

PL-1

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ**В. П. Анаников**

*Институт органической химии им. Н. Д.Зелинского РАН,
Ленинский проспект, 47, Москва; <http://AnanikovLab.ru>
E-mail: val@ioc.ac.ru*

В настоящем докладе обсуждаются современные тенденции в развитии приложений алгоритмов искусственного интеллекта в создании высокоактивных катализаторов [1], анализе спектральных данных в решении химических задач [2] и понимании механизмов формирования наноструктур [3].

Библиографический список

1. Eremin D.B., Galushko A.S., Boiko D.A., Pentsak E.O., Chistyakov I.V., Ananikov V. P., "Toward Totally Defined Nanocatalysis: Deep Learning Reveals the Extraordinary Activity of Single Pd/C Particles", *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, 144, 13, 6071–6079. <https://doi.org/10.1021/jacs.2c01283>
2. Boiko D.A., Kozlov K.S., Burykina Yu.V., Ilyushenkova V.V., Ananikov V.P. "Fully Automated Unconstrained Analysis of High-Resolution Mass Spectrometry Data with Machine Learning", *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, 144, 32, 14590-14606. <https://doi.org/10.1021/jacs.2c03631>
3. Boiko D.A., Pentsak E.O., Cherepanova V.A., Gordeev E. G., Ananikov V.P. "Deep neural network analysis of nanoparticle ordering to identify defects in layered carbon materials", *Chem. Sci.*, **2021**, 12, 7428-7441. <https://doi.org/10.1039/D0SC05696K>

Исследование выполнено при поддержке гранта Научной школы НШ-5199.2022.1.3.