мен инновациялық алгоритмдер, ақуыздардың қасиеттерін дәл болжау мен олардың функционалдық мүмкіндіктерін оптимизациялауда қолданылатын тиімді құралдар ретінде қызмет етеді;

7. Ферменттік инженерия — әртүрлі қолданбаларға, соның ішінде өнеркәсіптік процестерге арналған ферменттерді жасауға көмектеседі. Компьютерлік химияның моделі мен симуляциясы арқылы ферменттердің құрылымдық және функционалдық қасиеттері терең зерттеледі, бұл ферменттердің «оптимизациясын» жүргізуге мүмкіндік береді;

8. Органикалық электроника - компьютерлік химияның есептеу әдістері жасанды интелектімен біріге отырып, органикалық электронды материалдарды жобалау мен талдауда қолданылады. Компьютерлік химияның есептеу әдістері мен жасанды интеллект (ЖИ) бұл салада органикалық электронды материалдарды жобалау мен талдау үшін маңызды рөл атқарады.

Сонымен қатар, компьютерлік химияның және ЖИ-нің бірігуі материалдарды дамытудың уақытын қысқартып, жаңа функционалдық қасиеттерді ашуға мүмкіндік береді. Ол жаңа зерттеулердің бағытын анықтау, өндірістік процестерді жетілдіру және энергетикалық тиімді құрылғыларды әзірлеу үшін пайдалы құрал болып табылады. Органикалық электроникадағы компьютерлік химия мен ЖИ-нің үйлесуі бұл салада жаңа инновациялық шешімдер мен технологияларды дамытуға ықпал етуде;

9. Катализ дизайны - каталитикалық жүйелерді талдау және жаңа катализаторларды әзірлеу үшін қолданылады. Катализ дизайны компьютерлік химия мен ЖИ-нің көмегімен каталитикалық жүйелердің зерттелуін және жаңа катализаторлардың әзірленуін тиімді түрде жүзеге асыруға мүмкіндік береді;

10. Полимер дизайны – өзіне тән қасиеттері бар полимерлерді жобалауға көмектеседі. Полимер дизайны - бұл компьютерлік химияның есептеу әдістері мен жасанды интеллекттің көмегімен полимерлерді жобалау процесі.

Осы әдістер мен механизмдердің интеграциясы полимер дизайнынан күтілетін жаңа инновацияларды дамытуға мүмкіндік береді, бұл өз кезегінде жаңа материалдардың жасауына және олардың қолдану салаларының кеңеюіне әкеп соғады;

11. Беттік химия - компьютерлік химияның есептеу әдістері жасанды интелектімен біріге отырып, беттердегі молекулалардың әрекетін зерттеу және болжау үшін қолданылады.

Беттік химия, компьютерлік химия мен жасанды интеллектті біріктіре отырып, молекулалардың әрекеттерін тереңірек зерттеуге және болжауға мүмкіндік береді, бұл материалдардың жаңа функциялары мен өнімдерін инновациялық түрде дамытуға ықпал етеді;

12. Энергияны алу және сақтау - энергияны сақтау сияқты құбылыстардың негізінде жатқан негізгі физикалық процестерді зерттеу үшін қолданылады. Энергияның алынуы мен сақталуының ғылыми негіздері мен практикалық қолданулары туралы келесі мәліметтерді айтып өтсек болады: физикалық-химиялық процестер, энергияның сақталуы, жалпы энергия жүйелері, энергияның алмасуы, қолдану салалары.

13. Жартылай өткізгіштер - компьютерлік химияның есептеу әдістері жартылай өткізгіштерді жобалау мен талдауда қолданылады. Жартылай өткізгіштерді жобалау мен талдауда компьютерлік химияның есептеу әдістері мен ЖИ маңызды рөл атқарады. Бұл әдістер арқылы материалдардың электронды қасиеттері мен құрылымдары нақтыланып, олардың жартылай өткізгіштік қасиеттері болжау арқылы оңтайландырылуы мүмкін. Мысалы, компьютерлік модельдер әдетте атомдар арасындағы байланыстарды, электрондық күй-жүйелерді және олардың өзара әрекеттесуін зерттеуге мүмкіндік береді. Сонымен қатар, есептеу әдістері мен ЖИ әртүрлі қосылыстардың ықтимал қасиеттерін салыстырып, ең тиімді нұсқаны таңдау үшін қолданылады, бұл жаңа заттарды алуға және өндіріс процесін оңтайландыруға септігін тигізеді;

14. Металдар, қорытпалар және керамика дизайны - металдарды, қорытпаларды және керамикаларды жобалауға және талдауға көмектеседі. Металдар, қорытпалар және керамика дизайны саласында компьютерлік химияның есептеу әдістері мен ЖИ металдар мен материалдардың құрылымын, қасиеттерін және тұрақтылығын болжау үшін кеңінен пайдаланылады. Сонымен қатар, қорытпалар мен керамикалардағы атомдық орналасуларды оңтайландыру арқылы олардың механикалық және физикалық қасиеттерін жақсартуға бағытталған дизайн жүргізіледі;

15. Масс-спектрометрия - компьютерлік химия молекулалық спектрлер мен энергетиканың тәжірибелік анықтамаларын бағалау үшін және химиялық реакциялардың реакция жолдары мен өнімдерін түсіндіру үшін қолданылады. Масс-спектрометрияда компьютерлік химия молекулалық спектрлердің аналитикалық талдауын жүргізу үшін кеңінен қолданылады. Бұл әдіс арқылы алынған эксперименттік спектрлердің деректерін модельдеу және болжау жүзеге асырылады, ол молекулалардың құрылымын және олардың энергия деңгейлерін анықтауға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, компьютерлік химия реакция жолдарын моделдеу арқылы реакцияның әртүрлі мүмкін болатын механизмдерін және өнімдерін түсінуге көмектеседі. Бұл тәсіл химиялық реакциялардың барысын зерттеу кезінде, реакцияға қатысатын молекулалардың электронды құрылымдары мен энергия деңгейлерін болжау және салыстыру арқылы, нақты реакция жолдарын анықтауда маңызды рөл атқарады. Нәтижесінде, масс-спектрометрия деректерін интерпретациялау дәлдігі артып, химиялық қосылыстар мен реакциялар туралы толық әрі нақты ақпарат алынады.

Бұл қолданбалар компьютерлік химияның есептеу әдістері жасанды интелектімен біріге отырып, кең ауқымындағы күрделі есептерді шешудегі әмбебаптығын көрсетеді. Бұл сала технологияның жетістіктерімен және жаңа теориялармен дамуын жалғастыруда, болашақта қолдану аясы кеңейе түседі.

Компьютерлік химияның жасанды интелектімен бірігуіндегі артықшылықтары мен кемшіліктеріне жеке-жеке тоқталсақ.

Компьютерлік химияның артықшылықтары:

- Молекуланың қасиетін дәл болжау мүмкіншіліктері;

• Дәрі-дәрмектік заттарды әзірлеуді және материалдарды оңтайландыруды жеделдетуі;

• Күрделі химиялық және биологиялық, экологиялық жүйелерді тереңірек түсіндіруі.

Кемшіліктері мен шектеулері:

- Жетілдірілген модельдеудің есептеу қарқындылығы;
- ЖИ көмегімен шешім қабылдаудың этикалық аспектілері;
- Күрделі болжамды модельдердің интерпретациялануы;
- Бастапқы деректерді дайындаумен байланысты мәселелер;
- Деректерге қате аңдатпа;
- Химиялық реакциялар туралы ақпаратты дұрыс емес автоматты өңдеу.

Компьютерлік химия мен ЖИ-нің түйіндесуі этикалық тұрғыдан, әсіресе болжамды модельдер негізінде шешім қабылдау контекстінде мұқият қарастыруды талап етеді. Ашықтықты, есептеудің дәлдігін және этикалық қадағалауды қамтамасыз ету ЖИ-ге қолдайтын компьютерлік химияның мүмкіншілігін пайдалану, біржақтылыққа жол бермеу және осы салаларда жауапты түрде қолдануды қамтамасыз ету үшін өте маңызды.

Химиктер компьютерлік химияны молекулалардың сипаттамаларын зерттеу және жаңа заттардың қасиеттерін болжау үшін компьютерлік модельдеу мен жасанды интеллектінің мүмкіншіліктерін пайдаланады. Заттарды компьютерлік химияның есептеу тәсілдерімен зерттеу барысында, компьютерлік химияның есептеу тәсілдері күрделі химиялық теңдеулерді шешу және реакция модельдеріндегі дәлсіздіктермен күресу сияқты маңызды қиындықтарға тап болады. Сонымен қатар, дәл модельдеу үшін қажетті деректердің үлкен көлемі айтарлықтай кедергі жасайды.

Осы кедергілерге қарамастан, компьютерлік химияның есептеу тәсілдері мен жасанды интеллектінің мүмкіншіліктері инновациялық препараттарды, материалдарды және өнеркәсіптік процестерді дамыту үшін маңызды ресурс болып қала береді. Ол ғылыми прогресс үшін маңызды және есептеу тәсілдерінсіз қол жетімсіз болатын молекулалық өзара әрекеттесулерді тереңірек түсінуге және болжауға мүмкіндік береді.

3. Қорытынды.

Қорытындылай келе, компьютерлік химия мен ЖИ-нің үйлесуі немесе тоғысуы ғылыми-зерттеу жұмыстарында, өнеркәсіптік инновацияларда және тұрақты технологиялық жетістіктерде өзінің нәтижелерін бере бастады. Жетілдірілген немесе нақты есептеу әдістері мен болжамды алгоритмдер арасындағы байланысты пайдалана отырып, есептеу химиясы фармацевтикада, материалтануда, экологиялық тұрақтылықта, биологияда және басқа да ғылымның салаларында трансформациялық шешімдердің негізгі мүмкіндігіне айналды. Компьютерлік химия жасанды интеллектімен бірге осы бірлескен байланыстың шексіз әлеуетін зерттеуді жалғастыра отырып, болашақ инновациялық серпілістер мен дәстүрлі шектеулерден асып түсетін шешімдерді анықтауға ықпал ете бастады.

Жасанды интеллекті мен компьютерлік химияның үздіксіз дамып келе жатқан әлемінде, олардың болжамдық модельдеулері мен алгоритмдік дәлдіктерінің бірігуі, ғылыми жаңашылдықтары мен технологиялық инновациялары үйлесімді түрде революциялық жетістіктерге алып келуде.

Компьютерлік химияның болашағы молекулалардың, химиялық процестердің қасиеттері мен сипаттамаларын дәлірек болжау үшін компьютерлік есептеу мен жасанды интеллект интеграциясы арқылы елеулі жетістіктерге жетуге дайын. Неғұрлым күрделі алгоритмдер мен есептеу әдістерінің дамуы модельдеу жылдамдығы мен дәлдігін арттырады деп күтілуде. Сонымен қатар, бұл бірін-бірі толықтыратын сала, есептеу қуатын арттырудан және кванттық-химиялық есептеулерді пайдаланудың тиімділігі мен химиялық мәселелерді шешу тәсілін түбегейлі өзгертуі мүмкін. Биоинформатика, фармацевтика, экология және материалтану сияқты салалармен пәнаралық байланыс компьютерлік химия мен жасанды интеллектінің қолдану аясын одан әрі кеңейтіп, оны ғылыми-зерттеулер мен әзірлемелердің одан да ажырамас бөлігіне айналдырады деген сенімдеміз.

ИНТЕГРАЦИЯ КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИИ И ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА: ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ

Н.Т. Манапов, Н.Н. Кожобекова

Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан

**E-mail: nurlanm66@mail.ru*

Резюме. В этой статье обсуждается интеграция компьютерной химии и искусственного интеллекта (ИИ), их роль в науке и технологиях, а также возможности их применения в областях научных исследований и образования. Проводится индивидуальный анализ ветвей смежных областей компьютерной химии и ИИ. Компьютерные технологии рассматриваются как важный инструмент в современной науке и образовательном процессе, поскольку они предоставляют новые возможности для научных исследователей, обучающихся и преподавателей, способствует развитию профессиональных и научных задач. Также информационное пространство и компьютерные программы позволяют быстро находить и обрабатывать необходимые данные, а также проводить индивидуальную работу. Взаимосвязь ИИ и компьютерной химии является основой преобразующих решений в научных исследованиях и промышленных инновациях. Объединение этих областей позволяет моделировать молекулы и химические процессы, разрабатывать новые лекарственные препараты и материалы, обеспечивать экологическую устойчивость, а также глубоко интерпретировать сложные химические, биологические и экологические системы. Поэтому потенциал компьютерной химии и ИИ остается важным ресурсом для научных исследований и технологического прогресса. В заключении статьи отмечается, что объединение этих двух отраслей играет большую роль в определении инновационных прорывов и новых решений.

Ключевые слова: искусственный интеллект (ИИ), компьютерная химия, квантовая химия, материаловедение, инновационные материалы, лекарства, моделирование, молекулярные взаимодействия, экологическая устойчивость.

Манапов Нурлан Турсымбекович

Старший преподаватель,

Кожобекова Назым Нуркыдыровна

Кандидат химических наук,

Әдебиеттер тізімі:

1. Антошкина Е.Г., Григорьева Е.А. Организация внеаудиторной самостоятельной работы студентов при изучении дисциплин химического цикла. Современная высшая школа: инновационный аспект. **2011.** № 4. С. 31–33.
2. Кит Дж.А. и др. Объединение машинного обучения и компьютерной химии для предсказательного анализа химических систем. *Химические обзоры.* **2021.** Т. 121. №. 16. С. 9816–9872.
3. Дорофеев М.В., Стунесева Ю.Б. Использование сервисов всемирной паутины в процессе обучения Химия в школе. **2010.** № 8. С. 31.
4. Манапов Н.Т. Химия біліміндегі жаңа ақпараттық технологиялардың рөлі. Вестник КазНПУ им.Абая, сер. «Естественно-географические науки» **2010.** №3(25). С.121-124.
5. А.А. Агишева, Ж.Б. Чилдебаев, Н.Т. Манапов Значение навыков работы в сети интернет в решении задач НИРС Вестник КазНПУ им.Абая, сер. «Естественно-географические науки» **2011.** №1(27). С.85-85.
6. Искусственный интеллект: применение в химии: Пер. с англ. Д. Смит, Ч. Риз, Дж. Стюарт и др. Под ред. Т. Пирса, Б. Хони. М.: Мир, **1988.** 430 с, ил. ISBN 5-03-001213-3
7. Құрманәлиев М.Қ., Рыскалиева А.Қ. Химияны оқытудың қазіргі технологиялары. Алматы, **2013.** Б. 216-220.
8. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная хими М.: СОЛОН-Пресс, 2005. 536 с.
9. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. - М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2011. 224 с.: ил. (Серия «Библиотека студентов»).
10. Как используют искусственный интеллект в химии 10.11.2022. [Электрон-ный ресурс]. Режим доступа: <https://dzen.ru/a/Y2ymTcdU2G3jfWFW> (дата обращения 03.03.2025).
11. Галкина, Е. Н. Применение нейросетей в процессе обучения химии Е. Н. Галкина Мир науки. Педагогика и психология. **2024.** Т. 12. № 2. URL: <https://mir-nauki.com/PDF/51PDMN224.pdf>
12. Беттік және коллоидтық химия. Ұстанымдары мен қолданылуы [Текст]: оқулық К. С. Бирди ; Ауд. Қ. Ж. Әбдиев. - Алматы : Дәуір, **2013.** 388 б. (ҚР Білім және ғылым министрлігі). ISBN 9786012174410
13. Валиева М. Е. Лаборатория компьютерного дизайна материалов: что может дать USPEX? Биомолекула от 03.07.2016. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://biomolecula.ru/articles/laboratoriia-kompiuternogo-dizaina-materialov-chto-mozhet-dat-uspex> (дата обращения 20.05.2025).
14. Митрофанов А.А. и др. Искусственный интеллект в химии и материаловедении. Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://teach-in.ru/file/synopsis/pdf/ai-in-chemistry-and-materials-science-M-3.pdf> (дата обращения 20.05.2025).
15. Рупали Дабас Двадцать способов, которыми ИИ развивает химию. Chemistry ORLD от 17.10.2024. [Электронный ресурс]. Режим доступа: [https://www.chemistryworld.com/news/twenty-ways-ai-is-advancing hemistry/4020269.article](https://www.chemistryworld.com/news/twenty-ways-ai-is-advancing-hemistry/4020269.article) (дата обращения 21.05.2025).
16. Бэк С. и др. Ускоренное развитие химической науки с помощью ИИ Digital Discovery. **2024.** Т. 3. №. 1. С. 23-33.
17. Чжэн Чжэн и др. ChatGPT помощник по химии для анализа текста и прогнозирования синтеза MOF Журнал Американского химического общества. **2023.** Т. 145. № 32. С. 18048-18062.
18. Маңубара С. Цифровизация органического синтеза как химики-органики используют технологию ИИ Письма в журнале «Химия». **2021.** Т. 50. № 3. С. 475-481.
19. Как устроен искусственный интеллект. Дзен [сайт]. [Электронный ресурс]. Режим доступа: 05.03.2021. URL: <https://dzen.ru/a/YEI98J6aVzXBa5zW> (дата обращения 14.05.2025).
20. Нейн Ю. И., Иванцова М. Н. Компьютерное представление химической информации: учебное пособие: под общ. ред. М. Ф. Костериной. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, **2020.** 142 с.
21. Роботы-лаборанты, разработка лекарств и не только: какие задачи искусственный интеллект уже помогает решать химикам. 03.03.2023. [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://news.itmo.ru/science/life_science/news/13095/ (дата обращения 18.04.2025).
22. Сизов А. Что такое машинное обучение. Методы, типы, задачи и примеры машинного обучения. «Майнинг Криптовалюты» [сайт]. **2020.** [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://mining-cryptocurrency.ru/mashinnoe-obuchenie-metody-tipy/> (дата обращения 21.05.2025).
23. Яцевич М. Ю. Особенности и факторы взаимодействия феноменов науки и идеологии В сборнике: Социальные коммуникации: философские, политические, культурно-исторические

измерения. сборник статей I Всероссийской научно-практической конференции с международным участием. Кемеровский государственный университет. Кемерово, **2020**. С. 262–267.

24. Голосовые помощники: как они появились, распространенные заблуждения о них. – Текст: электронный БЛОГ Web Программиста. 25.02.2021. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://juice-health.ru/technology/962-golosovye-pomoshchniki> (дата обращения 21.04.2025).

25. Светличный Е.Г. Совершенствование образовательного процесса в школе с использованием цифровых платформ на основе искусственного интеллекта Е.Г. Светличный, М.М. Хамгоков, В.В. Шабаев Проблемы современного педагогического образования. **2022**. № 74-2. С. 207–210.

26. Амиров Р.А. Перспективы внедрения технологий искусственного интеллекта в сфере высшего образования Р.А. Амиров, У.М. Билалова. Управленческое консультирование. **2020**. № 3(135). С. 80–88.

27. Измайлова М.А. Возможности и угрозы искусственного интеллекта в образовании М.А. Измайлова Психология обучения. **2020**. № 3. С. 84–94.

28. Сибирякова Ю.В. Использование технологий искусственного интеллекта в сфере образования: риски и перспективные направления Ю.В. Сибирякова Экспертные институты в XXI веке: принципы, технологии, культура: Сборник научных трудов Научный редактор Т.И. Грабельных. Иркутск: Иркутский государственный университет, **2022**. С. 211–214.

29. Савенков А.И. Педагог как цифровой дизайнер образовательных программ: новые возможности и технологии А.И. Савенков Nomium. **2023**. № 2. С. 131–144.

30. Родионов О.В. Технологии искусственного интеллекта в образовании О.В. Родионов, Н.В. Тамп Воздушно-космические силы. Теория и практика. **2022**. № 22. С. 64–74.

31. Курбанова З.С. Нейросети в контексте цифровизации образования и науки З.С. Курбанова, Н.П. Исмаилов Мир науки, культуры, образования. **2023**. № 3(100). С. 309–311.

32. Филатова О.Н. Применение нейросетей в профессиональном образовании О.Н. Филатова, М.Н. Булаева, А.В. Гуцин Проблемы современного педагогического образования. **2022**. № 77-3. С. 243–245.

33. Петров В.В. Нейросети в образовании: шаг в будущее В.В. Петров Естественные, математические и технические науки. Образование. Технологии. Инновации: Материалы Межрегиональной научно-практической студенческой конференции, Липецк, 07–28 апреля 2023 года. Липецк: Липецкий государственный педагогический университет имени П.П. Семенова-Тян-Шанского, **2023**. С. 264–267.

34. Сивашов Д.В. Нейросети в образовании: примеры и перспективы использования Д.В. Сивашов, Т.С. Белоцерцева, А.Е. Осешнюк Основные вопросы педагогики, психологии, лингвистики и методики преподавания: материалы X Всероссийской научно-практической конференции с международным участием, Знаменск, 09 ноября 2023 года. Астрахань: Астраханский государственный университет имени В.Н. Татищева, **2023**. С. 119–122.

35. Корякова К.А. Нейросети как новые инструменты в образовании К.А. Корякова, О.В. Судакова Информационные технологии в образовании. **2023**. № 6. С. 180–186.

36. Корсакова Е.А. Использование нейросетей на уроках химии Е.А. Корсакова Актуальные проблемы химического и экологического образования. Верховский 150: материалы 68-й Всероссийской научно-практической конференции с международным участием, Санкт-Петербург, 11–13 мая 2023 года. Санкт-Петербург: Российский государственный педагогический университет имени А.И. Герцена, **2023**. С. 66–69. EDN INSDOT.

37. Адилова А.М., Манапов Н.Т., Абдикаримов М.Н. Заманауи акпараттық-коммуникациялық технологияны химия пәнінде қолдану арқылы білім мазмұнын жетілдір «Фараби әлемі» атты студенттер мен жас ғалымдардың халықаралық ғылыми конференция материалдары Алматы, Қазақстан, 6-8 сәуір **2021** жыл -1786.

38. Егинбаева Ә.Б., Турғумбаева Р.Х., Манапов Н.Т. Жалпы білім беретін мектептер үшін химия пәнін оқытуда Gaussview бағдарламасын қолдану әдістері «Фараби әлемі» атты студенттер мен жас ғалымдардың халықаралық ғылыми конференция материалдары Алматы, Қазақстан, 6-8 сәуір **2021** жыл 1906.

39. Жолдасова З.А., Турғумбаева Р.Х., Манапов Н.Т. Мектеп химиясы бойынша виртуал зертханалық жұмыстарды қолдану мүмкіндіктері «Фараби әлемі» атты студенттер мен жас ғалымдардың халықаралық ғылыми конференция материалдары Алматы, Қазақстан, 6-8 сәуір **2021** жыл 1976.

40. Сарсекеева И.С., Тургумбаева Р.Х., Манапов Н.Т. Особенности дистанционного обучения неорганической химии «Фараби әлемі» атты студенттер мен жас ғалымдардың халықаралық ғылыми конференция материалдары Алматы, Қазақстан, 6-8 сәуір **2021** жыл 215б.

41. Тургумбаева Р.Х., Манапов Н.Т., Ажиханова О.Ж. Органикалық химияны оқытуда компьютерлік бағдарламаларды қолдану «Химия ғылымы мен химиялық білім берудің заманауи аспектілері: теориясы және практикасы» тақырыбындағы ҚРҰҒА академигі, х.ғ.д., профессор Е.А.Бектуровтың 90 жылдық және х.ғ.к., профессор Б.А.Мансуровтың 70 жылдық мерейтойына арналған Халықаралық ғылыми-тәжірибелік конференцияның материалдар жинағы 13-14 желтоқсан **2021ж.** 16б.

42. Камалова А.Қ., Манапов Н.Т. Химиялық виртуалды зертханаларды сабақ барысында қолданудың өзектілігі «Химия ғылымы мен химиялық білім берудің заманауи аспектілері: теориясы және практикасы» тақырыбындағы ҚРҰҒА академигі, х.ғ.д., профессор Е.А.Бектуровтың 90 жылдық және х.ғ.к., профессор Б.А.Мансуровтың 70 жылдық мерейтойына арналған Халықаралық ғылыми-тәжірибелік конференцияның материалдар жинағы 13-14 желтоқсан **2021ж.** 22б.

43. Қасымбекова Д.А., Манапов Н.Т., Атабекова Б.С. Бейорганикалық химия курсына компьютерлік ойын технологиясын қолданудың тиімді әдістері. «Химия ғылымы мен химиялық білім берудің заманауи аспектілері: теориясы және практикасы» тақырыбындағы ҚРҰҒА академигі, х.ғ.д., профессор Е.А.Бектуровтың 90 жылдық және х.ғ.к., профессор Б.А.Мансуровтың 70 жылдық мерейтойына арналған Халықаралық ғылыми-тәжірибелік конференцияның материалдар жинағы 13-14 желтоқсан **2021ж.** 24б.

44. Тургумбаева Р.Х., Манапов Н.Т., Егинбаева Ә.Б. Химияны оқытуда компьютерлік химияны пайдалану Вестник КазНПУ им. Абая, *сер.естест.-геогр.*, № 2(72), **2022ж.**-62-69 беттер.

45. Саяқбаева С.Н, Сандиекова А.А., Манапов Н.Т. Орта мектепте химия пәнін оқытуда кванттық-химиялық есептеулерге арналған бағдарламаларды қолданудың тиімділігі «Химия мектепте» Республикалық екі айда бір шығатын ғылыми-педагогикалық журнал, №2 (116), **2022ж.** 15-17б.

46. Сандиекова А.А., Жармағамбетова А.К., Манапов Н.Т. Білім алушылардың экологиялық білімін мультимедиялық технологиялар арқылы химияға қызығушылығын арттыру «Химия мектепте» Республикалық екі айда бір шығатын ғылыми-педагогикалық журнал, №2 (128), **2024ж.** -3-10б.

47. Жұмабек А.Ф., Манапов Н.Т. Мектеп оқушыларының үлгерімін арттыру үшін органикалық химияны үйренуге арналған Chemskech бағдарламасын пайдалану әдіс-тәсілі. «ХИМИЯ ҒЫЛЫМЫ МЕН ХИМИЯЛЫҚ БІЛІМ БЕРУДІҢ ЗАМАНАУИ АСПЕКТІЛЕРІ: ТЕОРИЯСЫ ЖӘНЕ ПРАКТИКАСЫ» тақырыбындағы х.ғ.д., профессор, МАИН және ҚЖМҰҒА академигі Н.А.Бектеновтың және х.ғ.д., профессор, РЖА корреспондент мүшесі Г.И.Мейірованың 70 – жылдық мерейтойларына арналған III ХАЛЫҚАРАЛЫҚ ҒЫЛЫМИ-ТӘЖІРИБЕЛІК КОНФЕРЕНЦИЯ материалдары 15-16 мамыр **2024ж.** II бөлім 13б.

48. Сандиекова А.А., Қорғанбаева Ж.Қ., Манапов Н.Т. Білім алушылардың экологиялық білімін мультимедиялық технологияларды қолдану арқылы химияға қызығушылығын арттырудың маңыздылығы «XXI ғасырдағы педагогикалық білім интеграциясы – болашаққа қадам» тақырыбындағы I Халықаралық ғылыми-тәжірибелік конференция материалдар жинағы 28-29 наурыз **2024ж.** 1200б.

49. Борисова Ж.Б. Органикалық химияны оқытуда HyperChem бағдарламасын қолдану ерекшеліктері Вестник КазНПУ им. Абая, *серия «Естественно-географические науки»*, 3(81), **2024 г.**, 23-32 беттер.

50. Кәрім Г.А., Манапов Н.Т. Орта мектепте органикалық химияны оқытуда Gaussian және Gaussview бағдарламаларын қолданудың тиімділігі «Жаратылыстану ғылымдары: болашаққа бағытталған зерттеулер» атты дәстүрлі XI – республикалық ғылыми-тәжірибелік конференциясының материалдары бойынша мақалалар жинағы. Алматы: «АЕК Қазақ Ұлттық қыздар педагогикалық университеті». **2025.** №11. 188-193 беттер.

51. Сандиекова А.А., Манапов Н.Т. Әлемдегі елдердегі экологиялық білімнің жағдайы мен дамуы.Қазақстан Республикасы Ұлттық қауіпсіздік комитеті Шекара академиясы Республикалық мемлекеттік мекемесінің жоғары оқу орындары арасындағы ғылыми-практикалық конференцияның материалдары мамыр **2024ж.** -257б.

52. Капелла Дж. В. и др. Интернет вещей и экологическая аналитическая химия: на пути к прибыльному симбиозу Тенденции в экологической аналитической химии. **2020.** Т. 27. С. e00095.

53. Сеглер М.Х.С., Пройсс М., Уоллер М.П. Планирование химических синтезов с использованием глубоких нейронных сетей и символического ИИ Nature. **2018**. Т. 555. №. 7698. С. 604-610.
54. Бойко Д.А. и др. Полностью автоматизированный неограниченный анализ данных масс-спектрометрии высокого разрешения с использованием машинного обучения *Журнал Американского химического общества*. **2022**. Т. 144. №. 32. С. 14590-14606.
55. Бортц М., Дадхе К., Митсос А. ИИ в химической инженерии: мы только в начале *Chemie Ingenieur Technik*. **2021**. Т. 93. № 12. С. 1875-1875.
56. Мак К.К., Вонг Й.Х., Пичика М.Р. Искусственный интеллект в открытии и разработке лекарств Открытие и оценка лекарств: безопасность и фармакокинетические анализы. **2024**. С. 1461-1498.
57. Шлексер Ламуро П. и др. Компьютерное обучение для вычислительного гетерогенного катализа. *ChemCatChem*. **2019**. Т. 11. №. 16. С. 3581-3601.
58. Ю Б., Чжу В. Исследование применения технологии цифровых двойников в нефтехимической промышленности *Химическая промышленность и машиностроение*. 2019. Т. 38. №. 1. С. 278.
59. Ривз С.М., Криппен К.Дж., МакКрей Э.Д. Разнообразный опыт студентов бакалавриата, изучающих химию в лабораториях виртуальной реальности Компьютеры и образование. 2021. Т. 175. С. 104320.
60. Ciallella HL, Zhu H. Развитие вычислительной токсикологии в эпоху больших данных с помощью искусственного интеллекта: моделирование химической токсичности на основе данных и механизмов *Химические исследования в токсикологии*. **2019**. Т. 32. №. 4. С. 536-547.

References:

1. Antoshkina E.G., Grigorieva E.A. Organization of extracurricular independent work of students in the study of chemical cycle disciplines Modern higher education: an innovative aspect. **2011**. No. 4. pp. 31-33.
2. Keith J. A. et al. Combining machine learning and computational chemistry for predictive insights into chemical systems *Chemical reviews*. **2021**. Т. 121. №. 16. С. 9816-9872.
3. Dorofeev M.V., Stouneseva Yu.B. The use of World Wide Web services in the learning process *Chemistry at school*. **2010**. No. 8. p. 31.
4. Manapov N.T. Khimiya bilimindegi zhana akparattyk technologiylardyn roli *Bulletin of KazNPU named after Abai, ser. «Natural geography sciences»* **2010**. №3(25). Pp.121-124.
5. A.A. Agisheva, Zh.B. Childebaev, N.T. Manapov The importance of Internet skills in solving research and development problems *Bulletin of KazNPU named after Abai, ser. «Natural geography sciences»* **2011**. №1(27). -Pp.85-85.
6. Artificial intelligence: application in chemistry: Translated from English D. Smith, C. Reese, J. Stewart et al. Edited by T. Pierce, B. Honey. M.: Mir, **1988**. 430 p., ill. ISBN 5-03-001213-3
7. Kurmanaliev M.K., Ryskalieva A.K. Khimiyany okytudyn kazirgi technologiylary. Almaty, **2013**, pp. 216-220.
8. Solovyov M.E., Solovyov M.M. Computer Chemistry, Moscow: SOLON Press, **2005**, 536 p.
9. Butyrskaya E.V. Computer chemistry: fundamentals of theory and work with Gaussian and GaussView programs. Moscow: SOLON-PRESS, **2011**. 224 p.: ill. (Series «Library of Students»).
10. How artificial intelligence is used in chemistry 11.10.2022. [Electronic resource]. Access mode: <https://zen.ru/a/Y2ymTcdU2G3jfWFW> (accessed 03.03.2025).
11. Galkina, E. N. The use of neural networks in the process of teaching chemistry E. N. Galkina The world of science. Pedagogy and psychology. 2024. vol. 12. No. 2. URL: <https://mir-nauki.com/PDF/51PDMN224.pdf>
12. Bettik zhane colloidtyk chemistry. Ustanymdary men koldanyly [Text]: okulyk . K. S. Birdi ; Aud. K. J. Abdiev. Almaty. Daur, 2013. 388 b. (Mr. Bilim zhane gylm Minister). ISBN 9786012174410
13. Valieva M. E. Laboratory of computer design of materials: what can the USPEX offer. *Biomolecule from* 03.07.2016. [Electronic resource]. Access mode: <https://biomolecula.ru/articles/laboratoriia-kompiuternogo-dizaina-materialov-cto-mozhet-dat-uspex> (accessed 05.2.2025).

14. Mitrofanov A.A. and others. Artificial intelligence in chemistry and materials science. Faculty of Chemistry, Lomonosov Moscow State University [Electronic resource]. Access mode: <https://teach-in.ru/file/synopsis/pdf/ai-in-chemistry-and-materials-science-M-3.pdf> (accessed 05/20/2025).
15. Rupali Dabas Twenty Ways AI Develops Chemistry. Chemistry ORLD dated 17.10.2024. [Electronic resource]. Access mode: <https://www.chemistryworld.com/new/twenty-ways-ai-is-advancing-chemistry/4020269.article> (accessed 05.21.2025).
16. Back S. et al. Accelerated development of chemical science using AI Digital Discovery. 2024. Vol. 3. No. 1. pp. 23-33.
17. Zheng Zheng et al. ChatGPT chemistry assistant for text analysis and prediction of MOF synthesis *Journal of the American Chemical Society*. 2023. Vol. 145. No. 32. pp. 18048-18062.
18. Matsubara S. Digitalization of organic synthesis how organic chemists use AI technology *Letters in the Journal Chemistry*. 2021. Vol. 50. No. 3. pp. 475-481.
19. How artificial intelligence works. Zen [website]. [electronic resource]. Access mode: 03.05.2021. - URL: <https://dzen.ru/a/YE198J6aVzXBa5zW> (accessed 05.14.2025).
20. Nein Yu. I., Ivantsova M. N. Computer representation of chemical information: textbook: under the general editorship of M. F. Kosterina. Yekaterinburg: Ural Publishing House. University, 2020. 142 p.
21. Laboratory robots, drug development and more: what tasks artificial intelligence is already helping chemists solve. 03.03.2023. [Electronic resource]. Access mode: https://news.itmo.ru/ru/science/life_science/news/13095 (accessed 04.18.2025).
22. Sizov A. What is machine learning? Methods, types, tasks, and examples of machine learning. "Cryptocurrency Mining" [website]. 2020. [electronic resource]. Access mode: <https://mining-cryptocurrency.ru/mashinnoe-obucheniye-metody-tipy> (accessed 05.21.2025).
23. Yatsevich M. Y. Features and factors of interaction between the phenomena of science and ideology In the collection: Social communications: philosophical, political, cultural and historical dimensions. collection of articles of the First All-Russian Scientific and Practical conference with international participation. Kemerovo State University. Kemerovo, 2020. pp. 262-267.
24. Voice assistants: how they appeared, common misconceptions about them. Text: electronic BLOG of a Web Programmer. 25.02.2021. [electronic resource]. Access mode: <http://juice-health.ru/technology/962-golosovye-pomoshchniki> (accessed 04.21.2025).
25. Svetlichny E.G. Improving the educational process at school using digital platforms based on artificial intelligence E.G. Svetlichny, M.M. Khamgokov, V.V. Shabaev Problems of modern pedagogical education. 2022. No. 74-2. pp. 207-210.
26. Amirov R.A. Prospects for the introduction of artificial intelligence technologies in higher education R.A. Amirov, U.M. Bilalova. Management consulting. 2020. № 3(135). Pp. 80-88.
27. Izmailova M.A. The possibilities and threats of artificial intelligence in education M.A. Izmailova Psychology of learning. 2020. No. 3. pp. 84-94.
28. Sibiryakova Yu.V. The use of artificial intelligence technologies in education: risks and promising areas Yu.V. Sibiryakova Expert institutes in the 21st century: principles, technologies, culture: A Collection of scientific papers. Scientific editor T.I. Grabelnykh. Irkutsk: Irkutsk State University, 2022. pp. 211-214.
29. Savenkov A.I. Teacher as a digital designer of educational programs: new opportunities and technologies. A.I. Savenkov Hominum. 2023. No. 2. pp. 131-144.
30. Rodionov O.V. Artificial intelligence technologies in education O.V. Rodionov, N.V. Tump Aerospace forces. Theory and practice. 2022. No. 22. pp. 64-74.
31. Kurbanova Z.S. Neural networks in the context of digitalization of education and science Z.S. Kurbanova, N.P. Ismailova The world of science, culture, and education. 2023. № 3(100). Pp. 309-311.
32. Filatova O.N. Application of neural networks in professional education O.N. Filatova, M.N. Bulaeva, A.V. Gushchin Problems of modern pedagogical education. 2022. No. 77-3. pp. 243-245.
33. Petrov V.V. Neural networks in education: step into the future V.V. Petrov Natural, mathematical and technical sciences. Education. Technologies. Innovations: Proceedings of the Interregional Scientific and Practical Student Conference, Lipetsk, April 07-28, 2023. Lipetsk: Lipetsk State Pedagogical University named after P.P. Semenov-Tyan-Shansky, 2023, pp. 264-267.
34. Sivashov D.V. Neural networks in education: examples and prospects of use D.V. Sivashov, T.S. Belozertseva, A.E. Osheshnyuk Basic issues of pedagogy, psychology, linguistics and teaching methods: proceedings of the X All-Russian Scientific and Practical Conference with international

participation, Znamensk, November 09, **2023**. Astrakhan: Astrakhan State University named after V.N. Tatishchev, 2023. pp. 119-122.

35. Koryakova K.A. Neural networks as new tools in education K.A. Koryakova, O.V. Sudakova information technologies in education. **2023**. No. 6. pp. 180-186.

36. Korsakova E.A. The use of neural networks in chemistry lessons E.A. Korsakova Actual problems of chemical and environmental education. Verkhovsky 150: Proceedings of the 68th All-Russian Scientific and Practical Conference with International Participation, St. Petersburg, May 11-13, 2023. Saint Petersburg: A.I. Herzen Russian State Pedagogical University, **2023**, pp. 66-69. EDN INSDOT.

37. Adilova a.m., Manapov N. T., Abdikarimov M. N. improving the content of education through the use of modern information and communication technologies in chemistry materials of the International Scientific Conference of students and young scientists "Farabi Alemi" Almaty, Kazakhstan, April 6-8, **2021** . 178p.

38. Eginbaeva A. B., Turgumbaeva R. Kh., Manapov N. T. methods of using the gaussview program in teaching chemistry for general education schools. materials of the International Scientific Conference of students and young scientists "Farabi Alemi" Almaty, Kazakhstan, April 6-8, **2021**.190p.

39. Zholdasova Z. A., Turgumbaeva R. Kh., Manapov N. T. possibilities of using virtual laboratory work in school chemistry materials of the International Scientific Conference of students and young scientists "Farabi Alemi" Almaty, Kazakhstan, April 6-8, **2021**. 197p.

40. Sarsekeeva I. S., Turgumbaeva R. Kh., Manapov N. T. specificity of remote training in inorganic chemistry materials of the International Scientific Conference of students and young scientists «Farabi Alem» Almaty, Kazakhstan, April 6-8, **2021**. 215p.

41. Turgumbaeva R. Kh., Manapov N. T., Azhikhanova O. zh. the use of computer programs in teaching organic chemistry collection of materials of the international scientific and practical conference dedicated to the 90th anniversary of Academician of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, doctor of chemical sciences, professor Bekturov E. A. and the 70th anniversary of candidate of chemical sciences, professor Mansurov B. A. on the topic «modern aspects of Chemical Science and chemical education: theory and practice» December 13-14, **2021**. 16b.

42. Kamalova A. K., Manapov N. T. relevance of the use of Chemical virtual laboratories in the classroom collection of materials of the International Scientific and practical conference dedicated to the 90th anniversary of Academician of the National Academy of Sciences, Doctor of chemical sciences, professor Bekturov E. A. and the 70th anniversary of candidate of chemical sciences, professor Mansurov B. A. on the topic «modern aspects of Chemical Science and chemical education: theory and practice» December 13-14, **2021**. 22p.

43. Kasymbekova D. A., Manapov N. T., Atabekova B. S. Effective methods of using computer game technology in the course of Inorganic Chemistry. collection of materials of the international scientific and practical conference dedicated to the 90th anniversary of Academician of the National Academy of Sciences, Doctor of Chemical Sciences, Professor E. A. Bekturov on the topic «modern aspects of Chemical Science and chemical education: theory and practice» December 13-14 **2021**. 24p.

44. Turgumbaeva R. Kh., Manapov N. T., Eginbaeva A. B. The use of Computer Chemistry in teaching chemistry Vestnik kaznpu named after Abaya, series «historical and geographical sciences», № (72), **2022**. pp. 62-69.

45. Sayakbaeva S. N., Sandibekova A. A., Manapov N. T. the effectiveness of the use of programs for quantum-chemical calculations in teaching chemistry in high school Republican bi-monthly scientific and pedagogical journal «Chemistry in school», №2 (116), **2022**. 15-17p.

46. Sandibekova A. A., Zharmagambetova A. K., Manapov N. T. increasing the interest of students in chemistry through multimedia technologies of Environmental Education. Republican bi-monthly scientific and pedagogical journal «Chemistry at school», №2 (128), **2024**. 3-10p.

47. Zhumabek A. S., Manapov N. T. method and method of using the Chemscketch program for studying organic chemistry to improve the performance of schoolchildren materials of the III international scientific and practical conference dedicated to the 70th anniversary of the doctor of chemical sciences, professor, academician of the main and KSMU N. A. Bektenov and Doctor of chemical sciences, professor, corresponding member of the RSA G. I. Meirova on the topic «modern aspects of Chemical Science and chemical education: theory and practice» May 15-16, **2024**. Part II-13p.

48. Sandibekova A. A., Korganbaeva zh.K., Manapov N. T. the importance of increasing students ' interest in environmental education through the use of multimedia technologies collection of materials of the I International Scientific and practical conference on the topic «integration of pedagogical education in the XXI century – a step into the future» March 28-29, **2024**. 1200p.

49. Borisova zh.B. features of the use of the hyperchem program in teaching organic chemistry Vestnik kaznpu named after Abaya, series «historical and geographical sciences», 3(81), **2024**, p. 23-32.
50. Karim G. A., Manapov N. T. the effectiveness of the use of Gaussian and gaussview programs in teaching organic chemistry in secondary school collection of articles on the materials of the traditional XI Republican scientific and practical conference «Natural Sciences: future-oriented research». Almaty: "MCI Kazakh National Women's teacher training University". **2025**. №11. 188. 193 pages.
51. Sandibekova A. A., Manapov N. T. state and development of environmental education in the countries of the world materials of the scientific and practical conference between universities of the Republican state institution Border Academy of the National Security Committee of the Republic of Kazakhstan May **2024**-257p.
52. Chapel J. V. I. Dr. The Internet of things and ecological Analytical Chemistry: a way to a distant symbiosis. trends in ecological analytical chemistry. **2020**. Vol. 27. P. e00095.
53. Segler M. H. S., Proyss M., Waller M. P. planning of chemical synthesis with the use of deep neural networks and symbolic AI Nature. **2018**. Vol. 555. №. 7698. pp. 604-610.
54. Boyko D. A. and Dr. Full automatic mass spectrometry of mass spectrometry with the use of machine learning Journal of the American Chemical community. **2022**. Vol. 144. №. 32. P.14590-14606.
55. Bortz M., Dadhe K., Mitsos A. AI in chemical engineering: we are only at the beginning . *Chemie Ingenieur Technik*. **2021**. VOL. 93. NO. 12. P.1875-1875.
56. Mak K. K., Wong Y. H., Pichika M. R. Artificial intelligence in drug discovery and development Drug discovery and evaluation: safety and pharmacokinetic assays. **2024**. C. 1461-1498.
57. Schlexer Lamoureux P. et al. Machine learning for computational heterogeneous catalysis. *ChemCatChem*. **2019**. T. 11. №. 16. C. 3581-3601.
58. YU B., ZHU W. Application exploration of digital twin technology in petrochemical industry Chemical Industry and Engineering Progress. **2019**. T. 38. №. s1. C. 278.
59. Reeves S. M., Crippen K. J., McCray E. D. The varied experience of undergraduate students learning chemistry in virtual reality laboratories Computers & Education. **2021**. T. 175. C. 104320.
60. Ciallella HL, Zhu H. Development of Toxicology in the era of large numbers with assistance to research intelligence: modeling Chemical Toxicology at the core of these and mechanisms Chemical Research in toxicology. **2019**. Vol. 32. №. 4. pp. 536-547.