

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

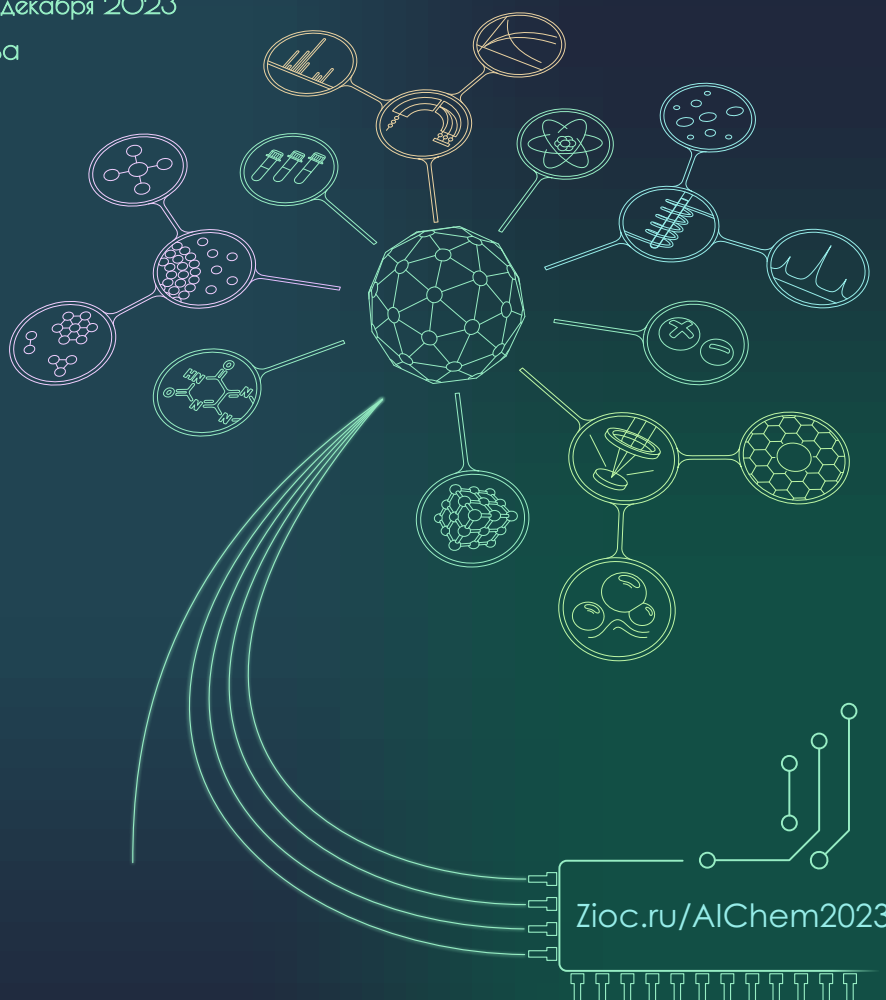
Artificial Intelligence in Chemistry and Materials Science

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского
Российской академии наук

Научная конференция-школа

18-20 декабря 2023

Москва



Оглавление

Научный комитет.....	2
Организационный комитет	2
Приветствие академика-секретаря ОХНМ РАН академика М. П. Егорова	3
Направления работы конференции-школы	5
О конференции.....	6
Программа конференции.....	7
Устные доклады.....	8
Стендовые доклады.....	19
Присоединяйтесь к нам!.....	27

Научный комитет

- академик Бухтияров В.И. (Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, г. Новосибирск)
- академик Егоров М.П. (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, г. Москва)
- академик Калмыков С.Н. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва)
- академик Кукушкин В.Ю. (Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург)
- чл.-корр. РАН Антипин И.С. (Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань)
- чл.-корр. РАН Максимов А.Л. (Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, г. Москва)
- чл.-корр. РАН Трифонов А.А. (Институт элементоорганических соединений им. А.Е. Несмеянова РАН, г. Москва)
- д.х.н. Третьяков Е.В. (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, г. Москва)

Организационный комитет

академик Анаников В. П.
с.н.с., к.х.н. Гордеев Е. Г.
асп. Корабельникова В. А.
асп. Провоторова Д.В.

Секретарь оргкомитета

н.с., к.х.н. Архипова Д. М. <conf-alab@ioc.ac.ru>

Приветствие академика-секретаря ОХНМ РАН академика М. П. Егорова

Дорогие коллеги!

Предстоящая конференция посвящена одному из самых захватывающих и быстро развивающихся направлений современной науки — применению искусственного интеллекта в химии и материаловедении. Это направление открывает перед нами новые горизонты возможностей, объединяя глубокие знания в области химии с передовыми технологиями обработки данных и машинного обучения.



Искусственный интеллект уже доказал свою способность кардинально изменять традиционные подходы в научных исследованиях. Он помогает ускорять процесс открытия новых материалов, оптимизируя синтез и анализ химических соединений, и предоставляет уникальные инструменты для моделирования сложных химических реакций и процессов. Важность этих достижений трудно переоценить, поскольку они открывают путь к созданию новых лекарств, эффективных материалов для энергетики, экологии и многих других сфер жизни.

На этой конференции, организованной научной школой академика В.П. Ананикова, у вас будет возможность обсудить эти новшества, обменяться опытом и определить направления будущих исследований. Вы сможете не только проанализировать последние достижения в этой области, но и определить ключевые направления для будущих исследований, которые будут способствовать интеграции

алгоритмов искусственного интеллекта в фундаментальные и прикладные исследования в химии и материаловедении.

Желаю всем участникам конференции вдохновения, продуктивности и новых открытий. Пусть эта встреча станет площадкой для обмена знаниями и идеями, которые будут способствовать дальнейшему прогрессу в наших областях. Удачи вам, дорогие коллеги, и плодотворной работы на конференции!

Академик-секретарь ОХНМ РАН,
Академик М. П. Егоров

Направления работы конференции-школы

- Прогнозирование свойств молекул: используя AI, можно предсказать физические, химические и биологические свойства молекул без необходимости проведения реальных экспериментов.
- Оптимизация свойств: модели машинного обучения могут помочь в создании новых соединений с желаемыми свойствами, минимизируя количество необходимых экспериментальных тестов.
- Автоматизированный поиск реагентов: AI может анализировать большие наборы данных для выявления оптимальных реагентов для химических реакций.
- Дизайн материалов: с помощью AI можно разрабатывать новые материалы с желаемыми свойствами.
- Распознавание и анализ спектров: модели машинного обучения могут анализировать сложные спектры, для быстрого определения состава образца.
- Оптимизация процессов: AI может помогать в управлении и оптимизации производственных процессов, уменьшая отходы и повышая эффективность.
- Прогнозирование стабильности соединений: оценка термодинамической стабильности и реакционной способности различных химических соединений.
- Молекулярное моделирование: использование AI для интерпретации и оптимизации квантово-химических вычислений, что делает их быстрее и точнее.
- Создание биоактивных молекул: применение AI для дизайна молекул с определенной биологической активностью, например, для разработки новых лекарственных средств.
- Устойчивость и экологичность: использование AI для разработки более экологичных методов производства и создания материалов, которые меньше воздействуют на окружающую среду.

О конференции

Конференция-школа «Искусственный интеллект в химии и материаловедении» организуется и проводится Научной школой академика В.П. Ананикова. В программе конференции запланированы пленарные лекции, устные и стендовые доклады. Особенностью конференции является междисциплинарная направленность и поиск новых направлений исследований для будущих открытий в фундаментальной науке. К участию в работе конференции приглашаются все желающие!

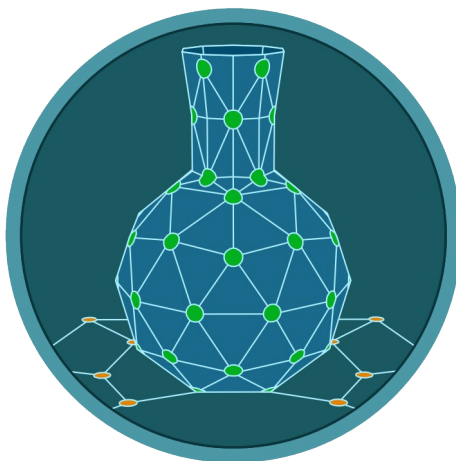
Программа конференции

«ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ»

Artificial Intelligence in Chemistry and Materials Science

18-20 декабря 2023 г., ИОХ им. Н. Д. Зелинского РАН, г. Москва

Zioc.ru/AIChem2023



Устные доклады

18 декабря, понедельник



9.00-10.00 *регистрация участников*

10.00-10.10 *вступительное слово*

Сессия 1.

Председатели: *академик Егоров Михаил Петрович*

10.10-10.40 PL-01 академик Хохлов Алексей Ремович
«Инструменты искусственного интеллекта
для обработки научной информации»

10.40-11.10 PL-02 академик Анаников Валентин Павлович
«Искусственный интеллект в химических ис-
следованиях»

11.10-11.40 PL-03 д.ф.-м.н. Бурнаев Евгений Владимиро-
вич «Физически-информированное машин-
ное обучение для решения задач химии и ма-
териаловедения»

11.40-12.00 ***кофе-брейк***

Сессия 2.

Председатель: *академик Анаников Валентин Павлович*

12.00-12.15 ОР-01 д.ф.-м.н. Комаров Павел Вячеславович
«Применение подхода *in silico* для поиска но-
вых полимерных материалов»

12.15-12.30	ОР-02 д.х.н. Толбин Александр Юрьевич «Новый способ прогнозирования эффективности оптических лимитеров без проведения эксперимента»
12.30-12.45	ОР-03 д.х.н. Александров Евгений Викторович «Топологические методы анализа и дизайна полимерных сеток»
12.45-13.00	ОР-04 к.х.н. Смирнова Анастасия Андреевна «Использование сверточных нейронных сетей и трансферного глубокого обучения для обработки XAS-спектров»
13.00-13.15	ОР-05 к.т.н. Кудияров Виктор Николаевич «Разработка композитов на основе гидрида магния и наноразмерных добавок для высокоэффективного хранения водорода»
13.15-13.30	ОР-06 к.ф.-м.н. Панкин Илья Андреевич «Интерпретация спектров рентгеновского поглощения для single-site катализаторов на основе цеолитов с помощью молекулярной динамики и машинного обучения»
13.30-13.45	ОР-07 к.х.н. Королев Вадим Викторович «Нейронные сети на огрубленном кристаллическом графе как инструмент для дизайна нанопористых материалов»
13.45	Коллективное фото
13.45-15.00	обед

Сессия 3.

Председатель: *д.ф.-м.н. Бурнаев Евгений Владимирович*

15.00-15.30 PL-04 к.ф.-м.н. Еремин Роман Александрович «Графовые нейронные сети: от прогнозирования свойств кристаллических структур к поиску новых материалов»

15.30-16.00 PL-05 к.х.н. Потапенко Олег Валерьевич «Оптимизация состава катализатора крекинга с использованием математической модели на базе искусственных нейронных сетей»

16.00-16.20

кофе-брейк

Сессия 4.

Председатель: *к.ф.-м.н. Еремин Роман Александрович*

16.20-16.35 ОР-08 Мулашкина Татьяна Игоревна «Определение активации субстрата в активном центре фермента с использованием нейронной сети»

16.35-16.50 ОР-09 Рылов Александр Валерьевич «Предсказание параметров межзвёздной пыли по данным ИК-фотометрии с помощью нейросетей»

16.50-17.05 ОР-10 Серов Никита Сергеевич «Дизайн бионаноматериалов с заданными свойствами и активностями методами искусственного интеллекта»

17.05-17.20	ОР-11 Проценко Богдан Олегович «PyFitIt: Интерпретируемое Машинное Обучение для Спектроскопии на Пути к Простоте и Удобству»
17.30-19.30	стендовая сессия

19 декабря, вторник

Сессия 5.	
Председатель: <i>академик Хохлов Алексей Ремович</i>	
10.00-10.30	PL-06 чл.-корр. РАН Люлин Сергей Владимирович «Использование нейронных сетей для предсказания свойств полимеров»
10.30-11.00	PL-07 к.ф.-м.н. Шапеев Александр Васильевич «Машинно-обучаемые силовые поля»
11.00-11.20	кофе-брейк
Сессия 6.	
Председатель: <i>чл.-корр. РАН Люлин Сергей Владимирович</i>	
11.20-11.35	ОР-12 д.ф.-м.н. Рыльцев Роман Евгеньевич «Межатомные потенциалы на основе нейронных сетей для атомистического моделирования металлургических расплавов»
11.35-11.50	ОР-13 д.ф.-м.н. Щелкачев Николай Михайлович «Глубокое машинное обучение, структур-

	ная наследственность и дизайн функциональных материалов на основе металлических сплавов»
11.50-12.05	ОР-14 Зайцев Роман Геннадиевич «Модели машинного обучения в задачах анализа упорядоченности размещения частиц на многослойной поверхности»
12.05-12.20	ОР-15 к.х.н. Усачёв Максим Николаевич «Применение автоматизированного алгоритма <i>de novo</i> идентификации продуктов химического синтеза методом жидкостной хромато-масс-спектрометрии высокого разрешения»
12.20-12.35	ОР-16 к.х.н. Никитина Анна Анатольевна «Роботизация процесса синтеза мембраны на основе оксида графена»
12.35-12.50	ОР-17 к.ф.-м.н. Романчук Сергей Петрович «Применение вычислительного интеллекта и теории эффективной среды для моделирования структуры нанокomпозиционного материала»
12.50-13.05	ОР-18 Злобин Иван Сергеевич «Предсказание теплофизических свойств полимеров при помощи искусственного интеллекта»
13.05-14.20	обед

Сессия 7.

Председатель: *к.ф.-м.н. Шапеев Александр Васильевич*

14.20-14.50 PL-08 к.х.н. Нартова Анна Владимировна «Глубокое машинное обучение для анализа изображений, полученных различными методами микроскопии»

14.50-15.20 PL-09 к.ф.-м.н. Яньшолё Вадим Владимирович «реакопу: высокоточный алгоритм обнаружения пиков в ВЭЖХ-МС данных с использованием нейросетей глубокого обучения»

15.20-15.35 ОР-19 Бородина Ольга Сергеевна «Автоматизация направленного поиска предреакционных комплексов в реакции хиральных индукторов с бензальдегидом»

15.35-15.50 ОР-20 Карпов Кирилл Викторович «Дизайн комплексообразователей для переработки отработанного ядерного топлива с использованием глубокого машинного обучения»

15.50-16.10 ***кофе-брейк***

Сессия 8.

Председатель: *к.х.н. Нартова Анна Владимировна*

16.10-16.25 ОР-21 Бухтеева Екатерина Олеговна «Топологический подход к реконструктивным твердофазным переходам и его применение для моделирования новых материалов»

16.25-16.40	ОР-22 Агликов Александр Сергеевич «Топологический анализ данных наноразмерной шероховатости полиионных сборок с использованием методов машинного обучения»
16.40-16.55	ОР-23 Ишмухаметов Ильнур Ринатович «Диагностика нанокерамики в клетках млекопитающих с использованием корреляционной микроскопии и машинного обучения»
16.55-17.05	ST-01 Синельников Артем Николаевич «Сенсоры «электронный язык» для анализа биологических смесей методами машинного обучения»
17.05-17.15	ST-02 Осипов Владислав Тимофеевич «Машинное обучение для высокопроизводительного поиска новых материалов для металл-ионных аккумуляторов»
17.15-17.25	ST-03 Яблонский Максим Денисович «Конформационный поиск для малых органических молекул в газовой и твердой фазе с помощью алгоритма пчелиной колонии»
17.25-17.35	ST-04 Лифарь Михаил Сергеевич «Применение машинного обучения с подкреплением к задаче оптимального управления реакцией окисления CO на Pd»
17.35-17.45	ST-05 Поташников Александр Александрович «Досинтетическая оценка термодинамической стабильности кристаллических соединений методами машинного обучения»

17.45-17.55	ST-06 Бегларян Бабкен Гагикович «Оценка качества предсказания ИК-спектров полициклических ароматических углеводов с использованием нейронных сетей»
-------------	---

20 декабря, среда

Сессия 9.

Председатель: *к.ф.-м.н. Яньшоле Вадим Владимирович*

10.00-10.30	PL-10 д.х.н. Скорб Екатерина Владимировна «Интеллектуальные технологии в инфохи-мии»
-------------	--

10.30-11.00	PL-11 к.х.н. Коровин Алексей Николаевич «Применение ИИ для повышения энергоэф-фективности в фотовольтаике»
-------------	--

11.00-11.20 **кофе-брейк**

Сессия 10.

Председатель: *д.х.н. Скорб Екатерина Владимировна*

11.20-11.35	OP-24 к.х.н. Попов Илья Сергеевич «Разра-ботка машиннообучаемых потенциалов меж-атомного взаимодействия в системе Nb-O»
-------------	---

11.35-11.50	OP-25 к.ф.-м.н. Мареев Евгений Игоревич «Самоюстирующиеся оптические системы на основе машинного обучения с подкрепле-нием»
-------------	---

11.50-12.05	ОР-26 Козлов Константин Сергеевич «Автоматический масс-спектрометрический поиск помогает открывать новые реакции»
12.05-12.20	ОР-27 к.х.н. Митрофанов Артем Александрович «О применении метода байесовской оптимизации в химии»
12.20-12.35	ОР-28 к.т.н. Муравьев Никита Вадимович «Машинное обучение в термическом анализе: Первые опыты»
12.35-12.50	ОР-29 Русалев Юрий Владимирович «Тренировка потенциала ReaxFF для AuPd»
12.50-13.05	ОР-30 Ларионов Кирилл Павлович «Предсказание свойств металл-органического каркаса UiO-66 методами машинного обучения»
13.05-14.20	обед

Сессия 11.

Председатель: *к.х.н. Коровин Алексей Николаевич*

14.20-14.50	PL-12 д.ф.-м.н. Гуда Александр Александрович «Микрофлюидные системы для <i>in situ</i> спектральной диагностики и скрининга параметров синтеза»
14.50-15.20	PL-13 к.ф.-м.н. Медведев Михаил Геннадьевич «Приложения искусственного интеллекта в химических исследованиях»

15.20-15.35	ОР-31 Степанюк Роман Алексеевич «Применение методов машинного обучения для предсказания значений изменения дипольного момента при электронном возбуждении в флуоресцентных белках на основе данных из молекулярно-динамических расчетов»
15.35-15.50	ОР-32 Мануковская Диана Владимировна «Автоматизация получения фрактальной размерности уровней освещенности фотоиндуцированного рассеяния света в фоторефрактивных монокристаллах ниобата лития с помощью программы в языковой среде Python для распознавания оптических свойств монокристаллов»
15.50-16.10	кофе-брейк
Сессия 12.	
Председатель: <i>д.ф.-м.н. Гуда Александр Александрович</i>	
16.10-16.25	ОР-33 Левченко Ирина Николаевна «Моделирование микровязкости мембраны в окружении зонда активированной кумаринами C_{525} , C_{314} хемилюминесценции под действием природного апоптогена $CytC - CL$, как гетерогенного катализатора»
16.25-16.40	ОР-34 Иваненко Тимур Юрьевич «Применение элементов глубокого машинного обучения для прогнозирования фотолюминесцентных свойств комплексных соединений структуры типа перовскитов»

16.40-16.50	ST-07 Мирзаева Сабина Элмаг-кызы «Использование языковых моделей и методов обработки данных для оптимизации научных исследований»
16.50-17.00	ST-08 Рубцов Иван Дмитриевич «Применение методов машинного обучения при поиске перспективных матриц для иммобилизации циркония»
17.00-17.10	ST-09 Пикулин Иван Сергеевич «Предсказание константы устойчивости комплексов металлов с помощью графовой нейронной сети»
17.10-17.20	ST-10 Щетинкина Мария Александровна «Автоматизация расчетов метадинамики при изучении ацилирования энантиомеров 2-метилпиперидина»
17.20-18.00	<i>заключительное слово, награждение победителей</i>

Стендовые доклады

18 декабря, понедельник

PP-01 Абдульмянов Алексей Рафикович «Характеристики поляризуемости молекул»

PP-02 Абрамкина Марина Алексеевна «Перспективы применения биогибридных катализаторов на основе наночастиц меди и никеля в органическом синтезе»

PP-03 Андреев Дмитрий Иванович «Программная платформа для моделирования осаждения палладия на поверхности углерода методом Монте-Карло»

PP-04 Аракелян Лиана Ашотовна «Создание базы данных цитотоксичности ионных жидкостей»

PP-05 Архипов Данил Алексеевич «Применение алгоритмов машинного обучения для оптимизации удаления тартразина из воды металл-органическими материалами (NH₂)-UiO-66»

PP-06 Ахметзянов Ильдан Ильдусович «Использование AI для решения прямых и обратных задач химической гидромеханики»

PP-07 Банников Максим Игоревич «Компонентный анализ газовых смесей по данным субтерагерцовой спектроскопии»

PP-08 Белоусова Татьяна Сергеевна «2,5-диформилфуран – основа редокс-активного полимера биосенсора»

PP-09 Бойченко Дмитрий Сергеевич «Build-a-bio-Strip: специальный онлайн-сервис для быстрой оценки экологической опасности химических реакций»

PP-10 Бондаренко Любовь Сергеевна «Особенности сорбции левофлоксацина в присутствии металл-органического координационного полимера MIL 88b»

PP-11 Борзова Дарья Владимировна «Оптимизация условий формирования наночастиц палладия на бактериальной подложке»

PP-12 Буглаков Александр «Особенности самоорганизации в растворах амфифильных диблок-сополимеров с гребнеобразным и линейным блоками: компьютерное моделирование, подкрепленное методом активного обучения»

PP-13 Буров Арсений Сергеевич «Моделирование переноса заряда Li^+ через интерфейсы $\text{Li}/\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ с помощью молекулярной динамики и машинно-обучаемых потенциалов»

PP-14 Быков Андрей Викторович «Предсказание ширины запрещенной зоны гибридных 1D галогенометаллатов(III) методами ML»

PP-15 Ванчугов Рустам Расимович «Концепция экспериментальной программы нейросетевого моделирования показателей качества резинотехнических изделий»

PP-16 Вепрева Анастасия Сергеевна «Предсказание свойств офтальмологических препаратов с помощью машинного обучения»

PP-17 Волгин Игорь Вадимович «Применение моделей машинного обучения для предсказания газотранспортных свойств полиимидов и полиамидов»

PP-18 Ворожцов Артем Павлович «Метрическое обучение для определения состава смесей по спектральным данным»

PP-19 Гасанов Михаил Эльдарович «Применение QSAR для прогнозирования биоактивности модифицированных наночастиц магнетита в условиях малой выборки»

PP-20 Гашимова Элина Мансуровна «Диагностика рака легких по отношению к раку других локализаций по выдыхаемому воздуху с применением различных алгоритмов оптимизации нейронных сетей»

PP-21 Гнатюк Ирина Геннадьевна «Селективное (С-3)-Н арилирование гетероциклопентадиенов в условиях рутениевого катализа»

PP-22 Голышева Анастасия Николаевна «Эффективный и доступный метод синтеза HMF и DFF»

PP-23 Гребенкина Анастасия Алексеевна «Разработка алгоритма автоматического поиска равновесного состояния металлоорганических комплексов»

PP-24 Губина Нина Вячеславовна «Генеративный искусственный интеллект для получения сокристаллов с заранее заданными свойствами»

PP-25 Гуревич Павел Евгеньевич «Детектирование ионов переходных металлов в масс-спектрах с использованием сверточных нейронных сетей»

PP-26 Гуркин Георгий Константинович «Биоплёнка на нановолокнах полианилина – новый подход для проводящего полимера в биоэлектрохимических устройствах»

PP-27 Гурьев Валентин «Оптимизация архитектуры ВТСП про водов II-го поколения»

PP-28 Дубровский Иван Сергеевич «Генеративная система по предсказанию морфологии наноматериалов»

РР-29 Ерохин Кирилл Сергеевич «Применение аддитивных технологий для повышения эффективности и безопасности органического синтеза»

РР-30 Захаров Никита Сергеевич «Применение алгоритмов молекулярного моделирования для изучения свойств конъюгатов мезо-арипорфиринов с нацеливающим лигандом как потенциальных противоопухолевых фотодинамических агентов»

РР-31 Ильющенко Матвей Кириллович «Органокаталитическая нуклеофильная активация винилирующих агентов – DFT-исследование»

РР-32 Квашнин Александр Геннадьевич «Первопринципное исследование адсорбционных свойств поверхности WB_{5-x} »

РР-33 Кечин Арсений Алексеевич «Классификация синих шариковых ручек для определения возможного факта фальсификации документа»

РР-34 Ковеза Владислав Анатольевич «Исследование особенностей модифицирования цеолита ZSM-5 соединениями фосфора с использованием методов математического моделирования»

РР-35 Коломоец Никита Иванович «Автоматизированное исследование пространства реакций циклоприсоединения ацетилена»

РР-36 Колыхалов Денис Алексеевич «Новые подходы к синтезу полимеров на основе фуранов»

РР-37 Кошелев Даниил Сергеевич «Экспертная система для интерпретации ИК спектров на основе свёрточной нейронной сети с мультиклассовой классификацией»

РР-38 Красовская Зинаида «Генеративный дизайн аптамерных последовательностей с заранее заданной аффинностью и селективностью к малым молекулам»

РР-39 Кузнецова Любовь Сергеевна «Гибридный нанокompозитный материал для создания универсального глюкозного датчика, применяемого в химической промышленности, биотехнологии и медицине»

РР-40 Кузьминова Юлия «Выбор параметров печати для нержавеющей стали марки 316l используя МОВО алгоритм»

РР-41 Кулаев Кирилл Дмитриевич «Графовые нейронные сети и XANES спектроскопия для исследования структуры центров меди в Cu-MOR»

РР-42 Лаврентьев Игорь Вячеславович «Автокаталитическая внутримолекулярная C-X (X = Cl, Br, I)/C-H активация и циклизация 5,6-диарил-1H-пирроло[3,4-d]пиримидин-2,4-дионов при облучении видимым светом»

РР-43 Ланцова Елизавета Александровна «Синтез гибридного антисептического биокомпозита с использованием кремнийорганической матрицы и октенидина дигидрохлорида»

РР-44 Мануковская Диана Владимировна «Новые материалы для использования в нейроморфных системах»

РР-45 Набиев Тимур Теймурович «Использование полимерных гидрогелей в медицине»

РР-46 Назарычев Виктор Михайлович «Атомистическое компьютерное моделирование диэлектрических свойств термопластичных полиимидов, ориентированных приложением одноосного растяжения»

РР-47 Нам Евгений Владиславович «Новые белковые дескрипторы»

РР-48 Нерсесян Лев Эрикович «Использование нейросетей для анализа динамики роста биопленок на различных материалах: графы взаимодействий»

РР-49 Никитенко Денис Валерьевич «Квантово-химическое моделирование последовательного алкилирования простых иодидных комплексов Pt^{II} иодалкильными производными»

РР-50 Обухова Елена Викторовна «Устойчивые PEPPSI-комплексы на основе продуктов конверсии возобновляемой растительной биомассы»

РР-51 Одегова Валерия Сергеевна «Дизайн глубоких эвтектических растворителей с помощью алгоритмов искусственного интеллекта»

РР-52 Орлова Анастасия Андреевна «Применение улучшенных представлений химических реакций для предсказания выходов»

РР-53 Островский Сергей Дмитриевич «Использование генеративного дизайна при создании биокерамического имплантата для краниопластики»

РР-54 Перчиков Роман Николаевич «Исследование формирования биоплёнок на углеродных нанотрубках»

РР-55 Попов Захар Иванович «Низкоразмерные наноматериалы для сенсорики и катализа»

РР-56 Прима Дарья Олеговна «Исследование *in situ* и доказательство связывания N-гетероциклических карбенов с поверхностью наночастиц Pd в катализе Pd/NHC»

РР-57 Пятаченко Анастасия Сергеевна «Комплексы Ni(II) с основно-ионизирующимися NHC-лигандами: синтез и каталитическая активность в реакции Сузуки-Мияура с участием арилхлоридов»

РР-58 Рябов Виталий Олегович «Моделирование методом молекулярной динамики CVD синтеза графена на никелевой подложке»

РР-59 Савельев Сергей Алексеевич «Моделирование протонной проводимости металлоорганических каркасных структур с применением метода трансферного машинного обучения»

РР-60 Сенин Алексей Александрович «Каталитические свойства комплексов хрома на основе 1,2-бис(дифенилфосфино)бензола в процессе тримеризации этилена»

РР-61 Сильверстов Артём Сергеевич «Совместное использование градиентного бустинга и алгоритмов на графах в задаче многозарядного деизотопирования масс-спектров высокого разрешения»

РР-62 Скуратович Владимир Андреевич «Новый тип медь-катализируемых NHC-R и NHC=O сочетаний в условиях реакции Чана-Эванса-Лама»

РР-63 Смирнова Анастасия Андреевна «Поиск уязвимостей графовых сверточных нейронных сетей при работе с лекарственно подобными молекулами»

РР-64 Султанова Римма Марсельевна «Разработка цифровой технологии подбора нефтепромысловых химических реагентов»

РР-65 Суржикова Яна Игоревна «Разработка нового катализатора для окислительного амидирования альдегидов в фотокаталитических условиях»

РР-66 Суханова Екатерина Владимировна «Программа *Heterotool*: построение геометрий вертикальных и латеральных гетероструктур»

РР-67 Уразманова Карина Руслановна «Молекулярный дизайн новых антибиотиков на основе бензимидазола»

РР-68 Фомкина Анна Сергеевна «Использование искусственного интеллекта для высокоэффективного скрининга оптимальных гетерогенных катализаторов в реакции электроокисления мочевины»

РР-69 Хайбрахманов Артур Ильнурович «Использование сверточных нейронных сетей для решения практических задач порошковой рентгеновской дифракции»

РР-70 Холичева Ангелина Алексеевна, Каманин Максим Сергеевич «Генерация размеченных изображений биопленок методами глубокого обучения для автоматического количественного анализа»

РР-71 Чернов Даниил Димович «Анализ связи остаточных ошибок оценочных функций со структурными и физико-химическими особенностями лигандов»

РР-72 Чернышев Виктор Михайлович «Основно-ионизирующие ННС-лиганды в Pd-катализируемых реакциях арилхлоридов»

РР-73 Чернявский Михаил Валерьевич «Методы интегральной геометрии и алгебраической топологии в анализе сложных структур»

РР-74 Чугреева Галина Николаевна «Применение нейронных сетей для разработки мультимодального углеродного наносенсора ионов в воде»

Присоединяйтесь к нам!

Сайт Научной школы:

ananikovlab.ru



Telegram-канал Научной школы:

t.me/ananikovlab



Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

Россия, 119991, Москва, Ленинский проспект 47

e-mail: alab@ioc.ac.ru

