

Научная статья
УДК 004.8;546.824
doi: 10.17223/24135542/40/10

Перспективы применения машинного обучения для прогнозирования свойств и условий синтеза тонкопленочных материалов на основе диоксида титана для фотокатализа

Ольга Сергеевна Халипова¹, Светлана Анатольевна Кузнецова²

^{1, 2} Томский государственный университет, Томск, Россия

¹ Chalipova@mail.ru

² onm@chem.tsu.ru

Аннотация. Статья посвящена анализу современных достижений в области применения методов машинного обучения (МО) для решения задачи прогнозирования условий синтеза и свойств тонкопленочных материалов на основе диоксида титана для фотокатализа. Проведенный обзор показывает, что, несмотря на растущий интерес к данной теме, разработанные на сегодняшний день модели МО носят узкоспециализированный характер. Обучение моделей проводится на небольшом наборе экспериментальных данных, что существенно сужает область их практического применения и препятствует созданию универсальных инструментов для дизайна материалов. Основной проблемой является отсутствие комплексных моделей, способных устанавливать сквозные связи в цепочке «условия синтеза – свойства – фотокаталитическая активность» и целостно описывать целинаправленный синтез фотокатализаторов на основе TiO₂ как в тонкопленочном, так и в дисперсном состоянии. Так как итоговая эффективность фотокатализатора определяется в том числе параметрами фотокаталитического процесса, то их учет также затрудняет создание комплексных моделей МО. Для преодоления указанных ограничений в статье обосновывается необходимость создания стандартизованных и структурированных баз данных, которые должны обобщать разрозненные экспериментальные результаты из множества источников, обеспечивая их согласованность и машиночитаемость. Интеграция данных в единые платформы станет фундаментом для разработки более точных и надежных моделей МО, способных ускорить открытие и оптимизацию перспективных фотокаталитических материалов на основе TiO₂.

Ключевые слова: тонкопленочные материалы, диоксид титана, фотокатализатор, машинное обучение, прогнозирование свойств

Благодарности: Исследование выполнено при поддержке Программы развития Томского государственного университета (Приоритет-2030).

Для цитирования: Халипова О.С., Кузнецова С.А. Перспективы применения машинного обучения для прогнозирования свойств и условий синтеза тонкопленочных материалов на основе диоксида титана для фотокатализа // Вестник Томского государственного университета. Химия. 2025. № 40. С. 93–101. doi: 10.17223/24135542/40/10

Original article

doi: 10.17223/24135542/40/10

The potential of applying machine learning techniques to predict the properties and synthesis conditions of thin-film materials based on titanium dioxide for photocatalytic applications

Olga S. Khalipova¹, Svetlana A. Kuznetsova²

^{1, 2} Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

¹ Chalipova@mail.ru

² onm@chem.tsu.ru

Abstract. This article analyzes recent developments in the use of machine learning techniques to predict the synthesis conditions and properties of thin film titanium dioxide photocatalytic materials. It demonstrates that, although there has been growing interest in this area, the machine learning models that have been developed so far are highly specialized and limited in their application. These models are trained using only a small set of experimental data, which limits their usefulness and hinders the creation of more general tools for the material design.

The main challenge is the absence of the comprehensive models that can establish connections between the «synthesis conditions – properties – photocatalytic activity» and comprehensively describe the targeted synthesis of the titanium dioxide photocatalysts, both in thin film and dispersed forms. Since the final photocatalytic efficiency is also dependent on the parameters of the photocatalytic process, considering these factors also complicates the development of comprehensive machine learning models. To address these challenges, this paper emphasizes the need for creating standardized and structured databases that synthesize diverse the experimental results from various sources, ensuring consistency and machine readability. Integrating data into unified platforms forms the basis for developing more accurate and dependable machine learning models capable of accelerating the identification and optimization of promising titanium dioxide based photocatalytic materials.

Keywords: thin-film, titanium dioxide, photocatalyst, machine learning, property prediction

Acknowledgments: The research was carried out with the support of the Tomsk State University Development Program (Priority 2030).

For citation: Khalipova, O.S., Kuznetsova, S.A. The potential of applying machine learning techniques to predict the properties and synthesis conditions of thin-film materials based on titanium dioxide for photocatalytic applications. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Chimia – Tomsk State University Journal of Chemistry*, 2025, 40, 93–101. doi: 10.17223/24135542/40/10

Тонкопленочные материалы на основе диоксида титана становятся перспективной альтернативой дисперсным материалам в области фотоэлектро-катализа и фотокатализа [1–5]. Они отличаются большей площадью активных центров на поверхности, лучшей интеграцией с другими материалами и конкурируют с порошковыми фотокатализаторами по эффективности и

легкости применения [6]. Диоксид титана отличается высокой химической стабильностью, относительно невысокой стоимостью, нетоксичностью [7], однако высокая скорость рекомбинации носителей заряда, а также большое значение ширины запрещенной зоны (E_g) оксида в различных кристаллических модификациях (3,2–3,4 эВ) не позволяет ему эффективно использовать весь спектр солнечного излучения и давать высокий квантовый выход [8, 9]. Одной из стратегий повышение фотоактивности диоксида титана является его легирование другими полупроводниковыми оксидами редкоземельных элементов, в том числе диоксидом церия [3, 5, 8–12], что приводит к возникновению в материале гетеропереходов, которые способствуют эффективному разделению носителей зарядов, повышению их времени жизни, изменению значения E_g и росту степени использования видимого света.

Мощным инструментом для выявления скрытых и нелинейных взаимосвязей между условиями синтеза, структурой и свойствами материалов является машинное обучение (МО). Его применение для прогнозирования состава новых материалов с заданными функциональными свойствами и оптимизации условий их получения приводит к снижению ресурсов и времени, затрачиваемых на проведение исследований [13]. Несмотря на большой потенциал применения искусственного интеллекта в материаловедении, в том числе в области фотокатализа с участием диоксида титана, в литературе представлены в основном результаты исследований отдельных научных групп, поэтому данная статья посвящена анализу достижений в применении методов машинного обучения для прогнозирования свойств тонкопленочных материалов на основе диоксида титана, в том числе фотокаталитической активности, выявления существующих проблем и перспектив развития.

Большинство представленных в литературе работ направлено на применение МО для прогнозирования значения E_g диоксида титана в дисперсном состоянии [14–17], которая является одним из основных факторов, оказывавших влияние на его фотоактивность. Так, в работе [14] предложено проведение прогнозирования E_g фотокатализаторов на основе анатаза в диапазоне от 2,28 до 3,25 эВ с использованием модели регрессии гауссовского процесса, исходя из представленных в литературе экспериментальных данных о параметрах кристаллической решетки (структурного параметра) и площади поверхности (морфологического параметра) материалов. Модель, построенная на анализе экспериментальных данных, позволяет избежать ошибок, связанных с применением данных, полученных теоретически ab-initio [17], и демонстрирует высокий коэффициент корреляции (R^2) 99,99% с результатами эксперимента.

Форма и размер частиц диоксида титана также оказывают влияние на его фотокаталитическую активность, так как направление роста кристалла оказывает влияние на динамику носителей заряда в нем. Прогнозирование формы нанокристалла исходя из принципов ab-initio, которые учитывают только значения поверхностной энергии различных кристаллографических поверхностей, невозможно. В условиях реального эксперимента направление роста кристалла определяется наличием сорбирующихся на поверхности

ионов, которые могут выступать в качестве регуляторов формы. В работе [18] для прогнозирования формы и размера частиц TiO_2 была предложена модель МО с использованием алгоритмов искусственных нейронных сетей, обучение которой проводилось на экспериментальных данных, полученных непосредственно авторами. С применением методов экспериментального планирования авторы определили основные параметры гидротермального синтеза TiO_2 с заданной формой и размером (исходные концентрации триэтаноламин титаната и этианоламина, pH, температуры синтеза), что позволило разработать модель с высокой достоверностью на небольшом наборе данных. Разработанная авторами статьи [18] модель МО позволила не только предсказывать свойства конечного материала, но и определять условия гидротермальной обработки для получения наночастиц с формой усеченной бипирамиды или удлиненных частиц длиной от 20 до 140 нм.

Принципиально важное значение для фотокатализа также имеет контроль соотношения аморфной и кристаллической фаз в нанокомпозитах TiO_2 , так как несмотря на то, что кристаллические структуры отличаются более высокой фотоактивностью, аморфные структуры характеризуются меньшей скоростью рекомбинации носителей зарядов. Для прогнозирования и классификации соотношения аморфной и кристаллической фаз в нанокомпозитах TiO_2 , полученных золь-гель методом, модели машинного обучения также были разработаны при использовании собственных экспериментальных данных авторами работы [19]. Ими было установлено, что модель регрессии гауссовского процесса является наиболее успешной моделью, предсказывающей с точностью 99,9 % степень превращения аморфной фазы в кристаллическую в результате термической деструкции образцов при температуре от 200 до 550°C со скоростью нагрева 1, 5, 10, 20°C/мин золей на основе тетраизопропоксида титана, предварительно высущенных при 120°C.

Обзор достижений в применении методов МО для проектирования фотокаталитических процессов с участием TiO_2 приведен в работе [1]. Авторы уделяют основное внимание прогнозированию параметров фотокаталитического процесса и конфигурации фотопрессоров и не рассматривают вопросы, связанные с прогнозированием условий синтеза фотокатализаторов.

Прогнозирование фотоактивности TiO_2 в реакциях разложения органических загрязнителей в зависимости от условий процесса с использованием моделей МО также представлено в работах [20, 21]. Авторами работы [20] была собрана собственная база данных из 200 наборов результатов эксперимента по изучению фотокаталитической активности диоксида титана из опубликованных источников, на основании которой и проводилось обучение моделей МО. Наилучшие результаты показали модели с использованием алгоритмов Adaboost, Catboost и XGBoost. Применение метода импутации позволило избежать удаления неполных наборов данных, а повышение точности моделей было достигнуто путем использования синтетически генерированных исходных данных. Анализ SHAP позволил установить, что скорость фотодеградации загрязняющих веществ в воздухе как выходной параметр в моделях в первую очередь зависит от количества фотокатализатора,

размера реактора и типа органического загрязнителя, а затем от его начальной концентрации, интенсивности и длины волны излучения и температуры. Авторы работы [21], проанализировав 13 алгоритмов моделей МО для прогнозирования константы скорости фотодеградации красителей на основе аналогичных входных параметров фотокатализитического процесса, также установили, что модель XGBoost показывает наибольшую точность (R^2 : 0,932–0,926 и 0,937–0,924 на этапах обучения и тестирования соответственно).

Работы, направленные на применение методов МО для прогнозирования фотокатализитической активности TiO_2 в тонкопленочном состоянии, в литературе практически отсутствуют. Авторами работы [22] модель МО на основе искусственных нейронных сетей (R^2 : 0,99) была применена для прогнозирования влияния времени фотодеградации органического красителя и содержания SiO_2 в составе тонкопленочного фотокатализатора $TiO_2:SiO_2$, полученных золь–гель методом, на степень деградации красителя. В работах [23–25] методы МО применяются только для прогнозирования свойств покрытий, таких как микротвердость, пористость, толщина, показатель преломления, в зависимости от условий синтеза. Все исследователи применяют для обучения только свои экспериментальные данные. Входными переменными для модели МО в работе [25] были условия электрохимического осаждения на Al-подложках пленок Ni–P– TiO_2 (соотношение компонентов в электролите $NiSO_4$ – NaH_2PO_2 – TiO_2 , время и температура), а выходным параметром – микротвердость по Виккерсу. Модель была разработана на основе алгоритма Extra Trees и показала высокий коэффициент корреляции 94,47. Зависимость между показателем преломления и пористостью пленок TiO_2 , а также составом исходной суспензии и методикой ее нанесения на стеклянную подложку обнаруживается с применением алгоритма машинного обучения Random Forest [23]. Для разработки модели авторами было проанализировано 32 образца. Модель демонстрирует невысокую корреляцию с экспериментальными данными (всего 93,5%), которая, по мнению авторов, может быть повышена при увеличении набора экспериментальных данных для обучения модели. Более высокую точность моделей МО для прогнозирования пористости пленок TiO_2 с использованием алгоритмов Random Forest и XGBoost удалось получить в работе [24]. Для обучения и тестирования моделей МО авторами была проанализирована пористость 100 пленок диоксида титана, полученных методом анодного окисления, в зависимости от напряжения и времени реакции. Учет всех параметров синтеза (тип электролита, состав электролита, pH, приложенное напряжение и разность потенциалов, температура и продолжительность анодирования) пока вызывает затруднение, так как требует проведения большого числа экспериментальных исследований для обучения моделей МО. Выбор наиболее значимых параметров произведен на основании интуиции экспериментатора.

Таким образом, применение методов МО для прогнозирования условий синтеза, свойств и фотокатализитической активности диоксида титана, в том числе в тонкопленочном состоянии демонстрирует значительный потенциал.

В настоящее время методы МО применяются для решения отдельных задач в рамках цепочки «условия синтеза – свойства – функциональные свойства» материалов. Требуется разработка комплексных моделей МО как для дисперсных материалов, так и для тонкопленочных, в том числе на основе диоксида титана, модифицированного другими полупроводниковыми оксидами (РЗЭ). Высокий коэффициент корреляции показывают модели, разработанные с применением алгоритмов машинного обучения XGBoost и Random Forest. Большинство моделей МО разрабатывается на основании ограниченного количества экспериментально полученных данных, что сужает область их применения, а также вызывает опасение в их достоверности. Выбор условий синтеза в качестве входных данных для моделей МО осуществляется зачастую на основании опыта экспериментатора, что также уменьшает их точность и обобщающую способность. Для прогнозирования значения ширины запрещенной зоны как одного из определяющих параметров фотоактивности материалов на основе диоксида титана для МО возможно применять данные, полученные *ab-initio*, что решает основную проблему нехватки экспериментальных данных для обучения. Однако теоретические расчеты не позволяют оценить все межатомные взаимодействия, что может приводить к заниженным значениям E_g и систематическим ошибкам разрабатываемых на их основе моделей МО. Решение существующих проблем возможно путем создания стандартизованных баз данных, в которых будут обобщены представленные в литературе результаты исследования влияния параметров синтеза, составов прекурсоров, фазового состава, морфологии, оптических свойств на фотокатализическую активность материалов на основе диоксида титана. Результаты должны быть представлены в едином формате, пригодном для анализа с помощью моделей искусственного интеллекта. Данные базы станут основой для построения более точных и универсальных моделей, способных ускорить дизайн новых тонкопленочных фотокатализаторов.

Список источников

1. Jari Y., Najid N., Chaker Necibi M., Gourich B., Vial C., Elhalil A., Kaur P., Mohdeb I., Park Yu., Hwang Yu., Garcia A.R., Roche N., Midaoui A. A comprehensive review on TiO₂-based heterogeneous photocatalytic technologies for emerging pollutants removal from water and wastewater: From engineering aspects to modeling approaches // Journal of environmental management. 2025. Vol. 373. Art. 123703.
2. Sabriantie Mulus D.A., Permana M.D., Deawati Y., Eddy D.R. A current review of TiO₂ thin films: synthesis and modification effect to the mechanism and photocatalytic activity // Applied Surface Science Advances. 2025. Vol. 27. Art. 100746.
3. Radha E., Komaraiah D., Sayanna R., Sivakumar J. Photoluminescence and photocatalytic activity of rare earth ions doped anatase TiO₂ thin films // Journal of Luminescence. 2022. Vol. 244. Art. 118727.
4. Patnaik R.K., Divya N. A brief review on the synthesis of TiO₂ thin films and its application in dye degradation // Materials Today: Proceedings. 2023. Vol. 72. P. 2749–2756.
5. Pant B., Park M., Park S.-J. Recent advances in TiO₂ films prepared by sol-gel methods for photocatalytic degradation of organic pollutants and antibacterial activities // Coatings. 2019. Vol. 9. Art. 613.

6. Albert E., Basa P., Fodor B., Keresztes Z., Madarász J., Márton P., Olasz D., Rácz A.S., Sáfrán G., Szabó T., Tegze B., Höltzl T., Hórvölgyi Z. Experimental and computational synthesis of TiO₂ sol–gel coatings // Langmuir. 2025. Vol. 41. P. 704–718.
7. Armakovi S.J., Savanovic M.M., Armakovic S. Titanium dioxide as the most used photocatalyst for water purification: an overview // Catalysts. 2025. Vol. 13. Art. 26.
8. Chung L., Chen W.-F., Koshy P., Sorrell C.C. Effect of Ce-doping on the photocatalytic performance of TiO₂ thin films // Materials Chemistry and Physics. 2017. Vol. 197. P. 236–239.
9. Hamdi D., Mansouri L., Srivastava V., Sillanpaa M., Bousselmi L. Enhancement of Eu and Ce doped TiO₂ thin films photoactivity: Application on Amido Black photodegradation // Inorganic Chemistry Communications. 2021. Vol. 133. Art. 108912.
10. Kayani Z.N., Riaz M.S., Naseem S. Magnetic and antibacterial studies of sol-gel dip coated Ce doped TiO₂ thin films: Influence of Ce contents // Ceramics International. 2020. Vol. 46. P. 381–390.
11. Curkovic L., Briševac D., Ljubas D., Mandic V., Gabelica I. Synthesis, characterization, and photocatalytic properties of sol-gel Ce-TiO₂ films // Processes. 2024. Vol. 12. Art. 1144.
12. Lukong V.T., Ukoba K., Jen T.-Ch. Review of self-cleaning TiO₂ thin films deposited with spin coating // The International Journal of Advanced Manufacturing Technology. 2022. Vol. 122. P. 3525–3546.
13. Huang G., Guo Y., Chen Y., Nie Z. Application of Machine Learning in Material Synthesis and Property Prediction // Materials. 2023. Vol. 16. Art. 5977.
14. Zhang Y., Xu X. Machine learning band gaps of doped-TiO₂ photocatalysts from structural and morphological parameters // ACS Omega. 2020. Vol. 5. P. 15344–15352.
15. Jiang Z. et al. Modeling and experimental studies on adsorption and photocatalytic performance of nitrogen-doped TiO₂ prepared via the sol-gel method // Catalysts. 2020. Vol. 10 (12). Art. 1449.
16. Chen S., Zhang W., Luo R., Zhao Y., Yang Y., Zhang B., Lu Q., Hu B. System energy and band gap prediction of titanium dioxide based on machine learning // Journal of Molecular Structure. 2024. Vol. 1307. Art. 137934.
17. Ezeakunne C., Lamichhane B., Kattel S. Integrating density functional theory with machine learning for enhanced band gap prediction in metal oxides // Phys. Chem. Chem. Phys. 2025. Vol. 27. P. 5338–5358.
18. Pellegrino F., Isopescu R., Pellutiè L., Sordello F., Rossi A.M., Orte E., Martra G., Hodoroaba V.-D., Maurino V. Machine learning approach for elucidating and predicting the role of synthesis parameters on the shape and size of TiO₂ nanoparticles // Scientific Reports. 2020. Vol. 10. Art. 18910.
19. Demirci S., Sahin D.O., Demirci S. Design of the amorphous/crystalline TiO₂ nanocomposites via machine learning for photocatalytic applications // Materials Science in Semiconductor Processing. 2025. Vol. 192. Art. 109460.
20. Schossler R.T., Ojo S., Jiang Z., Hu J., Yu X. A novel interpretable machine learning model approach for the prediction of TiO₂ photocatalytic degradation of air contaminants // Scientific Reports. 2024. Vol. 14. Art. 13070.
21. Javed M.F., Shahab M.Z., Asif U., Najeh T., Aslam F., Khan M.A.I. Evaluation of machine learning models for predicting TiO₂ photocatalytic degradation of air contaminants // Scientific Reports. 2024. Vol. 14. Art. 13688.
22. Rahmani E., Jafari D., Rahmani H., Kazemi F. Prediction of photocatalytic activity of TiO₂ thin films doped by SiO₂ using artificial neural network and fuzzy model approach // Recent Innovations in Chemical Engineering. 2017. Vol. 10 (1). P. 59–71.
23. Abdellatif S., Fathi A., Abdullah K., Hassan M., Khalifa Z. Investigating the variation in the optical properties of TiO₂ thin-film utilized in bifacial solar cells using machine learning algorithm // Journal of Photonics for Energy. 2022. Vol. 12 (2). P. 022202–022202.
24. Kim S.-H., Jeong C. Feasibility of machine learning algorithms for predicting the deformation of anodic titanium films by modulating anodization processes // Materials. 2021. Vol. 14. Art. 1089.

25. Shozib I.A., Ahmad A., Rahaman M.S.A., Abdul-Rani A.M., Alam M.A., Beheshti M., Taufiqurrahman I. Modelling and optimization of microhardness of electroless Ni-P-TiO₂ composite coating based on machine learning approaches and RSM // Journal of Materials Research and Technology. 2021. Vol. 12. P. 1010–1025.

References

1. Jari Y., Najid N., Chaker Necibi M., Gourich B., Vial C., Elhalil A., Kaur P., Mohdeb I., Park Yu., Hwang Yu., Garcia A.R., Roche N., Midaoui A. A comprehensive review on TiO₂-based heterogeneous photocatalytic technologies for emerging pollutants removal from water and wastewater: From engineering aspects to modeling approaches. *Journal of environmental management*. 2025. Vol. 373. Art. 123703.
2. Sabriantie Mulus D.A., Permana M.D., Deawati Y., Eddy D.R. A current review of TiO₂ thin films: synthesis and modification effect to the mechanism and photocatalytic activity. *Applied Surface Science Advances*. 2025. Vol. 27. Art. 100746.
3. Radha E., Komaraiah D., Sayanna R., Sivakumar J. Photoluminescence and photocatalytic activity of rare earth ions doped anatase TiO₂ thin films. *Journal of Luminescence*. 2022. Vol. 244. Art. 118727.
4. Patnaik R.K., Divya N. A brief review on the synthesis of TiO₂ thin films and its application in dye degradation. *Materials Today: Proceedings*. 2023. Vol. 72. P. 2749–2756.
5. Pant B., Park M., Park S.-J. Recent advances in TiO₂ films prepared by sol-gel methods for photocatalytic degradation of organic pollutants and antibacterial activities. *Coatings*. 2019. Vol. 9. Art. 613.
6. Albert E., Basa P., Fodor B., Keresztes Z., Madarász J., Márton P., Olasz D., Rácz A.S., Sáfrán G., Szabó T., Tegze B., Höltzl T., Hórvölgyi Z. Experimental and computational synthesis of TiO₂ sol-gel coatings. *Langmuir*. 2025. Vol. 41. P. 704–718.
7. Armaković S.J., Savanovic M.M., Armakovic S. Titanium dioxide as the most used photocatalyst for water purification: an overview. *Catalysts*. 2025. Vol. 13. Art. 26.
8. Chung L., Chen W-F., Koshy P., Sorrell C.C. Effect of Ce-doping on the photocatalytic performance of TiO₂ thin films. *Materials Chemistry and Physics*. 2017. Vol. 197. P. 236–239.
9. Hamdi D., Mansouri L., Srivastava V., Sillanpää M., Bousselmi L. Enhancement of Eu and Ce doped TiO₂ thin films photoactivity: Application on Amido Black photodegradation. *Inorganic Chemistry Communications*. 2021. Vol. 133. Art. 108912.
10. Kayani Z.N., Riaz M.S., Naseem S. Magnetic and antibacterial studies of sol-gel dip coated Ce doped TiO₂ thin films: Influence of Ce contents. *Ceramics International*. 2020. Vol. 46. P. 381–390.
11. Curkovic L., Briševac D., Ljubas D., Mandic V., Gabelica I. Synthesis, characterization, and photocatalytic properties of sol-gel Ce-TiO₂ films. *Processes*. 2024. Vol. 12. Art. 1144.
12. Lukong V.T., Ukoba K., Jen T.-Ch. Review of self-cleaning TiO₂ thin films deposited with spin coating. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*. 2022. Vol. 122. P. 3525–3546.
13. Huang G., Guo Y., Chen Y., Nie Z. Application of Machine Learning in Material Synthesis and Property Prediction. *Materials*. 2023. Vol. 16. Art. 5977.
14. Zhang Y., Xu X. Machine learning band gaps of doped-TiO₂ photocatalysts from structural and morphological parameters. *ACS Omega*. 2020. Vol. 5. P. 15344–15352.
15. Jiang Z. et al. Modeling and experimental studies on adsorption and photocatalytic performance of nitrogen-doped TiO₂ prepared via the sol-gel method. *Catalysts*. 2020. Vol. 10 (12). Art. 1449.
16. Chen S., Zhang W., Luo R., Zhao Y., Yang Y., Zhang B., Lu Q., Hu B. System energy and band gap prediction of titanium dioxide based on machine learning. *Journal of Molecular Structure*. 2024. Vol. 1307. Art. 137934.
17. Ezeakunne C., Lamichhane B., Kattel S. Integrating density functional theory with machine learning for enhanced band gap prediction in metal oxides. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2025. Vol. 27. P. 5338–5358.

18. Pellegrino F., Isopescu R., Pellutiè L., Sordello F., Rossi A.M., Orte E., Martra G., Hodoroba V.-D., Maurino V. Machine learning approach for elucidating and predicting the role of synthesis parameters on the shape and size of TiO₂ nanoparticles. *Scientific Reports*. 2020. Vol. 10. Art. 18910.
19. Demirci S., Sahin D.O., Demirci S. Design of the amorphous/crystalline TiO₂ nanocomposites via machine learning for photocatalytic applications. *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2025. Vol. 192. Art. 109460.
20. Schossler R.T., Ojo S., Jiang Z., Hu J., Yu X. A novel interpretable machine learning model approach for the prediction of TiO₂ photocatalytic degradation of air contaminants. *Scientific Reports*. 2024. Vol. 14. Art. 13070.
21. Javed M.F., Shahab M.Z., Asif U., Najeh T., Aslam F., Khan M.A.I. Evaluation of machine learning models for predicting TiO₂ photocatalytic degradation of air contaminants. *Scientific Reports*. 2024. Vol. 14. Art. 13688.
22. Rahmani E., Jafari D., Rahmani H., Kazemi F. Prediction of photocatalytic activity of TiO₂ thin films doped by SiO₂ using artificial neural network and fuzzy model approach. *Recent Innovations in Chemical Engineering*. 2017. Vol. 10 (1). P. 59–71.
23. Abdellatif S., Fathi A., Abdullah K., Hassan M., Khalifa Z. Investigating the variation in the optical properties of TiO₂ thin-film utilized in bifacial solar cells using machine learning algorithm. *Journal of Photonics for Energy*. 2022. Vol. 12 (2). P. 022202–022202.
24. Kim S.-H., Jeong C. Feasibility of machine learning algorithms for predicting the deformation of anodic titanium films by modulating anodization processes. *Materials*. 2021. Vol. 14. Art. 1089.
25. Shozib I.A., Ahmad A., Rahaman M.S.A., Abdul-Rani A.M., Alam M.A., Beheshti M., Taufiqurrahman I. Modelling and optimization of microhardness of electroless Ni-P-TiO₂ composite coating based on machine learning approaches and RSM. *Journal of Materials Research and Technology*. 2021. Vol. 12. P. 1010–1025.

Сведения об авторах:

Халипова Ольга Сергеевна – кандидат технических наук, доцент кафедры неорганической химии Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: Chalipova@mail.ru

Кузнецова Светлана Анатольевна – доктор химических наук, доцент, профессор кафедры неорганической химии Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: onm@chem.tsu.ru

Вклад авторов: все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Information about the authors:

Khalipova Olga S. – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Inorganic Chemistry of the Tomsk State University (Tomsk, Russian Federation). E-mail: chalipova@mail.ru

Kuznetsova Svetlana A. – Doctor of Chemical Sciences, Associate Professor, Professor of the Department of Inorganic Chemistry of the Tomsk State University (Tomsk, Russian Federation). E-mail: onm@chem.tsu.ru

Contribution of the authors: the authors contributed equally to this article.

The authors declare no conflicts of interests.

*Статья поступила в редакцию 07.11.2025; принята к публикации 03.12.2025
The article was submitted 07.11.2025; accepted for publication 03.12.2025*