

КНИЖНАЯ ВЫСТАВКА

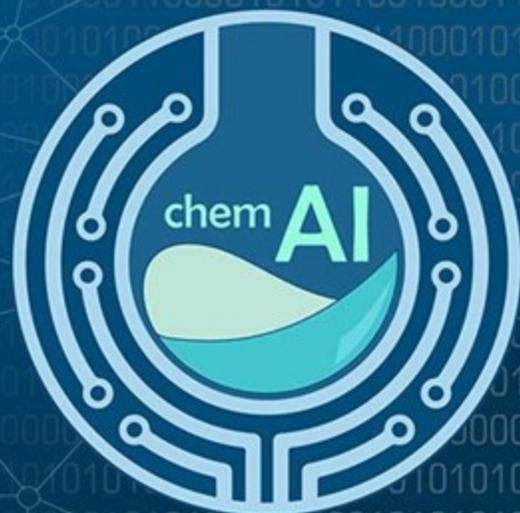


# ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Artificial Intelligence in Chemistry and Materials Science

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

II Научная конференция  
17-21 ноября 2025



# ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ

## В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ



«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...»

Академик-секретарь ОХНМ РАН М. П. Егоров

# КНИГИ

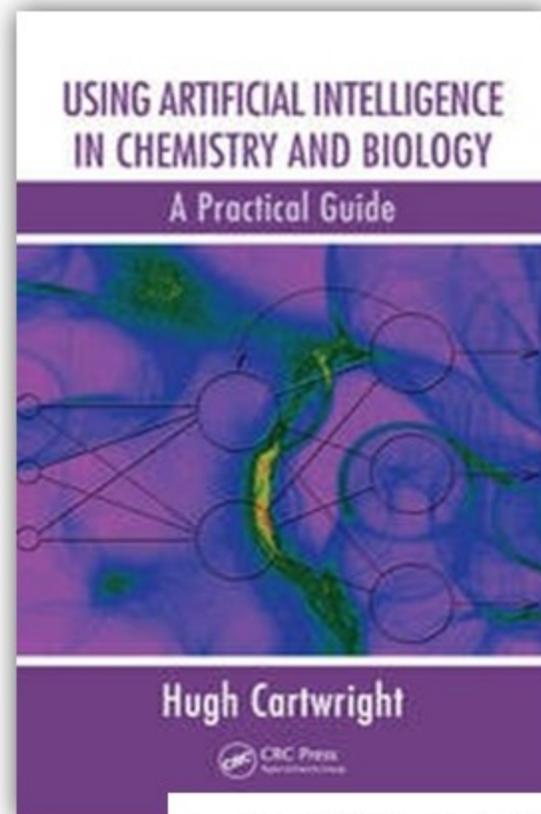
## «Использование искусственного интеллекта в химии и биологии»



Специалисты по информатике могут воспользоваться этой книгой, чтобы получить более четкое представление о том, как ученые-экспериментаторы используют инструменты искусственного интеллекта.

Химики, биохимики, физики и другие специалисты в области экспериментальных наук, у которых есть данные для анализа или моделирования, найдут на этих страницах инструменты, которые могут ускорить их работу или сделать ее более эффективной.

Цель этой книги - побудить обе группы к более широкому применению этих методов.



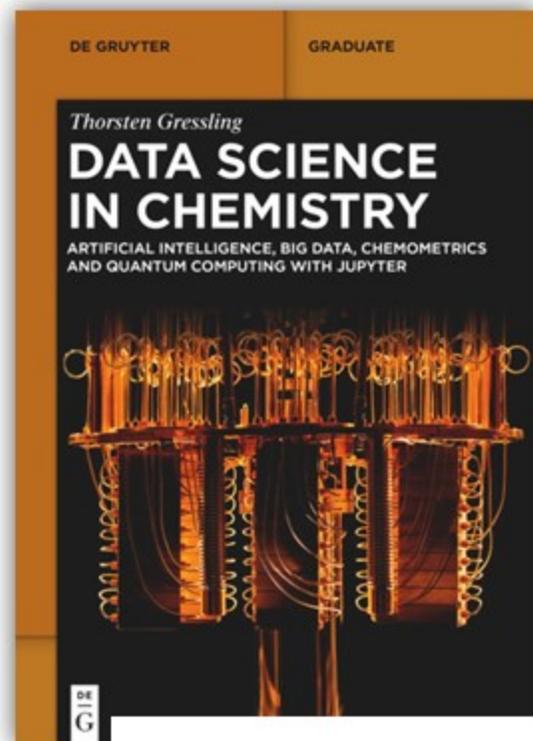
## «Наука о данных в химии»



Постоянно растущий объём информации привёл к появлению новой области исследований — науке о данных — включающей в себя информатику, математику и конкретную специализированную область.

В этой книге основное внимание уделяется химии. В ней объясняется, как использовать науку о данных для глубокого анализа и вывести химические исследования и разработки на новый уровень.

В ней рассматриваются такие современные аспекты, как большие данные, искусственный интеллект и квантовые вычисления.



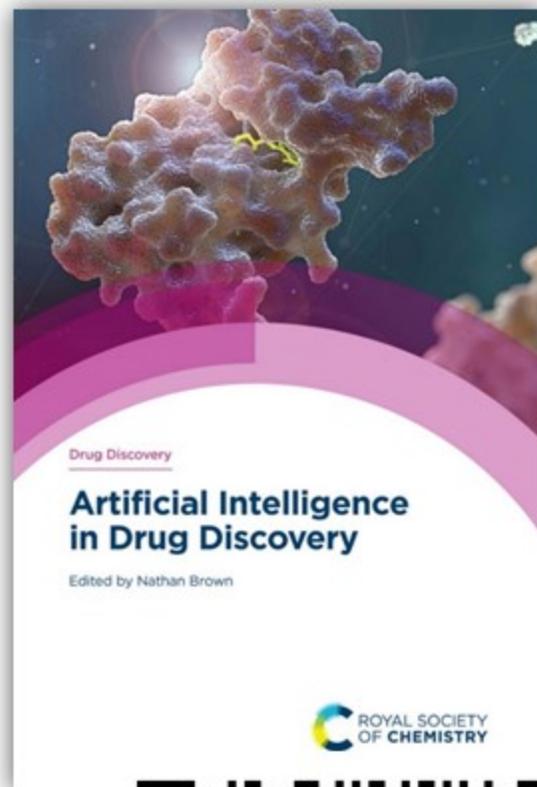
## «Искусственный интеллект в разработке лекарств»



После значительных достижений в области глубокого обучения и смежных областях интерес к искусственному интеллекту (ИИ) стремительно возрос. В частности, применение ИИ в разработке лекарственных препаратов позволяет решать задачи, которые ранее считались трудноразрешимыми, такие как прогнозирование свойств, конструирование молекул и оптимизация синтетических маршрутов.

Цель книги – познакомить читателя с инструментами и методами ИИ и машинного обучения, а также описать конкретные задачи, включая разработку новых молекулярных структур, планирование синтеза и моделирование.

Эта книга, предоставляющая обширную информацию от ведущих экспертов в этой области, идеально подходит для студентов, аспирантов и опытных исследователей как в промышленности, так и в академических кругах.



# ЖУРНАЛЫ



Журнал широко освещает все области химии, в которых используются подходы, основанные на искусственном интеллекте (ИИ) и машинном обучении.

Поощряются публикации работ, которые потенциально могут стимулировать исследования в следующих областях:

- Квантово-химические методы, сочетающие искусственный интеллект (ИИ) и методы больших данных;
- Расчеты и системы данных, ориентированные на ИИ;
- Построение моделей ИИ;

- Проектирование материалов с помощью ИИ;
- Взаимосвязь структуры и активности с помощью ИИ;
- Протоколы машинного обучения и их применение в химии;
- Разработка методов многомасштабного моделирования;
- Интеллектуальный спектральный анализ на основе ИИ;
- Применение ИИ в сложных химических системах;
- Применение ИИ в органической химии;
- Применение ИИ в поиске лекарств;
- Разработка программного и аппаратного обеспечения ИИ;
- Исследования в области интеграции эксперимента и теории;
- Спектроскопический анализ и мониторинг на основе искусственного интеллекта.



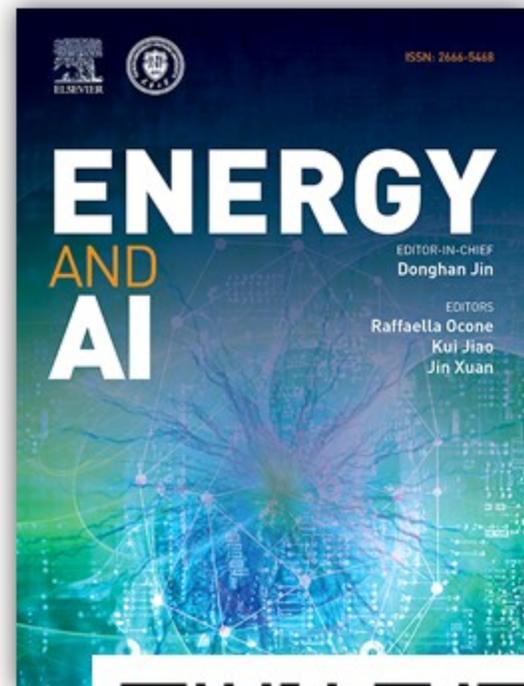
# ЖУРНАЛЫ



Официальный журнал Тяньцзиньского университета представляет собой быструю и авторитетную платформу с открытым доступом для публикации результатов последних исследований в междисциплинарной области энергетики и искусственного интеллекта (ИИ).

Журнал посвящен инновационным приложениям ИИ, которые решают важнейшие проблемы в области энергетических систем, энергетических материалов, энергетической химии, использования и преобразования энергии, а также взаимодействия энергетики и общества, а также другим актуальным вопросам в области энергетических исследований.

Журнал также рассматривает статьи о разработке специализированных технологий и методологий искусственного интеллекта для развития энергетики, декарбонизации и устойчивого развития, таких как подходы, основанные на данных, алгоритмы оптимизации и этика искусственного интеллекта.



# НАВЕДОМЛЕ УИТРАПЪЕМЪЛЕ СТАТЪМ



## Journal of Medicinal Chemistry

This is an open access article published under a Creative Commons Attribution (CC-BY) License, which permits unrestricted use, distribution and reproduction in any medium, provided the author and source are cited.

[pubsacs.org/jmc](https://pubsacs.org/jmc)

Perspective

### Current and Future Roles of Artificial Intelligence in Medicinal Chemistry Synthesis

Thomas J. Struble, Juan C. Alvarez, Scott P. Brown, Milan Chytil, Justin Cisar, Renee L. Desjarlais, Ola Engkvist, Scott A. Frank, Daniel R. Greve, Daniel J. Griffin, Xinjun Hou, Jeffrey W. Johannes, Constantine Kretsoulas, Brian Lahue, Miriam Mathea, Georg Mogk, Christos A. Nicolaou, Andrew D. Palmer, Daniel J. Price, Richard I. Robinson, Sebastian Salentin, Li Xing, Tommi Jaakkola, William. H. Green, Regina Barzilay, Connor W. Coley,\* and Klavs F. Jensen\*

**JCM** JOURNAL OF  
MEDICINAL CHEMISTRY  
AND PHARMACOLOGY

[pubsacs.org/jcm](https://pubsacs.org/jcm)

### Artificial Intelligence in Chemistry: Current Trends and Future Directions

Zachary J. Baum,\* Xiang Yu, Philippe Y. Ayala, Yanan Zhao, Steven P. Watkins, and Qiongqiong Zhou

# НАИБОЛЕЕ ЦИТИРУЕМЫЕ СТАТЬИ



Journal of Computer-Aided Molecular Design (2020) 34:709–715  
<https://doi.org/10.1007/s10822-020-00317-x>

EDITORIAL



## Artificial intelligence in chemistry and drug design

Nathan Brown<sup>1</sup> · Peter Ertl<sup>2</sup> · Richard Lewis<sup>2</sup> · Torsten Luksch<sup>3</sup> · Daniel Reker<sup>4,5</sup> · Nadine Schneider<sup>2</sup>

Published online: 29 May 2020  
© Springer Nature Switzerland AG 2020

molecular  
pharmaceuticals

Cite This: *Mol. Pharmaceutics* 2018, 15, 4311–4313

Artificial Intelligence for Drug Discovery, Biomarker Development,  
and Generation of Novel Chemistry

# НАИБОЛЕЕ ЦИТИРУЕМЫЕ СТАТЬИ



*pharmaceuticals*

Review

---

## Revolutionizing Medicinal Chemistry: The Application of Artificial Intelligence (AI) in Early Drug Discovery

---

Ri Han, Hongryul Yoon, Gahee Kim, Hyundo Lee and Yoonji Lee

Special Issue

*Artificial Intelligence Applied to Medicinal Chemistry and Structural Biology*

Edited by  
Prof. Dr. Osvaldo Andrade Santos-Filho

# НАИБОЛЕЕ ЦИТИРУЕМЫЕ СТАТЬИ



Analytica Chimica Acta 1161 (2021) 338403

Contents lists available at ScienceDirect

**Analytica Chimica Acta**

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/aca](http://www.elsevier.com/locate/aca)

ELSEVIER

Review

**Taking the leap between analytical chemistry and artificial intelligence: A tutorial review**

Lucas B. Ayres <sup>a</sup>, Federico J.V. Gomez <sup>b</sup>, Jeb R. Linton <sup>c</sup>, Maria F. Silva <sup>b</sup>, Carlos D. Garcia <sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup> Department of Chemistry, Clemson University, Clemson, SC 29634 USA  
<sup>b</sup> Instituto de Biología Aplicada de Mendoza (IBAM-CONICET), Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza, Argentina  
<sup>c</sup> IBM Watson and Cloud Platform, Armonk, NY, 10504, USA

**GRAPHICAL ABSTRACT**

# DATAJEST ПОИСКАМЪХ СТАТЕ



Chem Soc Rev



REVIEW ARTICLE

View Article Online  
View Journal | View Issue



Cite this: Chem. Soc. Rev., 2025,  
54, 5433

## Cross-disciplinary perspectives on the potential for artificial intelligence across chemistry

Austin M. Mroz,<sup>[a,b]</sup> Annabel R. Basford,<sup>[a]</sup> Friedrich Hastedt,<sup>[b,c]</sup>  
Isuru Shavindra Jayasekera,<sup>[d]</sup> Irea Mosquera-Lois,<sup>[b,e]</sup> Ruby Sedgwick,<sup>f</sup>  
Pedro J. Ballester,<sup>[g]</sup> Joshua D. Bocarsly,<sup>h</sup> Ehecatl Antonio del Rio Chanona,<sup>c</sup>  
Matthew L. Evans,<sup>[b,k]</sup> Jarvist M. Frost,<sup>[a]</sup> Alex M. Ganose,<sup>[b]</sup>  
Rebecca L. Greenaway,<sup>[b]</sup> King Kuok (Mimi) Hii,<sup>[e]</sup> Yingzhen Li,<sup>f</sup> Ruth Misener,<sup>f</sup>  
Aron Walsh,<sup>[b]</sup> Dandan Zhang<sup>[g]</sup> and Kim E. Jelfs<sup>[b,\*]</sup>

Check for updates

ChemistrySelect

Review  
doi.org/10.1002/slct.202404446



www.chemistryselect.org

## Artificial Intelligence Driven Applications in Analytical Chemistry, Drug Discovery, and Food Science: Advancements, Outlook, and Challenges

Madhumita Srivastava,<sup>[a,b]</sup> Shiv Nandan,<sup>[b,c]</sup> Aliza Zaidi,<sup>[b]</sup> Arzoo Saifi Samani,<sup>[b]</sup>  
Vijaya Shukla,<sup>[d]</sup> Hasan Aslam,<sup>[b]</sup> Anshumaan Srivastava,<sup>[b]</sup> Priyanka Maurya,<sup>[a,b]</sup>  
Mohsin Ali Khan,<sup>[b]</sup> Mohd. Faheem Khan,<sup>[b]</sup> and Karuna Shanker<sup>[a]</sup>

Check for updates

DOI: 10.1002/ange.202409021

ChemGPT statt Labor?

## Von Daten zu Entdeckungen: Künstliche Intelligenz in der Chemie

FRANZISKA HESS

# РАБОТЫ ИОХ РАН

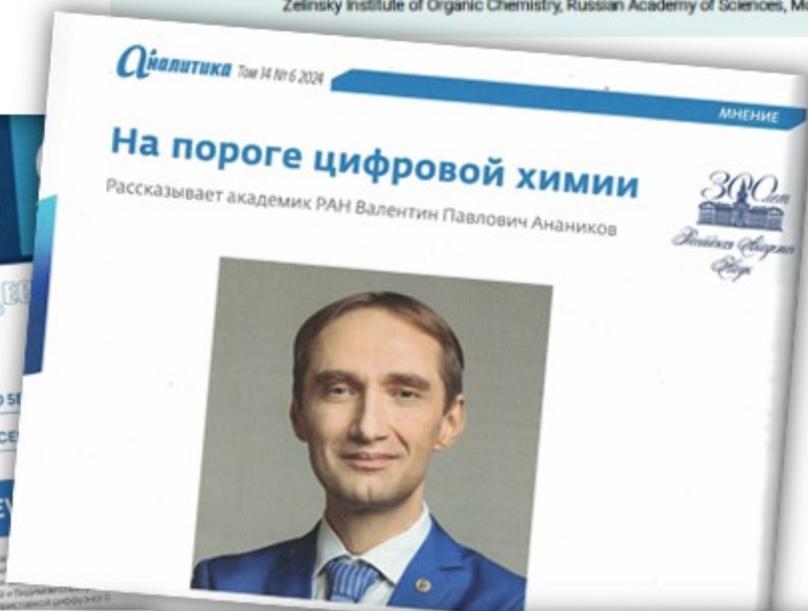


## ARTIFICIAL INTELLIGENCE

### WILL ARTIFICIAL INTELLIGENCE (AI) REPLACE CHEMISTS?

VALENTINE P. ANANIKOV

Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow



K.S.Erokhin, S.A.Naumov, V.P.Ananikov  
Russ. Chem. Rev., 2023, 92 (11) RCR5103 (Ученые химии, 2023, 92 (11) RCR5103)

Русская версия <http://www.uspkhim.ru/RCR5103>

<https://doi.org/10.59761/RCR5103>

## Анализ, классификация и предотвращение образования дефектов в экструзионной 3D-печати

К.С.Ерохин, С.А.Наумов, В.П.Анаников\*

Институт органической химии имени Н.Д.Зелинского Российской академии наук,  
Россия, 119991 Москва, Ленинский просп., 47

№11 ноябрь 2025

# НАУКА И ЖИЗНЬ

О журнале

Плодотворно функционирует при финансовой поддержке Министерства цифрового развития, связи и массовых коммуникаций.

Новости События Факт дня Открытый формат Новости партнеров  
Архив Спецпроекты Подписка Магазин Библиотеки Реклама Форум

[НАУКА И ЖИЗНЬ](#) / [Архив журнала «НАУКА И ЖИЗНЬ»](#) / [Наука на мажоре](#) / [Новые технологии](#)

## ИИ в химии и не только

Рассказывает академик Валентин Анаников, доктор химических наук, заведующий лабораторией металлокомплексных и наноразмерных катализаторов Института органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН. Беседу ведет Наталия Лескова

# ИЗ ФОНДА БЕИ РАН



Искусственный интеллект: применение в химии / ред.: Т. Пирс, Б. Хони ; перевод с англ. А.Ю. Батыря, В.Н. Петрова ; под ред. В.Л. Стефанюка. – Москва : Мир, 1988. – 430 с. – (БЕИ РАН/ИюГен ; 54/И86)

Химия – одна из первых областей, в которой искусственный интеллект нашел прямое практическое применение, говорят авторы книги. Это издание является сборником материалов симпозиума, посвященного применению вычислительной техники в химии (Чикаго, сентябрь 1985 г.). Рассмотрены экспертные системы, компьютерная алгебра в применении к проблемам органического синтеза, аналитической химии и другим аспектам исследования.

*Заказать книгу можно*



# ИЗ ФОНДА БЕН РАН



Искусственный интеллект, аналитика и новые технологии: пер. с англ. – Москва : Альпина, 2022. – 200 с. – (Harvard Business Review). – (БЕН РАН ; 214/6887)

Это сборник статей одного ведущего делового журнала Соединенных Штатов. Здесь собраны самые актуальные статьи о применении в бизнесе новых интеллектуальных технологий.

Кудлай, Д.А. Искусственный интеллект в фармразработке / Д.А. Кудлай. – Москва : Практическая медицина, 2025. – 120 с. – (БЕН РАН/ИФАВ ; 615/К88)



Книга посвящена вопросам применения искусственного интеллекта в области научных исследований и разработок при создании новых лекарственных средств, а также решений на основе ИИ для поиска новых биомаркеров, ускорения диагностики различных заболеваний.



# ИЗ ФОНДА БЕН РАН



15.02  
ДОКЛАДЫ  
АКАДЕМИИ НАУК СССР

1989  
ТОМ 306 № 2



Доклады Академии наук СССР  
1989. Том 306, № 2

УДК 66.012-52:681.3.06

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

Академик В.В. КАФАРОВ, В.П. МЕШАЛКИН

## ПРИНЦИПЫ РАЗРАБОТКИ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ СИСТЕМ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Искусственный интеллект — новое научное направление, которое разрабатывает методы поиска решений интеллектуальных, творческих или неформализуемых задач, носящих невычислительный целенаправленно-смысловой характер [1–4]. К указанному классу неформализуемых задач химической технологии (ИХТ) относятся, в частности, следующие:

- планирование сложных химических реакций для получения желаемых веществ;
- выбор оптимального химического способа производства требуемых продуктов;
- прогнозирование реакционной способности и физических свойств новых веществ;
- структурно-параметрический синтез ресурсосберегающих химико-технологических систем ХТС;

оптимальное размещение оборудования ХТС;  
оптимальная трассировка трубопроводов ХТС;  
разработка алгоритмов технической диагностики и ситуационного управления сложных ХТС в условиях неопределенной информации [3–6].

Поиск оптимальных и рациональных семантических, или смысловых, решений для ИХТ осуществляется в результате интеллектуальной творческой деятельности специалиста — лица, принимающего решения (ЛПР), которая требует прежде всего переработки огромного количества смысловой, или семантической, информации и не связана с проведением каких-либо вычислений с данными. Указанная смысловая информация представляет собой разнообразные декларативные и процедуральные знания о внешнем мире и о конкретной предметной области (ПО) химической технологии, например, теории химических процессов; теории массо- и теплопередачи; теории синтеза ресурсосберегающих ХТС; технологии неорганических и органических веществ и др. [3, 5]. Семантическое решение ИХТ может представлять собой словесное описание или графическое изображение химического строения новых веществ, маршрутов химического синтеза молекул целевых продуктов, причинно-следственных связей между отдельными явлениями, физико-химической сущности каких-либо ХТП, структуры ХТС, конструкции аппаратов и т.п. Каждому семантическому решению можно поставить в соответствие определенную математическую модель.

Разработка методов поиска семантических решений ИХТ должна основываться на создании моделей представления и переработки знаний в различных ПО химической технологии, моделей вывода решений, а также моделей ограниченного твеного языка (ЕЯ) данной ПО, которые имитируют различные процессы интеллектуальной творческой деятельности ЛПР. Методы поиска решений ИХТ практически реализуются с помощью интеллектуальных систем (ИС), представляющих в технических средствах искусственного интеллекта. ИС — это аппаратно-програмные системы для имитирования некоторых процессов мышления человека,

409

I.I. Baskin, T.I. Malakhidov, I.S. Antipin, A.A. Varnek  
*Russ. Chem. Rev.*, 2017, **86** (11) 1127–1136 [Online edition, 2017, **86** (11) 1127–1136]  
<https://doi.org/10.1070/RCR46700a01-labell-RUSSIAN>

## Искусственный интеллект в синтетической химии: достижения и перспективы

I.I. Baskin,<sup>a,b</sup> T.I. Malakhidov,<sup>b</sup> I.S. Antipin,<sup>b</sup> A.A. Varnek<sup>b,c\*</sup>

<sup>a</sup> Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Физический факультет  
Россия, 119991 Москва, Ленинские горы, 1, стр. 2

<sup>b</sup> Казанский (Проволжский) федеральный университет,  
Химический институт имени А.М. Бутлерова  
Россия, 420008 Казань, ул. Кремлевская, 18

<sup>c</sup> Laboratory of Chemoinformatics (UMR 7140 CNRS/UniStra), University of Strasbourg  
4 rue Blaise Pascal, 67000 Strasbourg, France

Обзор посвящен достижениям в анализе информации о химических реакциях с использованием методов машинного обучения. Он охватывает четыре большие области, в которых активно используются для компьютерных методов планирования синтеза, анализа и визуализации данных по реакциям, при количественном характеристике реакций, компьютерный дизайн катализаторов.  
Библиография — 346 ссылок.

### Оглавление

- I. Введение
- II. Компьютерное моделирование химических реакций
- III. Превентивная обработка данных по реакциям
- IV. Компьютерные методы планирования органического синтеза
- V. Анализ и визуализация данных по реакциям
- VI. Прогнозирование количественных характеристик реакций
- VII. Моделирование каталитической активности и компьютерный дизайн новых катализаторов
- VIII. Заключение

### I. Введение

К настоящему времени накоплен огромный массив информации по химическим реакциям: сведения более чем о 10<sup>10</sup> химических реакций собраны в крупнейшей базе данных CASReaxT (<http://www.cas.org/chem/reaxt/>). Большой набор содержится также в оригинальных журнальных статьях, обзорах, справочниках, диссертациях, патентах.<sup>1</sup> Анализ этих данных необходим для создания инструментов, которые химикам смогут использовать при планировании синтеза. Для продуктивной работы с данными такого большого объема и

сложной организации требуется применение и отдельных компьютеров и программное с

основные авторские методы искусственного интеллекта. Под искусственным интеллектом обычно понимают способность вычислительной системы решать задачи, традиционно считающиеся прерогативой человека.<sup>2</sup> Понятие об искусственном интеллекте возникло довольно давно и постоянно менялось по мере того, как изменялось представление о том, какие задачи могут быть решены машиной, а какие требуют обязательного вмешательства человека. Если раньше об искусственном интеллекте писали главным образом

