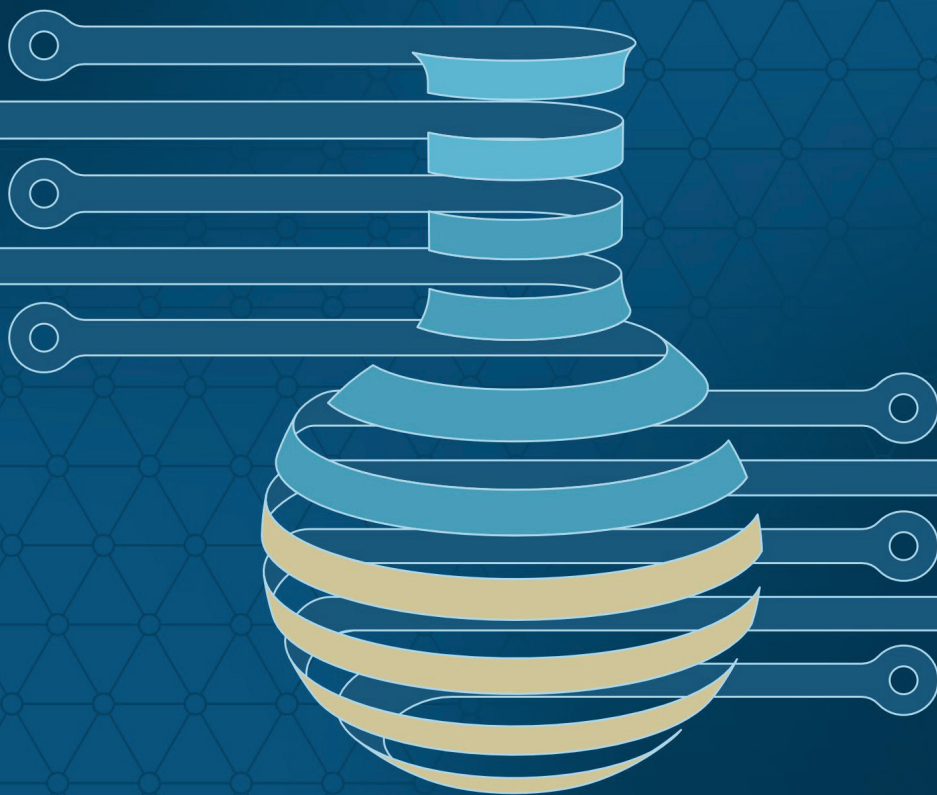


ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Artificial Intelligence in Chemistry and Materials Science

II научная конференция

17-21 ноября 2025



МОСКВА

Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН

Оглавление

Научный комитет	3
Организационный комитет.....	3
Приветствие академика-секретаря ОХНМ РАН академика М. П. Егорова	4
Тематические блоки конференции.....	6
Основные направления	6
Программа II научной конференции.....	7
Устные доклады.....	8
Стендовые доклады	29
Присоединяйтесь к нам!	39

Научный комитет

Академик РАН Анаников В.П. –
председатель

Академик РАН Алдошин С.М.

Академик РАН Антипов Е.В.

Академик РАН Бухтияров В.И.

Академик РАН Горбунова Ю.Г.

Академик РАН Григорович К.В.

Член-корр. РАН Гудилин Е.А.

Академик РАН Егоров М.П.

Член-корр. РАН Иванов В.К.

Академик РАН Калмыков С.Н.

Член-корр. РАН Комлев В.С.

Академик РАН Кукушкин В.Ю.

Член-корр. РАН Лукашин А.В.

Академик РАН Лысак В.И.

Академик РАН Максимов А.Л.

Академик РАН Мешалкин В.П.

Академик РАН Новаков И.А.

Член-корр. РАН Пономаренко С.А.

Академик РАН Ремпель А.А.

Академик РАН Синяшин О.Г.

Член-корр. РАН Трифонов А.А.

Академик РАН Федюшкин И.Л.

Академик РАН Хохлов А.Р.

Академик РАН Цивадзе А.Ю.

Академик РАН Чарушин В.Н.

Академик РАН Шевченко В.Я.

Член-корр. РАН Шевельков А.В.

Организационный комитет

Академик РАН Терентьев А.О. –
председатель

К.х.н. Кучуров И.В. –
заместитель председателя

Член-корр. РАН Дильман А.Д.

Член-корр. РАН Третьяков Е.В.

Асп. Алексеева В.А.

К.х.н. Архипова Д.М.

Бинятова Р.Н.

К.х.н. Гордеев Е.Г.

Д.х.н. Елисеев О.Л.

Ерофеева А.В.

Кундрюкова О.В.

К.х.н. Ларин А.А.

К.х.н. Прима Д.О.

Асп. Провоторова Д.В.

К.х.н. Сахарова Л.Т.

Д.х.н. Ферштат Л.Л.

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



Уважаемые коллеги!

От имени Отделения химии и наук о материалах РАН рад приветствовать участников II Научной конференции «Искусственный интеллект в химии и материаловедении». Эта встреча проходит в особое время, когда мы становимся свидетелями глубокой трансформации науки и технологий. Если еще совсем недавно искусственный интеллект рассматривался как самостоятельная цель исследований, то сегодня мы уверенно вступаем в эпоху «ИИ для химии».

Впервые о наступлении этой эпохи сказал в своем выступлении академик В. П. Анаников на Форуме будущих технологий 21 февраля 2025 г. С тех пор этот прогноз нашел яркое подтверждение в многочисленных научных работах и практических приложениях по всему миру. Международное сообщество демонстрирует единую тенденцию: искусственный интеллект перестает быть отвлечённым инструментом, а становится интеллектуальным ядром химических исследований, разработок новых материалов, роботизации лабораторий, цифрового моделирования и устойчивых технологических решений. Для отечественной науки этот вызов особенно важен. Россия обладает сильными школами в области химии и материаловедения, и интеграция ИИ в эти области открывает перед нами уникальные возможности. Не менее значимым является и вклад ИИ в подготовку кадров для науки и промышленности: персонализированная исследовательская траектория, цифровые подходы, интеллектуальные системы наставничества помогут подготовить новое поколение исследователей, готовых к работе в условиях стремительно меняющейся научно-технологической картины

мира.

Выбор тематики конференции отражает глобальные тренды и стратегические задачи. Сегодня мы не только обсуждаем научные идеи, но и формируем интеллектуальную инфраструктуру XXI века, где химия и искусственный интеллект становятся взаимно усиливающими партнерами. Желаю участникам конференции плодотворной работы, смелых идей и новых открытий. Убеждён, что совместными усилиями мы внесём значимый вклад в развитие мировой науки и в укрепление технологического лидерства нашей страны.

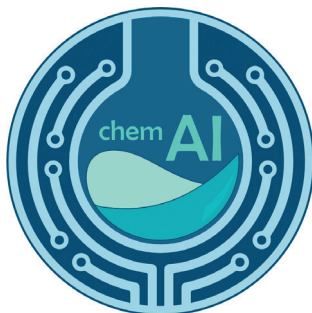
Академик-секретарь ОХНМ РАН,
Академик М. П. Егоров

Тематические блоки конференции

- Цифровизация и стратегии ИИ в науке:
открытие, лекции, панельная дискуссия.
- ИИ в химии, материаловедении и устойчивом развитии:
пленарные доклады, научные сессии, постеры, круглый стол.
- ИИ в производстве и промышленных приложениях:
индустриальные доклады, технологические кейсы, круглый стол.
- Цифровая трансформация компаний и сервисов:
сессии от компаний и представителей бизнеса.
- Образование, кадры, стартапы:
панельные дискуссии, молодежная секция, обсуждения.

Основные направления

- AI в науке
- AI в образовании
- AI в разработке промышленных решений
- Междисциплинарные темы:
AI – технологии – химия – биология – медицина
- Современные исследования в химии
- Создание новых материалов



Программа II научной конференции
«ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ
В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ»

Artificial Intelligence
in Chemistry and Materials Science

17-21 ноября 2025 г.,
ИОХ им. Н. Д. Зелинского РАН, г. Москва

Ai2025.zioc.ru

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

17 ноября, понедельник

9:00-10:00 *Регистрация участников*

Конференц-зал

Председатель: академик Егоров Михаил Петрович

10:00-10:30

Вступительное слово

10:30-11:10

PL-01 академик Аветисян Арутюн Ишханович

«ИИ в науке: вызовы и возможности»

11:10-11:50

PL-02 д.ф.-м.н. Оганов Артем Ромаевич

«Предсказание и объяснение новых химических явлений и веществ»

11:50-12:10

Кофе-брейк

Конференц-зал

Председатель: чл.-корр. РАН Дильман Александр Давидович

12:10-12:40

KL-01 академик Хохлов Алексей Ремович

«Нейросетевой подход при поиске научной информации»

12:40-13:10

KL-03 чл.-корр. РАН Буряк Алексей Константинович

«Искусственный интеллект исправит ошибки в хроматографических и масс спектрометрических данных?»

Библиотека

Председатель: д.ф.-м.н. Оганов Артем Ромаевич

12:10-12:40

KL-02 д.х.н., проф. Курочкин Илья Николаевич

«Инструментарий ИИ для обработки, анализа и классификации спектров ГКР в биоаналитике»

	KL-04 д.ф.-м.н. Бурнаев Евгений Владимирович
12:40-13:10	«Генеративный мультиагентный искусственный интеллект для решения задач инженерии и физики»

13:10-14:30 Обед

Конференц-зал

Председатель: академик Хохлов Алексей Ремович

	Inv-01 д.х.н. Сабиров Денис Шамилевич
14:30-14:50	«Цифровая органическая химия на основе информационно-энтропийных дескрипторов»

	Inv-04 к.б.н. Унанян Лерник Суренович
14:50-15:10	«Хемогеномика и молекулярная динамика мультитаргетных производных пиперазинов»

	OP-01 д.т.н., проф. Бринк Иван Юрьевич
15:10-15:25	«Цифровой учебник»

	OP-04 д.ф.-м.н., проф. Солдатов Александр Владимирович
15:25-15:40	«Технологии ИИ для управления экспериментами при диагностике материалов и процессов на источниках синхротронного излучения»

	OP-07 к.ф.-м.н. Комаров Павел Вячеславович
15:40-15:55	«Оценка возможности лабораторного синтеза виртуально сгенерированных полимерных структур»

Библиотека

Председатель: д.х.н., проф. Курочкин Илья Николаевич

	Inv-02 д.х.н. Чусов Денис Александрович
14:30-14:50	«Искусственный интеллект против естественного и химических платформ?»

	Inv-05 д.ф.-м.н. Ананьев Иван Вячеславович
14:50-15:10	«Есть ли будущее у описательной кристаллохимии в эпоху «цифры»?»

	ОР-02 д.ф.-м.н. Квашнин Александр Геннадьевич
15:10-15:25	«Применение методов машинного обучения для моделирования свойств функциональных и конструкционных материалов»
	ОР-05 к.ф.-м.н. Лепешкин Сергей Владимирович
15:25-15:40	«USPEX: новая платформа для предсказания структуры с интеграцией ИИ-компонентов»
	ОР-08 к.х.н. Смирнова Анастасия Андреевна
15:40-15:55	«Выявление потенциальных ошибок машинного обучения в задачах молекулярной химии»
Красный уголок Председатель: чл.-корр. РАН Буряк Алексей Константинович	
	Inv-03 к.х.н. Афанасьев Олег Ильич
14:30-14:50	«Анализ литературных данных с использованием ИИ - что может пойти не так?»
	Inv-06 к.х.н. Павлов Александр Александрович
14:50-15:10	«Машинное обучение для сбора данных в научных и производственных задачах»
	ОР-03 Свердлов Юрий Вадимович
15:10-15:25	«ИИ-агент на основе LLM для корреляционного анализа свойств в гомологических рядах малых молекул»
	ОР-06 д.х.н., проф. Султанова Римма Марсельевна
15:25-15:40	«Синтез и свойства аминов и аммонийных солей, содержащих циклоацетальный и гем-дихлорциклопропановый фрагменты»
	ОР-09 д.х.н. Потапов Андрей Сергеевич
15:40-15:55	«Анализ взаимосвязей структура-сенсорный отклик в обнаружении фосфат- и арсенат-анионов с использованием люминесцентных металлоорганических координационных полимеров»

Конференц-зал

Председатель: *академик Анаников Валентин Павлович*

16:05-17:05

PL-03 академик РАО Черниговская Татьяна Владимировна
«Битва интеллектов»

17:10-19:00

Постерная сессия

Приветственный фуршет

18 ноября, вторник

Конференц-зал

Председатель: академик Терентьев Александр Олегович

- 10:00-10:40 PL-04 академик Поройков Владимир Васильевич
«Большие данные, естественный и искусственный интеллект в создании лекарственных препаратов»
- 10:40-11:20 PL-05 академик Анаников Валентин Павлович
«Цифровое сотворчество в научных исследованиях»
- 11:20-11:40 Кофе-брейк

Конференц-зал

Председатель: к.х.н. Кучуров Илья Владимирович

- 11:40-12:10 KL-05 чл.-корр. РАН Люлин Сергей Владимирович
«MICROSCAN — новая база ИК-спектров частиц микропластика для разработки и тестирования моделей машинного обучения»
- 12:15-12:35 Inv-07 к.х.н. Митрофанов Артем Александрович
«Искусственный интеллект для дизайна новых материалов»
- 12:35-12:55 Inv-10 д.ф.-м.н. Василевская Валентина Владимировна
«Методы машинного обучения для поиска и классификации упорядоченных структур в самоорганизующихся полимерных системах»
- 12:55-13:15 Inv-13 д.ф.-м.н. Хренова Мария Григорьевна
«Механизмы ферментативных реакций в эпоху ИИ»
- 13:15-13:35 Inv-16 к.х.н. Шолохова Анастасия Юрьевна
«Искусственный интеллект в газовой хромато-масс-спектрометрии: от предсказания индексов удерживания до построения структуры неизвестных соединений»

Библиотека

Председатель: академик Поройков Владимир Васильевич

11:40-12:10 KL-06 чл.-корр. РАН Мерзликин Александр Михайлович
«Синергия комбинационного рассеяния и методов ИИ в медицинской диагностике»

12:15-12:35 Inv-08 д.х.н. Скорб Екатерина Владимировна
«Метрики для химического информирования моделей при обработке научной информации»

12:35-12:55 Inv-11 к.х.н. Нартова Анна Владимировна
«Глубокое машинное обучение как инструмент для рутинного анализа данных микроскопии»

12:55-13:15 Inv-14 к.ф.-м.н. Яньшолё Вадим Владимирович
«Поиск пиков в ВЭЖХ-МС данных для задач метаболомики»

13:15-13:35 Inv-17 к.ф.-м.н. Шاپеев Александр Васильевич
«Квантовая химия и искусственный интеллект: от моделей к автоматизации вычислений»

Красный уголок

Председатель: к.х.н. Ларин Александр Александрович

12:15-12:35 Inv-09 д.х.н. Ставрианиди Андрей Николаевич
«Машинное обучение для моделирования параметров удерживания в условиях жидкостной хроматографии»

12:35-12:55 Inv-12 Козлов Константин Сергеевич
«Открытие новых реакций с помощью системы поиска в большом наборе масс-спектрометрических данных»

Inv-15 к.х.н. Восков Алексей Леонидович
12:55-13:15 «Программа SMOKERAND для контроля качества генераторов псевдослучайных чисел для научных и инженерных расчётов»

Inv-18 Злобин Иван Сергеевич
13:15-13:35 «Бимодальный трансформер для автоматической интерпретации спектров ЯМР»

13:35-15:00 Обед

Конференц-зал

Председатель: к.х.н. Митрофанов Артем Александрович

ОР-10 к.б.н. Столбов Леонид Алексеевич
15:00-15:15 «Машинное обучение на основе самосогласованного экстремального классификатора для решения широкого круга QSPR/QSAR задач»

ОР-13 д.х.н. Бурмистров Владимир Владимирович
15:15-15:30 «Потребности в ИИ для доведения до клиники новых анальгетических препаратов»

ОР-16 к.х.н. Фролов Никита Андреевич
15:30-15:45 «Синтетические подходы и применение машинного обучения для разработки катионных биоцидов»

ОР-19 к.т.н. Бойченко Екатерина Сергеевна
15:45-16:00 «Применение QSPR в прогнозировании характеристик наноматериалов для анализа биологических образцов»

ОР-22 к.х.н. Суслов Евгений Владимирович
16:00-16:15 «ЦНС активные молекулы с липофильными фрагментами»

ОР-25 к.х.н. Щегольков Евгений Вадимович
16:15-16:30 «Дизайн биоактивных соединений на основе полифторбензойных кислот»

Библиотека

Председатель: к.х.н. Нартова Анна Владимировна

- | | |
|-------------|--|
| 15:00-15:15 | ОР-11 д.ф.-м.н. Квашнин Дмитрий Геннадьевич
«Исследование электронных свойств и особенностей образования мономолекулярных слоев в 0D/2D гибридных наноструктурах» |
| 15:15-15:30 | ОР-14 Зайцев Роман Геннадиевич
«Архитектура специализированного программного обеспечения многослойных нейронных сетей для анализа изображений электронной микроскопии» |
| 15:30-15:45 | ОР-17 к.ф.-м.н. Еремин Роман Александрович
«Основанные на данных оценки влияния конфигурационного многообразия на термодинамические свойства» |
| 15:45-16:00 | ОР-20 к.т.н. Злобина Ирина Владимировна
«Оптическая когерентная томография как метод определения дефектов в структуре полимерных композитов на основе углеродного волокна и полиэфиркетона» |
| 16:00-16:15 | ОР-23 к.х.н. Коровин Алексей Николаевич
«Предсказание параметров спектров флуоресценции молекул с использованием графовых нейросетей» |
| 16:15-16:30 | ОР-26 к.х.н. Виль Вера Андреевна
«Электрохимические методы образования С-С и С-О связей» |

Красный уголок

Председатель: к.ф.-м.н. Яньшолё Вадим Владимирович

- | | |
|-------------|---|
| 15:00-15:15 | ОР-12 к.х.н. Архипова Дарья Михайловна
«База микрофотографий солей фосфония для решения задач молекулярного распознавания, предсказания морфологии и анализа иерархических структур» |
| 15:15-15:30 | ОР-15 к.ф.-м.н. Никитин Никита Юрьевич
«Формирование синтетических наборов данных для обучения, тестирования и валидации моделей машинного обучения в материаловедении» |

15:30-15:45	ОР-18 к.х.н. Каликин Николай Николаевич «Прогноз растворимости в scCO_2 с помощью термодинамически-информированных ML-моделей»
15:45-16:00	ОР-21 к.т.н. Иванова Анастасия Александровна «Исследование молекулярных механизмов адсорбции комбинированных систем поверхностно-активных веществ на границе раздела нефть-вода методом молекулярной динамики»
16:00-16:15	ОР-24 к.х.н. Кошелев Даниил Сергеевич «Экспертная система для интерпретации ИК спектров на основе свёрточной нейронной сети с мультиклассовой классификацией в Телеграмм-боте»
16:30-16:50	Кофе-брейк
Конференц-зал Председатель: к.х.н. Фролов Никита Андреевич	
16:50-17:00	Short-01 Аракелян Лиана Ашотовна «Датасеты по цитотоксичности ионных жидкостей»
17:00-17:10	Short-04 Крылов Иван Николаевич «Тензорные разложения спектров флуоресценции природных вод: проблемы и решения»
17:10-17:20	Short-07 Юськина Екатерина Андреевна «Неинвазивный скрининг онкологических заболеваний на основе потенциометрического мультисенсорного анализа мочи в сочетании с методами машинного обучения»
17:20-17:30	Short-10 Буданов Михаил Ярославович «Гибридный ИИ/МД подход для дизайна антибиотико-связывающих циклических пептидов»
17:30-17:40	Short-13 Дубиняк Андрей Максимович «Применение методов машинного обучения для предсказания физико-химических свойств потенциальных топливных добавок, получаемых из биосырья»

17:40-17:50	Short-16 Беспалов Иван Андреевич «POGE: физически-информированный фреймворк для дизайна полимеров»
17:50-18:00	Short-19 Радулов Александр Сергеевич «PLANT ANALYZER: инструмент для автоматизации агрохимических исследований на основе моделей глубокого обучения»
Библиотека	
Председатель: к.х.н. Битюков Олег Вадимович	
16:50-17:00	Short-02 Самсоненко Аркадий Антонович «Данные ВР ЭПР спектроскопии как фактор для повышения точности моделей оптимизации структуры Д-А молекул»
17:00-17:10	Short-05 Михайлова Анастасия Андреевна «Структура и адсорбционные свойства наночастиц Cu-Au в реактивных средах»
17:10-17:20	Short-08 Федяева Мария Александровна «Систематическое исследование кластеров на основе бора: структуры, устойчивость и перспективы в качестве высокоэнергетических материалов»
17:20-17:30	Short-11 Чалый Василий Антонович «Моделирование ICP-CVD с использованием машинно-обученных межатомных потенциалов»
17:30-17:40	Short-14 Поликовский Трофим Александрович «Глубокое обучение в люминесцентной термометрии»
17:40-17:50	Short-17 Смирнов Максим Вадимович «Нейросетевое моделирование редокс-потенциалов малых органических молекул с учетом растворителя»
17:50-18:00	Short-20 Кулаев Кирилл Дмитриевич «DeepFit: физически и химически информированный анализ XAS-спектров для определения атомной структуры»

Красный уголок

Председатель: к.х.н. Архипова Дарья Михайловна

	Short-03 Никифоров Дмитрий Николаевич
16:50-17:00	«Применение методов искусственного интеллекта для прогнозирования радиационной стойкости органических соединений – от сбора информации к построению моделей»
	Short-06 Ворожцов Артем Павлович
17:00-17:10	«Большие языковые модели (LLM) в химии: как это работает и зачем это нужно»
	Short-09 Остарков Степан Николаевич
17:10-17:20	«Разработка оптимального метода получения векторных представлений химических структур»
	Short-12 Шандыбо Максим Алексеевич
17:20-17:30	«Методы автоматизированного парсинга химических статей»
	Short-15 Набиев Илкин Мехман оглы
17:30-17:40	«Разработка ИИ-ассистента для анализа патентной информации в области обогащения и переработки минерального сырья»
	Short-18 Пустовалова Татьяна Владимировна
17:40-17:50	«Разработка и внедрение RAG-системы для ИИ-ассистента по электронному лабораторному журналу»
	Short-21 Рябченко Дарья Александровна
17:50-18:00	«Оценка надёжности моделей для генерации молекул на примере KRAS»

19 ноября, среда

Конференц-зал

Председатель: д.х.н. Ферштат Леонид Леонидович

10:00-10:30 KL-07 д.х.н. Шмидт Александр Федорович
«Интерпретируемый AI в исследованиях сложных каталитических процессов»

10:35-10:55 Inv-19 Бойко Даниил Александрович
«Химия без человека: от масс-спектрометрии до предсказания реакций»

10:55-11:15 Inv-22 д.ф.-м.н. Рыльцев Роман Евгеньевич
«Атомистическое моделирование многокомпонентных неупорядоченных систем: от первых принципов к фундаментальным моделям»

11:15-11:35 Inv-25 к.ф.-м.н. Муравлева Екатерина Анатольевна
«Применение больших языковых моделей в химии»

11:35-11:55 Inv-28 к.ф.-м.н. Ушенин Константин Сергеевич
«LAGNet — предсказание электронной плотности молекул через глубокие нейронные сети»

Библиотека

Председатель: чл.-корр. РАН Третьяков Евгений Викторович

10:00-10:30 KL-08 к.ф.-м.н. Тупикина Елена Юрьевна
«Электронное строение литиевых и водородных связей: как ML расширяет возможности квантовой химии и молекулярной динамики»

10:35-10:55 Inv-20 д.ф.-м.н. Эварестов Роберт Александрович
«Моделирование многостенных нанотрубок с использованием нейросетей и машинного обучения»

10:55-11:15 Inv-23 д.х.н. Александров Евгений Викторович
«Дескрипторы для прогнозирования механических свойств металл-органических координационных полимеров»

11:15-11:35 Inv-26 к.ф.-м.н. Снытников Валерий Николаевич
«Интеллектуальное проектирование процессов лазерной термохимии»

11:35-11:55 Inv-29 д.х.н. Агина Елена Валериевна
«Машинное обучение для “Электронного носа”»

Красный уголок

Председатель: к.х.н. Бурыкина Юлия Владимировна

10:35-10:55 Inv-21 Краснов Лев Валерьевич
«Использование машинного обучения для прогнозирования противораковой активности комплексов переходных металлов на основе новой базы данных METALCYTOTOXDB»

10:55-11:15 Inv-24 д.х.н. Файзуллина Лилия Халитовна
«Левоглюкозенон – биовозобновляемая платформа в органическом синтезе»

11:15-11:35 Inv-27 д.ф.-м.н. Аbruков Виктор Сергеевич
«Нейронные сети в разработке генома высокоэнергетических материалов»

11:35-11:55 Inv-30 к.ф.-м.н. Киселев Виталий Георгиевич
«Количественные квантовохимические расчеты термохимии и кинетики элементарных реакций: современные методы и их ограничения»

11:55-12:15 Кофе-брейк

Конференц-зал

Председатель: д.ф.-м.н. Рыльцев Роман Евгеньевич

12:15-12:35	Inv-31 д.х.н. Кирсанов Дмитрий Олегович «Машинное обучение для решения задач аналитической химии»
12:35-12:55	Inv-34 к.ф.-м.н. Поляков Игорь Вадимович «Применение методов машинного обучения для предсказания спектров флуоресцентных белков на основе физически обоснованных дескрипторов»
12:55-13:10	ОР-28 д.ф.-м.н. Щелкачев Николай Михайлович «Трансферное обучение для ускорения предсказания динамики сложных ансамблей атомов»
13:10-13:25	ОР-31 д.ф.-м.н. Куприянова Галина Сергеевна «Сравнительный анализ метода Хюккеля и DFT расчета состояний углеродных структур»

Библиотека

Председатель: д.х.н. Александров Евгений Викторович

12:15-12:35	Inv-32 к.ф.-м.н. Медведев Михаил Геннадьевич «Приложения и подводные камни ИИ в химических исследованиях»
12:35-12:55	Inv-35 к.б.н. Тарасова Ольга Александровна «Информационно-вычислительная платформа для поиска потенциальных противовирусных соединений с применением машинного обучения и искусственного интеллекта»
12:55-13:10	ОР-29 д.х.н. Свитанько Игорь Валентинович «Статистическое нейросетевое моделирование активной области лиганда»
13:10-13:25	ОР-32 к.х.н. Аверочкин Глеб Михайлович «Физически обоснованное машинное обучение для полимерной информатики: систематическое исследование дескрипторов, моделей и интерпретируемости»

Красный уголок

Председатель: д.х.н. Файзуллина Лилия Халитовна

- Inv-33 д.т.н. Сычев Максим Максимович
12:15-12:35 «Кристалломорфный дизайн сотовых материалов нового поколения»
-
- Inv-36 к.ф.-м.н. Редьков Алексей Викторович
12:35-12:55 «In silico разработка технологии материалов: от структуры кристалла к промышленной технологии синтеза»
-
- ОР-30 к.х.н. Домнин Антон Владимирович
12:55-13:10 «Влияние D3 поправок на точность MLIP-моделей при моделировании слоистых кристаллов»
-
- ОР-33 к.ф.-м.н. Фомин Евгений Владимирович
13:10-13:25 «Исследование процессов рекристаллизации в ГЦК металлах с применением метода клеточных автоматов и машинного обучения»
-
- 13:25-15:00 Обед

Конференц-зал

Председатель: д.х.н. Кирсанов Дмитрий Олегович

- Short-22 Проценко Богдан Олегович
15:00-15:10 «Агенты на основе больших языковых моделей и библиотеки спектров для анализа данных спектроскопии рентгеновского поглощения»
-
- Short-25 Бегларян Бабкен Гагикович
15:10-15:20 «Учёт заряда при предсказании ИК-спектров полициклических ароматических углеводородов: XGBoost и графовая нейронная сеть»
-
- Short-28 Рылов Александр Валерьевич
15:20-15:30 «Нейросетевая модель для определения состава и параметров плазмы по спектральным данным»
-

15:30-15:40	Short-31 Бухтеева Екатерина Олеговна «Анализ геометрико-топологических характеристик свободного пространства в металл-органических каркасах»
15:40-15:50	Short-34 Голов Иван Владимирович «Contrastive Spectrum-Molecular Pretraining (CSMP): построение поискового химического пространства для сопоставления масс-спектров и молекулярных структур органических соединений»
15:50-16:00	Short-37 Смирнов Сергей Артемович «Моделирование фотохимических процессов в As_2S_3 при облучении светом ИК и УФ диапазонов»
16:00-16:10	Short 40 Новицкий Георгий Олегович «Предсказание функциональной зависимости растворимости веществ молекулярного строения в бинарных смесях растворителей от их объемного соотношения»

Библиотека

Председатель: к.ф.-м.н. Медведев Михаил Геннадьевич

15:00-15:10	Short-23 Мотаев Кирилл Анатольевич «Машинное обучение в дизайне катализаторов»
15:10-15:20	Short-26 Беляев Сергей Александрович «Оценка корреляции «Химический состав-микроструктура-механические свойства» для отливок из высокопрочного чугуна»
15:20-15:30	Short-29 Рубцов Иван Дмитриевич «Поиск матриц для иммобилизации радиоактивных отходов, содержащих эвтектики галогенидов, с помощью методов машинного обучения»
15:30-15:40	Short-32 Смурова Алина Александровна «Способы модернизации технологии окисления циклогексана»

15:40-15:50 Short-35 Карандеева Алена Сергеевна
«Синтез спирохроманпиримидинов на основе пирогаллола»

15:50-16:00 Short-38 Сысоев Евгений Игоревич
«Разработка и исследование свойств 3D-печатных керамических носителей катализаторов защитного слоя для процессов гидроочистки топлива»

16:00-16:10 Short-44 Глазкова Дарья Александровна
«Новые материалы в области электрохимии: тонкие проводящие маты на основе GO/rGO»

Красный уголок

Председатель: к.ф.-м.н. Редьков Алексей Викторович

15:00-15:10 Short-24 Осипов Владислав Тимофеевич
«Materials Analyzer: online сервис оценки ширины запрещенной зоны твердотельных материалов»

15:10-15:20 Short-27 Быков Андрей Викторович
«Дизайн гибридных галогеновисмутатов(III) и галогеноантимонатов(III) с 1D-размерной анионной подструктурой для оптоэлектронных приложений методами машинного обучения»

15:20-15:30 Short-30 Дудаков Иван Васильевич
«Синергия LLM и GNN: новый подход к предсказанию свойств неорганических кристаллов»

15:30-15:40 Short-33 Коняхина Аполлинария Юрьевна
«Разработка алгоритмов для анализа морфологии и скорости роста кристаллов щеточных сополимеров»

Short-36 Барсуков Андрей Николаевич
15:40-15:50 «Моделирование пористой структуры $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ с игольчатой морфологией частиц»

Short-39 Широбоков Владимир Павлович
15:50-16:00 «Использование машинного обучения для предсказания интенсивности второй гармоники в металлоорганических каркасах»

Short-42 Самандарзода Насрулло Юсуф
16:00-16:10 «Синтез и изучение холановой кислоты с адамантановой карболовой кислотой»

16.10-16.40 Кофе-брейк

Конференц-зал

Председатель: д.ф.-м.н. Щелкачев Николай Михайлович

ОР-34 д.х.н. Кашин Алексей Сергеевич
16:40-16:55 «Потерянные данные электронной микроскопии: масштабы проблемы и скрытый потенциал»

ОР-37 д.ф.-м.н. Пескова Елизавета Евгеньевна
16:55-17:10 «Комплекс программ для каталитической термохимии»

ОР-40 д.х.н. Жердев Анатолий Виталиевич
17:10-17:25 «Комплексы наночастица–белок как биоаналитические реагенты: выбор способов получения и оценка функциональных характеристик продуктов»

ОР-43 к.х.н. Макаров Дмитрий Михайлович
17:25-17:40 «Многоуровневый скрининг абсорбентов CO_2 с использованием методов машинного обучения»

Библиотека

Председатель: к.б.н. Тарасова Ольга Александровна

- | | |
|-------------|---|
| 16:40-16:55 | ОР-35 к.ф.-м.н. Попов Захар Иванович
«Новые материалы для производства водорода» |
| 16:55-17:10 | ОР-38 д.т.н. Куриганова Александра Борисовна
«Теоретические и технологические основы импульсного электролиза для получения электро- и каталитически активных материалов» |
| 17:10-17:25 | ОР-41 к.х.н. Мартынов Илья Вячеславович
«Лазерный синтез и фототермические свойства нанокompозитных мембран на основе TiN для генерации пара» |
| 17:25-17:40 | ОР-44 Даулбаев Талгат Кайратулы
«Матча: генеративная модель для быстрого молекулярного докинга» |

Красный уголок

Председатель: д.т.н. Сычев Максим Максимович

- | | |
|-------------|---|
| 16:40-16:55 | ОР-36 к.х.н. Серов Никита Юрьевич
«Программно-аппаратная платформа для интеллектуального робота-химика» |
| 16:55-17:10 | ОР-39 д.т.н. Вобликова Татьяна Владимировна
«Изучение потенциала ИК-Фурье спектроскопии в сочетании с хеометрией для определения видовой аутентичности молока» |
| 17:10-17:25 | ОР-42 к.ф.-м.н. Мареев Евгений Игоревич
«Бесконтактная пикосекундная термометрия кремния на основе широкополосного суперконтинуума и машинного обучения» |
| 17:25-17:40 | ОР-45 к.х.н. Лобова Наталья Анатольевна
«Игра порталов: кавитанды как система управления» |

- | | |
|-------------|--|
| 17:40-18:30 | Награждение призеров лучших устных и постерных докладов |
|-------------|--|

20 ноября, четверг

Конференц-зал, Библиотека

10:00-18:00

Форум «Искусственный интеллект в научно-технологическом развитии химической отрасли»



Программа форума

21 ноября, пятница

Конференц-зал

Сессия по проекту «Цифровая химия»

10:00-10:20	ОР-46 чл.-корр. РАН Третьяков Евгений Викторович «Цифровая магнетохимия»
10:20-10:40	ОР-47 к.х.н. Гербст Алексей Генрихович «Методы цифровой химии помогают объяснить необычные превращения углеводов»
10:40-11:00	ОР-48 к.х.н. Зубков Михаил Олегович «Рациональный дизайн фотокаталитических реакций»
11:00-11:20	ОР-49 к.х.н. Павельев Станислав Алексеевич «Цифровые технологии в органическом синтезе: передовые подходы и новые возможности»
11:20-11:40	ОР-50 д.х.н. Верещагин Анатолий Николаевич «Дизайн антибактериальных препаратов в 21 веке»
11:40-12:00	ОР-51 академик Анаников Валентин Павлович «Достижения и перспективы цифровой трансформации химической науки»
12:00-12:30	Заккрытие конференции

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

17 ноября, понедельник

-
- PP-1 к.х.н. Абдульмянов Алексей Рафикович
«QSPR модель для прогнозирования электронодонорности органических лигандов к катиону уранила»
-
- PP-2 к.х.н. Акентьева Татьяна Анатольевна
«База данных азометинов с небензоидными системами для машинного обучения»
-
- PP-3 Андреев Дмитрий Михайлович
«Фотокаталитическая стратегия синтеза производных бензотиофена»
-
- PP-4 Ануфриева Дарья Александровна
«Моделирование детонации высокоэнергетических материалов: интеграция квантово-химических расчетов и искусственных нейронных сетей»
-
- PP-5 Ануфриева Полина Сергеевна
«Создание «идеального» эксперимента с помощью метода нейросетевых последовательных приближений»
-
- PP-6 Арабов Рустам Искандарович
«Исследование решеточной теплопроводности и электрон-фононных взаимодействий в муаровых решетках»
-
- PP-7 Баландинский Даниил Андреевич
«Программа для оценки синергизма многокомпонентных композиций ПАВ»
-
- PP-8 Барановский Артем Денисович
«Синтез и антимикробная активность симметричных 1,3-бис(полифторфенил)мочевин»
-

-
- PP-9 Волкова Ольга Олеговна
«Верификация лекарств с помощью QCM: когда моделирование точно предсказало аффинность связывания с белком»
-
- PP-10 Володина Наталья Олеговна
«Применение методов линейного уменьшения размерности данных для анализа рамановских спектров многофазных керамик»
-
- PP-11 Волошин Владислав Мустафаевич
«Новые самовосстанавливающиеся полиуретаны на основе возобновляемого сырья»
-
- PP-12 Врублевский Дмитрий Борисович
«Перспективы применения нейросетевых алгоритмов в исследовании образования вакансии в гидриде магния с примесью замещения хрома»
-
- PP-13 к.х.н. Гашимова Элина Мансуровна
«Сравнение различных программ предварительной обработки данных для нецелевого УВЭЖХ-МС/ВР анализа мочи пациентов с онкологией и здоровых добровольцев»
-
- PP-14 Голов Иван Владимирович
«Искусственный интеллект в масс-спектральном анализе: предсказание молекулярной структуры органических соединений»
-
- PP-15 Голубев Артем Алексеевич
«Способ оценки синтетической доступности с помощью инструмента AiZynthFinder»
-
- PP-16 Гуревич Павел Евгеньевич
«Автоматизированный поиск ионов в масс-спектрах реакций кросс-сочетания»
-
- PP-17 Данилов Степан Егорович
«Разработка ретросинтетического ПО для проведения предварительного ТЭО»
-

-
- PP-18 к.х.н. Демина Софья Владимировна
«Структурное происхождение теплового расширения в соединениях Rb_2SO_4 и $\text{Rb}_2\text{Ca}_2(\text{SO}_4)_3$ »
-
- PP-19 Добрица Иван Игоревич
«Изучение влияния добавок карбидов и нитридов на микротвердость композиционного материала системы ВТ6-Ni-Al с применением подходов машинного обучения»
-
- PP-20 к.ф.-м.н. Екимова Татьяна Анатольевна
«Практика внедрения индустриальных проектов в образовательный процесс подготовки материаловедов»
-
- PP-21 к.ф.-м.н. Закиев Сергей Евгеньевич
«Паттерны – интеллектуальные кирпичики мезо- и макроструктуры композитов и других сложных материалов»
-
- PP-22 к.х.н. Заправдина Дарья Михайловна
«Потребность в цифровом помощнике для лаборатории органического синтеза»
-
- PP-23 Зарипов Радион Азизжонович
«Реконструкция фазовой диаграммы Тс-С с применением машинного обучения»
-
- PP-24 Зими́на Александра Дмитриевна
«Кинетика изменений молекулярной сложности в мономолекулярных реакциях»
-
- PP-25 Зими́на Александра Дмитриевна
«Цифровая классификация сложных химических реакций на основе информационной энтропии»
-
- PP-26 Зо́нов Роман Валерьевич
«Инструменты квантовой химии в изучении координационной химии фенантролиндиамидов»
-

-
- PP-27 Иваненко Тимур Юрьевич
 «Машинное обучение в анализе ЯМР спектров тяжёлых нефтей»
-
- PP-28 к.т.н. Иванова Нина Михайловна
 «Оценка объема использованных и потерянных данных в электронной микроскопии»
-
- PP-29 Иванова Юлия Федоровна
 «Моделирование условий синтеза компонентов смазочных материалов с заданными свойствами»
-
- PP-30 к.х.н. Исламов Денис Насимович
 «DFT исследование нового маршрута механизма реакции функционализации метана, катализируемой комплексами металлов подгруппы никеля»
-
- PP-31 Исхаков Адиль Фанильевич
 «Применение нейронных сетей для распознавания фазовых состояний жидких кристаллов нонил-бензойной кислоты»
-
- PP-32 Камалова Анастасия Владимировна
 «Классификационная модель для предсказания результата со-кристаллизации трех компонентов»
-
- PP-33 Капанова Ксения Алексеевна
 «Предсказание обменного смещения для магнитных гетероструктурных наночастиц с помощью машинного обучения»
-
- PP-34 Караулова Алина Николаевна
 «Применение отходов переработки минерально-сырьевой промышленности в производстве удобрений»
-
- PP-35 Кирпаль Юлия Германовна
 «Прогнозирование свойств эрозионностойких лакокрасочных покрытий с использованием машинного обучения»
-

-
- PP-36 Клименко Мария Михайловна
«Изучение сольватационных процессов в карбонатных электролитах для литий-ионных аккумуляторов методом ИК-Фурье спектроскопии НПВО»
-
- PP-37 Корогод Дмитрий Валерьевич
«Разработка и применение машиннообучаемых потенциалов, явно учитывающих электростатическое взаимодействие»
-
- PP-38 Котлов Егор Сергеевич
«Молекулярный дизайн новых молекул для лечения рака молочной железы»
-
- PP-39 Кравцов Алексей Валерьевич
«Оценка термодинамических свойств методами машинного обучения и симметрия кристаллов»
-
- PP-40 Кулаев Кирилл Дмитриевич
«Нелокальная модель функционала плотности на основе механизма внимания»
-
- PP-41 к.х.н. Кустова Татьяна Владимировна
«Внутриклеточная локализация и фотоинаktivация опухолевых клеток хлориновыми фотосенсибилизаторами с различными функциональными заместителями»
-
- PP-42 к.х.н. Лесников Владислав Константинович
«Циклические поли-N-гидроксиамины — конформационно-настраиваемые синтоны самособирающихся систем»
-
- PP-43 к.ф.-м.н. Ломова Мария Владимировна
«Молекулярный дизайн новых лекарств для лечения рака молочной железы»
-
- PP-44 Луканов Михаил Михайлович
«Применение генеративных подходов при обучении межатомных потенциалов на примере высокоэнтропийных карбидов»
-

PP-45	Лысенко Максим Русланович	«Оптимизация химико-технологических процессов с использованием LSTM»
PP-46	Мануковская Диана Владимировна	«Комбинаторно-топологический подход для количественной характеристики внутренней структуры природоподобных материалов»
PP-47	Мартыненко Павел Александрович	«Сравнение квантово-химического подхода и смешанного подхода с использованием ИИ при изучении реакций с участием силандиамидов»
PP-48	Маслов Павел Алексеевич	«Исследование осаждения золота на поверхности меди с применением машинно-обучаемого потенциала»
PP-49	Махилев Роман Алексеевич	«Использование синтетических данных для расширения обучающих выборок в материаловедении»
PP-50	Мешина Ксения Ильинична	«Сочетание экспериментальных и расчетных подходов для конструирования высокоэффективных биосовместимых фотокатализаторов»
PP-51	Назарова Виктория Валерьевна	«Региоселективность реакции Хека: изучение методом квантовой молекулярной динамики»
PP-52	к.ф.-м.н. Назарычев Виктор Михайлович	«Атомистическое компьютерное моделирование адсорбции термопластичных полиимидов на поверхности оксидов металлов»
PP-53	Нам Евгений Владиславович	«Интерпретируемость скрытого пространства языковой модели посредством штрафа за недиагональные весовые матрицы»

-
- PP-54 Насырова Дарина Ильдаровна
«Конвертация структуры молекулярного кристалла в граф для обучения нейронных сетей»
-
- PP-55 Наумович Владислав Олегович
«Создание базы термохимических данных процесса восстановительного элиминирования для систем машинного обучения»
-
- PP-56 Паршин Тимур Вячеславович
«Модификация палладиевых катализаторов ННС-карбенами для избирательного превращения терминальных олефинов»
-
- PP-57 Позов Богдан Елисеевич
«Инженерия дефектов в наночастицах LiNbO_3 для адсорбции органических красителей»
-
- PP-58 Проломов Илья Викторович
«Обратное моделирование на основе суррогатной ML- модели: калибровка кинетических параметров технологической схемы на примере производства LDPE»
-
- PP-59 к.х.н. Пустолайкина Ирина Анатольевна
«In silico исследование новых нафтилсодержащих тиосемикарбазидов как перспективных противотуберкулёзных агентов»
-
- PP-60 Путилин Кирилл Вячеславович
«Исследование коктейля фотокатализаторов на основе 3DPA2FBN»
-
- PP-61 Разумова Ярослава Евгеньевна
«Синтез и люминесцентные свойства алюминатов $(\text{Gd,Y})\text{AlO}_3$, активированных ионами Eu^{3+} »
-
- PP-62 д.х.н. Раскильдина Гульнара Зинуровна
«Функционализация карбонильных соединений DMAPA и молекулярный докинг аминов и ЧАС на их основе»
-

PP-63	Рыжов Александр Павлович «Разработка пользовательских интерфейсов к ИИ моделям в химии и материаловедении»
PP-64	Самолыга Александр Александрович «Оптимизация параметров функционала BHHLYP для улучшения точности TDDFT расчётов спектральных параметров систем с переносом заряда»
PP-65	Самороднова Анастасия Павловна «Термодинамическая самоорганизация металлических катализаторов на графитовом носителе в процессе реакции выделения водорода»
PP-66	Сидорова Элина Сергеевна «Прогнозирование растворимости органических соединений в различных растворителях комбинированной графовой нейронной сетью»
PP-67	Скуратович Владимир Андреевич «Нанесенные катализаторы вида Cu/C в реакциях образования связи C-C и C-гетероатом»
PP-68	д.х.н. Смирнова Нина Владимировна «Образовательная платформа для довузовской подготовки в области химических технологий»
PP-69	Смолянинов Семен Константинович «Использование языковых моделей BERT для классификации публикации базы данных ChEMBL по биологическим активностям»
PP-70	к.ф.-м.н. Суханова Екатерина Владимировна «Моделирование структуры и свойств диаманоподобных наноматериалов BN/графен»
PP-71	Тарakanовская Дарья Денисовна «Прогнозирование оптоэлектронных свойств мультрезонансных TADF-эмиттеров с использованием графовых и мультимодальных нейронных сетей»

-
- PP-72 д.ф.-м.н. Тер-Оганесян Никита Валерьевич
«Разработка межатомного потенциала для моделирования цеолитоподобных имидазолатных каркасов»
-
- PP-73 Терентьева Дарья Витальевна
«Актуальность применения искусственного интеллекта для инжиниринга композиционных материалов-накопителей водорода на основе магния»
-
- PP-74 Терентьева Дарья Витальевна
«Перспективы применения ИИ методов в исследовании поверхностных взаимодействий: адсорбция углерода на $\text{MgH}_2(110)$ »
-
- PP-75 Филиппова Дарья Сергеевна
«Направленный дизайн антимикробных наночастиц с использованием машинного обучения»
-
- PP-76 Ханипова Алия Маратовна
«Влияние электроноакцепторных заместителей на каталитическую активность и физические свойства $\text{Au}/\text{BIAN-NHC}$ комплексов»
-
- PP-77 Ходько Никита Сергеевич
«Моделирование свойств стеклянных матриц методами машинного обучения»
-
- PP-78 Холичева Ангелина Алексеевна
«Маскированные автоэнкодеры как базовые модели имджеомики в сканирующей электронной микроскопии»
-
- PP-79 Хоружик Степан Андреевич
«Синтез структурных аналогов фалькариндиола»
-
- PP-80 Хрисанфов Михаил Дмитриевич
«Универсальный подход к поиску ошибок в базах экспериментальных данных методами машинного и глубокого обучения»
-
- PP-81 Чадин Артем Артемович
«Внутримолекулярная циклизация цианаренового фотокатализатора под действием видимого света»
-

-
- PP-82 Чалых Ольга Константиновна
«Разработка машинно-обучаемых потенциалов, явно учитывающих дисперсионное взаимодействие»
-
- PP-83 Шайдуллин Руслан Радикович
«Доступны ли энергетические барьеры в 50–70 ккал/моль для реакций в органическом синтезе в растворе»
-
- PP-84 Шемет Анна Кирилловна
«Аспекты кристаллического строения ряда производных фурана с пираноновым фрагментом с использованием ПО CrystalExplorer»
-
- PP-85 Шпак Амалия Олеговна
«Синтез и характеристика аллильных комплексов палладия с ННС-лигандами, содержащими электроноакцепторные заместители»
-
- PP-86 Эрлих Татьяна Вячеславовна
«Система для фиксации мелких лабораторных животных с мониторингом физиологических параметров “Антикус”»
-

Присоединяйтесь к нам!



Сайт Научной школы:

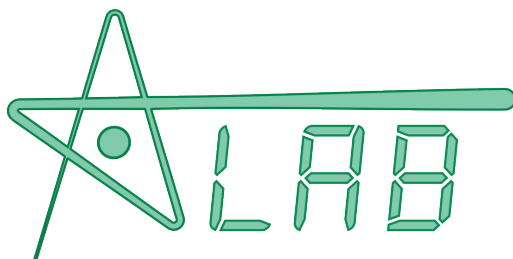
ananikovlab.ru

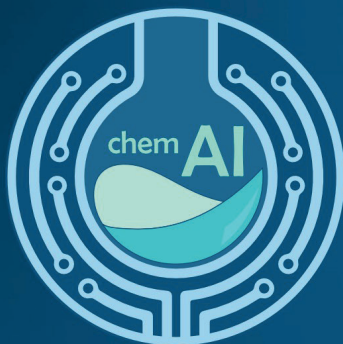


Telegram-канал Научной школы:

t.me/ananikovlab

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН
Россия, 119991, Москва, Ленинский проспект 47
e-mail: alab@ioc.ac.ru





zioc.ru/science/conf/ai2025



Российская Академия Наук



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



Минпромторг
России

