

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



СБОРНИК ТЕЗИСОВ



Сборник тезисов

II Научная конференция
«Искусственный интеллект в химии
и материаловедении»

17-21 ноября 2025
ИОХ РАН, Москва

Редакционная коллегия:

Архипова Д.М., Чернышова Д.В., Сейткалиева М.М., Аракелян Л.А.

II Научная конференция «Искусственный интеллект в химии и материаловедении»: Сборник тезисов

Сборник содержит аннотации и тезисы пленарных, ключевых, приглашенных, устных, постерных и заочных докладов участников II научной конференции «Искусственный интеллект в химии и материаловедении» (AICHEM-2025)

Тезисы опубликованы в авторской редакции.

(с) ИОХ РАН, 2025

СОЧЕТАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И РАСЧЕТНЫХ ПОДХОДОВ ДЛЯ КОНСТРУИРОВАНИЯ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ БИОСОВМЕСТИМЫХ ФОТОКАТАЛИЗАТОРОВ

**Мешина К.И., Ткаченко Д.С., Бобрышева Н.П.,
Оスマловский М.Г., Вознесенский М.А., Оスマловская О.М.**

*Санкт-Петербургский государственный университет,
199034, Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7-9*

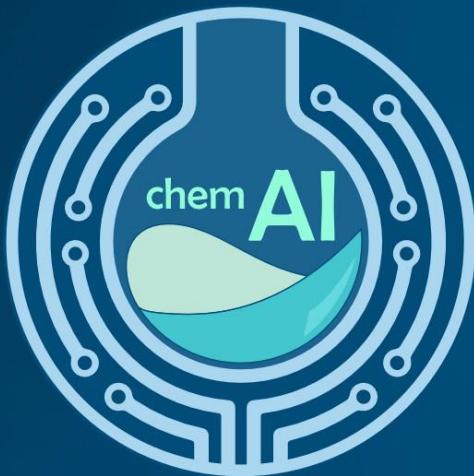
Разработка и внедрение в водоочистные системы фотокаталитических материалов на основе полупроводниковых оксидов – многообещающая технология избавления от циклических органических загрязнителей. Существует множество подходов к созданию подобных материалов: синтез полупроводников разной природы, в том числе допированных; создание гетероструктур и композитов; модификация поверхности фотокатализатора и т.п. Однако механизм фотодеградации и причины вариативности ее протекания остаются малоизученными. Чтобы комплексно исследовать как особенности формирования полупроводниковых фотокатализаторов, так и их производительность при варьировании условий, к химическому эксперименту необходимо добавить изучение материала на атомном уровне с помощью расчетных методов.

В фокусе работы с точки зрения получения высокоеффективного фотокатализатора находится изучение взаимодействия загрязнителей с разными кристаллографическими гранями на его поверхности. При этом биосовместимый оксид цинка (ZnO) с различным соотношением граней формируется легко и управляемо благодаря процессу ориентированного присоединения (ОП). По нашей гипотезе, ОП можно предсказывать с использованием специально разработанного протокола.

Так, синтезированные нами методом «мокрой» химии наночастицы ZnO были охарактеризованы методами РФА, моделирования полного профиля дифрактограммы, ИК-спектроскопии, СЭМ, ПЭМ, БЭТ, РФЭС и СКР. Проведенные с использованием оригинального подхода квантово-химические расчеты показали, что красители отличающихся типов формируют активированный комплекс с разными гранями кристалла, и что на процесс ОП, определяющий доли граней в конечном продукте, можно влиять путем изменения состава реакционной среды.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта СПбГУ № 116653661 с использованием оборудования ресурсных центров научного парка СПбГУ, в том числе «РДМИ», «ИТКН», «МАСВ», «МРЦНТ», «ДФММФН», «ОЛМИВ», «ВЦ», «МРМИ», «ФМИП», «НФМ».

- Киселев В.Г., 36
 Клименко М.М., 188
 Козлов К.С., 37
 Комаров П.В., 97
 Коняхина А.Ю., 98
 Коровин А.Н., 99
 Корогод Д.В., 189
 Котлов Е.С., 190
 Кошелев Д.С., 100
 Кравцов А.В., 191
 Краснов Л.В., 38
 Крылов И.Н., 101
 Кузьмин С.С., 241
 Кулаев К.Д., 102
 Кулаев К.К., 192
 Куприянова Г.С., 103
 Куриганова А.Б., 104
 Курочкин И.Н., 19
 Кустова Т.В., 193
 Лепешкин С.В., 105
 Лесников В.К., 194
 Лобова Н.А., 106
 Ломова М.В., 195
 Луканов М.М., 196
 Лысенко М.Р., 197
 Люлин С.В., 20
 Макаров Д.М., 107
 Мануковская Д.В., 198
 Мареев Е.И., 108
 Мартыненко П.А., 199
 Мартынов И.В., 109
 Махилев Р.А., 201
 Медведев М.Г., 39
 Мерзликин А.М., 21
 Мешина К.И., 202
 Митрофанов А.А., 40
 Михайлова А.А., 110
 Мотаев К.А., 111
 Муравлева Е.А., 41
 Набиев И.М., 112
 Назарова В.В., 203
 Назарычев В.М., 204
 Нам Е.В., 205
 Нартова А.В., 42
 Насырова Д.И., 206
 Наумович В.О., 207
 Никитин Н.Ю., 113
 Никифоров Д.Н., 114
 Новицкий Г.О., 115
 Оганов А.Р., 13
 Осипов В.Т., 116
 Остарков С.Н., 117
 Павельев С.А., 118
 Павлов А.А., 43
 Паршин Т.В., 208
 Певнев А.Н., 242
 Пескова Е.Е., 119
 Позов Б.Е., 209
 Поликовский Т.А., 120
 Поляков И.В., 44
 Попов З.И., 121
 Поройков В.В., 14
 Потапов А.С., 122
 Проломов И.В., 210
 Проценко Б.О., 123
 Пустовалова Т.В., 124
 Пустолайкина И.А., 211
 Путилин К.В., 212
 Радулов А.С., 125
 Разумова Я.Е., 213
 Раскильдина Г.З., 214
 Редьков А.В., 45
 Рубцов И.Д., 126
 Рыжов А.П., 215
 Рылов А.В., 127
 Рыльцев Р.Е., 46
 Рябченко Д.А., 128
 Сабиров Д.Ш., 47
 Самолыга А.А., 216
 Самороднова А.П., 217
 Самсоненко А.А., 129
 Свердлов Ю.В., 130



ai2025.zioc.ru



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



Минпромторг
России

