

От редакции

Редакция Башкирского химического журнала публикует настоящий обзор с целью широкого распространения принципиально новых подходов и представлений по применению искусственного интеллекта и методов цифровой химии для решения задач органического синтеза.

Работы научной школы академика РАН В. П. Ананикова*, выполненные в Институте органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН (научный руководитель – академик РАН М. П. Егоров*, директор – академик РАН А. О. Терентьев), открывают новые перспективы в изучении механизмов химических реакций и создании веществ и материалов с заданными свойствами и имеют первостепенное значение для прогресса отечественной и мировой химической науки.

* – Почетные академики Академии наук Республики Башкортостан

УДК 547

DOI: 10.17122/bcj-2026-1-7-16

А. О. Терентьев (д.х.н., академик РАН, директор)

ЦИФРОВАЯ ХИМИЯ: НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В ХИМИЧЕСКОЙ НАУКЕ

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН
119991, г. Москва, Ленинский пр., 47; e-mail: terentev@ioc.ac.ru

А. О. Terentyev

DIGITAL CHEMISTRY: DIRECTIONS FOR THE DEVELOPMENT OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN CHEMICAL SCIENCE

N. D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry
47, Leninskiy Prospekt Str., 119991, Moscow, Russia; e-mail: terentev@ioc.ac.ru

Рассмотрено формирование цифровой химии как исследовательской и технологической программы на стыке химии, анализа больших данных, машинного обучения, компьютерного зрения, автоматизации и цифровой инфраструктуры. Особое внимание уделено работам российской научной школы, в которых была последовательно показана применимость специализированных алгоритмов искусственного интеллекта к задачам масс-спектрометрии, электронной микроскопии, анализу видеоданных, катализу, молекулярной сложности, поиску реакций и проблеме потерянных данных. Показано, что совокупность проведенных исследований образует связную методологию цифровой химии: от оцифровки химических объектов и автоматизации анализа данных до формирования цифровых карт процессов, поиска скрытых закономерностей и проектирования новых сценариев исследований. Согласно проведенному анализу именно в российской химической школе была разработана одна из первых целостных концепций цифровой химии как самостоятельного направления исследований. Ее ключевой особенностью стало органичное сочетание теоретической базы с экспериментальной прикладной верификацией данных.

This article examines the development of digital chemistry as a research and technology program at the intersection of chemistry, big data analysis, machine learning, computer vision, automation, and digital infrastructure. Particular attention is paid to the work of the Russian scientific school, which has consistently demonstrated the applicability of specialized artificial intelligence algorithms to problems in mass spectrometry, electron microscopy, video analysis, catalysis, molecular complexity, reaction detection, and the problem of lost data. It is shown that the combination of these studies forms a coherent methodology of digital chemistry: from the digitization of chemical objects and the automation of data analysis to the creation of digital process maps, the search for hidden patterns, and the design of new research scenarios. According to the analysis, it was the Russian chemical school that developed one of the first holistic concepts of digital chemistry as an independent field of research. Its key feature was the organic combination of a theoretical framework with experimental applied data verification.

Дата поступления 10.01.26

Ключевые слова: аддитивные технологии; искусственный интеллект; компьютерное зрение; масс-спектрометрия; машинное обучение; потерянные данные; химические данные; цифровая химия; цифровой катализ; электронная микроскопия

Key words: additive manufacturing; artificial intelligence; computer vision; mass spectrometry; machine learning; lost data; chemical data; digital chemistry; digital catalysis; electron microscopy

Понятие цифровой химии в последние годы трансформировалось в активно развивающееся исследовательское направление, объединяющее машинное обучение, роботизацию, технологию цифровых двойников^{1–3}, автоматизированное планирование синтеза, компьютерное зрение, обработку естественного языка^{4–6}, анализ приборных данных и новые формы человеко-машинного взаимодействия в лаборатории^{7,8}. В мировой литературе цифровая химия обычно обсуждается как часть более широкого движения «ИИ для науки» («AI for science»)^{9–11}, где алгоритмы не только ускоряют анализ данных, но и перестраивают логику постановки эксперимента, отбора гипотез и организации исследовательского цикла^{12–14}.

В современной российской химической науке данную проблематику первым сформулировал В.П. Анаников, который, начиная с 2020 г., последовательно связывал ИИ не с абстрактной

цифровизацией, а со специализированными алгоритмами для обработки химических данных, экспериментальной аналитикой, катализом, материаловедением, малотоннажной химией и их внедрением в промышленную практику^{15–20}. Принципиально важно, что обсуждаемая программа развивалась не в форме декларативных тезисов, а как серия экспериментальных работ, в которых машинное обучение применялось к реальным химическим данным – от масс-спектров и данных электронной микроскопии до видеопотоков экспериментальных систем и карт каталитических состояний^{21–26}.

Визуализация карты знаний (рис. 1) показывает, что цифровая трансформация химии не сводится к единственному направлению. Она включает по меньшей мере четыре взаимосвязанных стратегических узла: инновации в лабораторных и технологических процессах (Laboratory and

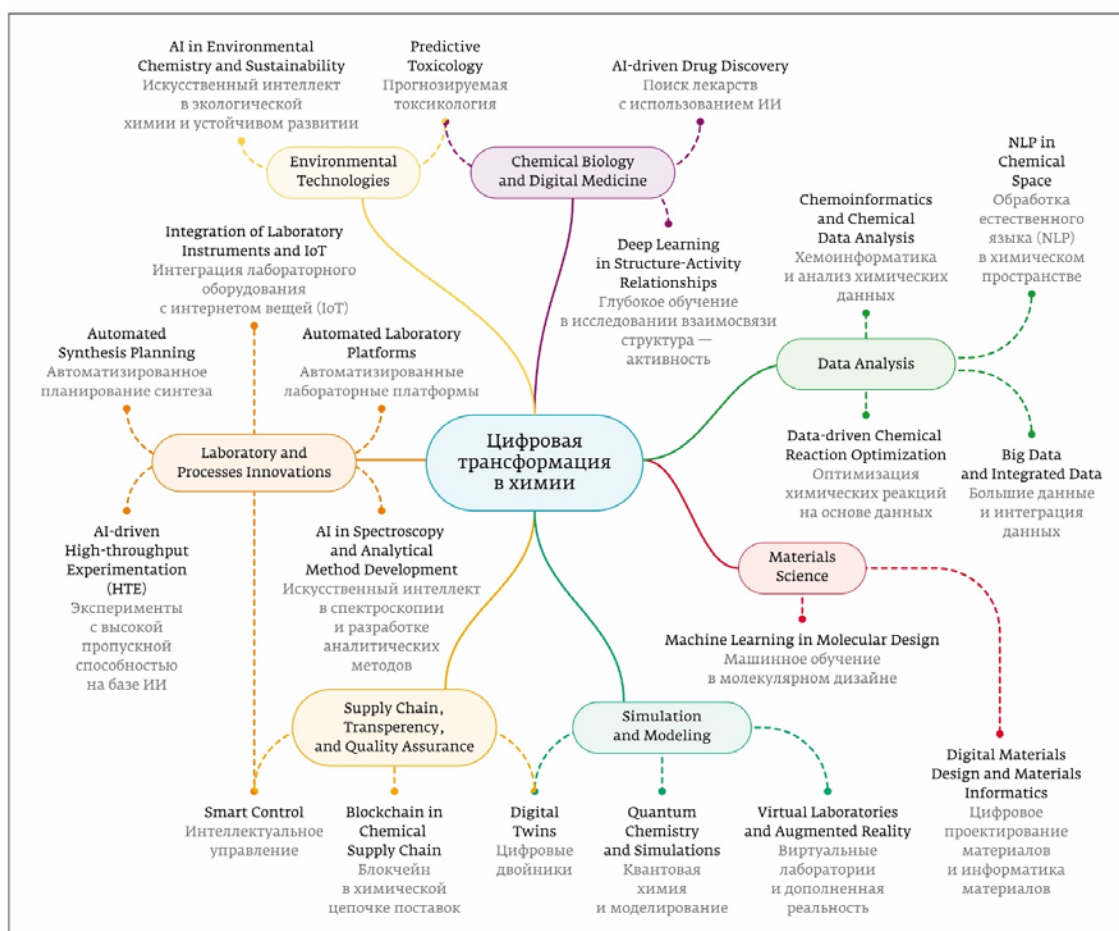


Рис. 1. Взаимосвязь различных сценариев цифрового развития химии и изменение глубины трансформации науки и темпов накопления новых знаний в зависимости от выбранной стратегии цифровизации. Воспроизводится из работ^{16,18}

Process Innovations) и прозрачность цепочек поставок (Supply Chain, Transparency and Quality Assurance); анализ больших данных (Data Analysis) и моделирование и симуляцию процессов (Simulation and Modeling); дизайн материалов (Material Science); а также экологические (Environmental Technologies) и медико-химические (Chemical Biology and Digital Medicine) направления. Такая систематизация имеет важное методологическое значение: цифровая химия предстает здесь не как добавление внешнего ИИ-инструмента к готовой дисциплине, а как перестройка всей цепочки получения знаний: от регистрации сигнала и хранения данных через их анализ, интерпретацию и моделирование к решению конкретных прикладных задач ^{1, 16, 27–29}.

Недавние исследования демонстрируют принципиальный переход от классической схемы «эксперимент – пробоподготовка – анализ – публикация» к подходу, в котором накопленные химические данные становятся источником новых гипотез и новых химических превращений (рис. 2). Именно этот сдвиг – от обслуживания эксперимента к участию в создании научной гипотезы – составляет наиболее существенный признак цифровой химии как новой методологии ^{5, 9, 18}. В этом отношении особенно важен алгоритм выделения трех уровней применения ИИ: ИИ-ассистент, ИИ-аналитик и ИИ-исследователь. Он позволяет отличить популярные универсальные инструменты от химических специализированных решений и систем, претендующих на участие в генерации научных сценариев ^{16, 18}.

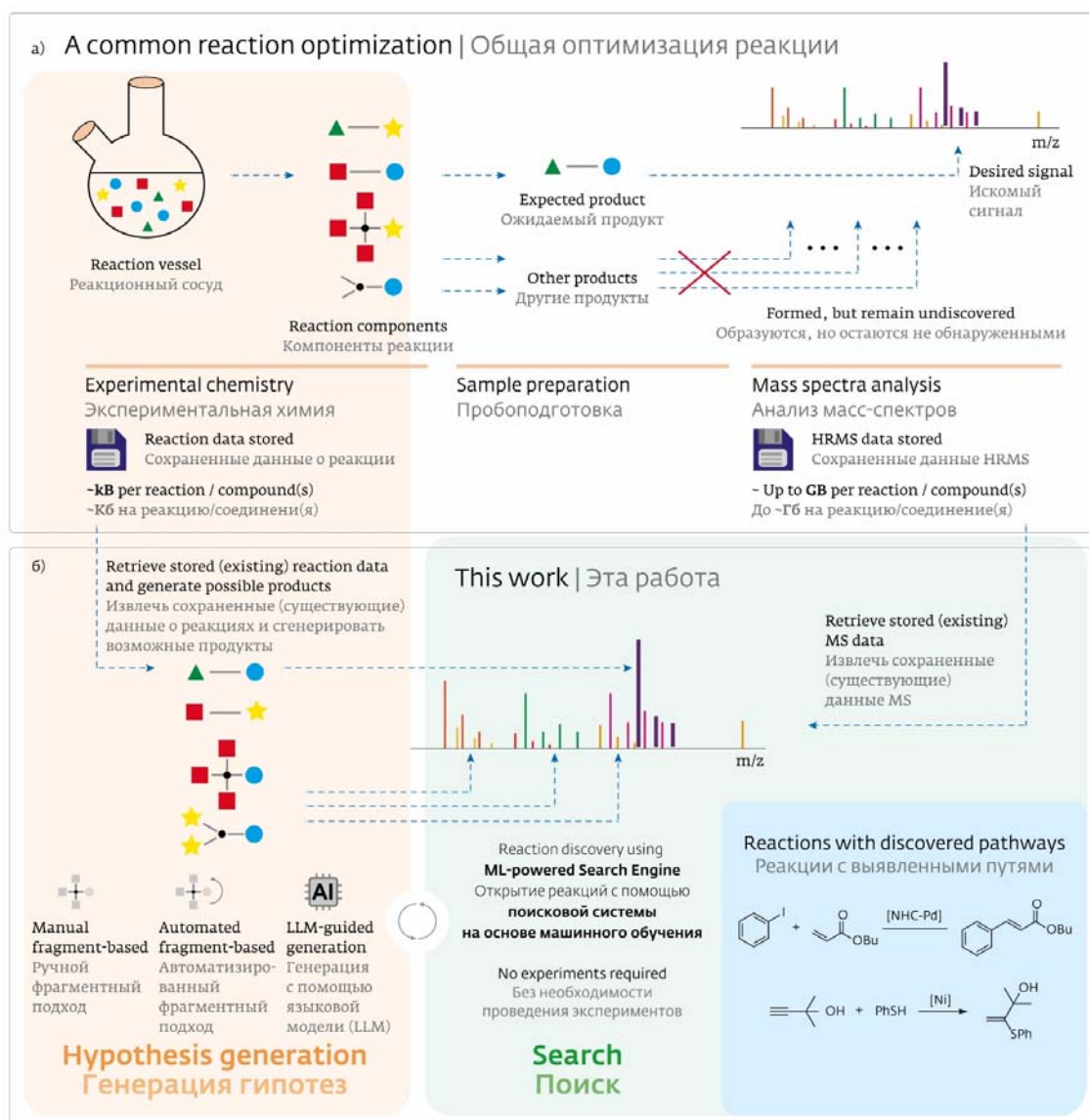


Рис. 2. Интеграция ИИ-исследователя в химию: исторически сложившаяся практика (а) и генерация гипотез с использованием ИИ на основе ранее проведенных экспериментов (б). Воспроизводится из работ ^{18, 30}

Отправной точкой обсуждаемой программы стала работа с первичными химическими данными. Уже в 2020 г. в исследовании по масс-спектрометрии была установлена прямая зависимость между точностью измерения массы и количеством получаемых структурных интерпретаций и явно обозначена задача подготовки качественных данных и оценки пределов интерпретации для будущих методов машинного обучения (ML)¹⁵. Это принципиально отличается от риторики «ИИ как черный ящик»: эффективность цифровой химии здесь определяется качеством экспериментальных данных, разрешающей способностью прибора, типом спектральной информации и вычислительной сложностью перебора формул. Такой подход согласуется с мировым пониманием того, что в химии производительность ML-моделей определяется не только их архитектурой, но и характеристиками набора данных, их структурой, полнотой представления отрицательных результатов и корректной репрезентацией химических данных^{2, 31-33}.

Следующим шагом стало превращение массивов приборных данных в машиночитаемые ресурсы. Были опубликованы работы, в которых были представлены результаты электронной микроскопии для анализа упорядоченности и локализации наночастиц²¹, а также показана возможность извлечения из изображений информации о дефектности и локальных нарушениях порядка с использованием глубоких нейросетей²². Тем самым был реализован важный принцип цифровой химии: сначала химический объект переводится в стандартизированный цифровой формат, затем создается алгоритм его количественного описания, после чего появляются основания для автоматизации интерпретации.

Это направление получило развитие в работе, посвященной полностью автоматизированному анализу высокоразрешающих масс-спектрометрических данных без жестких ограничений по объему обработки, неизбежных при ручном анализе²⁵. Здесь цифровая химия уже не сводится к построению вспомогательного классификатора: алгоритм становится частью аналитического процесса, будучи способен работать с многообразием сигналов, скрытых компонент и большими массивами спектров. Такая логика получила дальнейшее развитие в работе, где с использованием методов машинного обучения был реализован анализ масштабных массивов накопленных масс-спектрометрических данных, позволивший выявить ранее не описанные химические реакции без

проведения новых экспериментов³⁰. Было показано, что этот пассивный массив информации может выступать источником нового химического знания (рис. 2). Подобные подходы находятся в русле международных усилий по переходу от статистических баз данных реакций к методам реакционного поиска, классификации и навигации в химическом пространстве^{4, 32, 34}.

Характерно, что в обсуждаемой серии работ цифровой подход не ограничивается спектральными данными. В частности, было показано, что интуитивное и трудно формализуемое химическое понятие молекулярной сложности может быть перенесено в цифровую плоскость с помощью методов машинного обучения³⁵. Здесь важен не только частный результат, но и сама постановка задачи: если цифровая химия претендует на участие в синтезе гипотез, она должна уметь работать не только с измеряемыми сигналами, но и с эвристическими категориями, которыми традиционно оперирует химик. В этом смысле работа образует мост между ИИ-аналитиком и ИИ-исследователем в рамках единой концепции развития цифровой химии¹⁸.

Компьютерное зрение, визуальная аналитика и новые формы химического анализа

Второе важное направление цифровой химии связано с переводом изображений и видеоданных в количественные химические дескрипторы. В работе, посвященной анализу систем ионы/вода, нейросетевой анализ был применен к видеоданным электронной микроскопии для описания температурно-индуцированной динамики микрофаз²³. Впоследствии эта линия была продолжена в статье, анализирующей системы ионных жидкостей на основе данных электронной микроскопии в реальном времени с использованием методов глубокого обучения и классического компьютерного зрения³⁶. Было показано, что даже сложная динамика жидкофазной системы может быть представлена как набор автоматически извлекаемых параметров движения и морфологии.

Отдельное значение имеют работы по автоматическому распознаванию наночастиц и дефектных областей на микроскопических изображениях^{22, 37}, а также исследование по изучению роста биопленок³⁸, что показывает расширение области применения цифровых методов от химии материалов и катализа к анализу биологических структур. Переход к генеративному моделированию изображений биопленок показывает, что цифровая химия в таком понимании естественным образом сближается с цифровой биологией и микробиологией, то есть с областями, где химические

процессы описываются через визуальные паттерны, морфологические поля и сложные ансамбли объектов³⁹.

Особенно показательной является работа по распознаванию молекулярной структуры фосфониевых солей и различий между их близкими гомологами⁴⁰, в которой решается почти парадоксальная для классической химии задача: извлечение информации о молекулярной структуре вещества из визуальных данных. С методологической точки зрения этот результат важен не только сам по себе, но и как демонстрация расширения возможности исследования химических процессов. Если раньше связь между структурой и свойством устанавливалась преимущественно через спектры и расчетные дескрипторы, то теперь в этот арсенал входят и визуальные данные, обрабатываемые методами глубокого обучения. Аналогичные тенденции наблюдаются и в международной литературе по компьютерному зрению в материаловедении и электронной микроскопии^{41–43}.

Работа, посвященная интеграции тепловизионных данных и нейронных сетей для анализа механической прочности и прогнозирования разрушения 3D-печатных полимерных изделий²⁶, развивает данное направление, распространяя ее на макроскопические объекты и инженерные приложения. Здесь цифровой анализ изображений используется уже не для распознавания структуры, а для прогноза механических характеристик. В сочетании с концептуальной статьей о роли ИИ в аддитивных технологиях это показывает, что цифровая химия выходит за пределы лабораторного эксперимента и охватывает весь путь от материала до изделия⁴⁴.

Цифровой катализ: от карт состояний к 4D-анализу

Для химии катализаторов цифровая трансформация особенно важна, поскольку именно здесь объем экспериментальных данных быстро становится несоразмерным скорости их ручной интерпретации. Изучение индивидуальных частиц катализаторов Pd/C показало, что алгоритмы глубокого обучения позволяют различать активность отдельных частиц и выявлять редкие, но чрезвычайно важные каталитические события²⁴. В продолжение работы данные мониторинга были превращены в карты образования и функционирования каталитических центров во времени⁴⁵. Это принципиально важный шаг: цифровой анализ в химии начинает работать не только с объектом, но и с его динамической траекторией.

Именно эта логика была затем развита в работе, в которой была предложена концепция 4D-

катализа, основанная на интеграции многоуровневого сбора данных и их анализа методами машинного обучения⁴⁶. Четвертое измерение здесь – время, а не просто последовательность картинок; тем самым машинное обучение используется для перехода от статической характеристики катализатора к анализу его эволюции до, во время и после реакции. В международной научной практике это перекликается с ростом интереса к самоуправляемым (self-driving) лабораториям, активному обучению и замкнутым циклам «измерение – модель – следующий эксперимент»^{7, 8, 11, 14}, но в обсуждаемых работах акцент сделан именно на химической специфике динамических каталитических систем.

В ту же методологию укладывается и работа, в которой с использованием цифровых методов анализа исследуется обобщаемость каталитических закономерностей в Pd-катализируемых реакциях C–N кросс-сочетания⁴⁷. Важность подобных работ определяется тем, что они объединяют три уровня анализа: экспериментальные наблюдения, химическую интерпретацию и алгоритмическое обобщение. Именно это отличает цифровую химию от просто компьютерной поддержки химических исследований. В рамках такой программы алгоритм не заменяет химическую практику, а расширяет масштаб наблюдаемого и делает возможным анализ таких массивов данных, которые вручную были бы практически недоступны для обработки.

Потерянные данные, цифровая инфраструктура и переход к полному цифровому циклу

Одна из наиболее оригинальных и практически значимых тем обсуждаемой серии публикаций – проблема "спящих" и "потерянных" данных («sleeping» and «lost» data). В статье о потерянных данных в области электронной микроскопии подсчитано, что в рутинной практике более 90% получаемых микроскопических данных может оставаться неиспользованными⁴⁸. Эта работа важна по двум причинам. Во-первых, она переводит разговор о «больших данных» из общего лозунга в измеряемую проблему научной инфраструктуры. Во-вторых, она показывает, что дальнейшее развитие ИИ в химии упирается не только в разработку моделей, но и в способы хранения, стандартизации, повторного использования и публикации данных^{21, 33, 49, 50}.

Данная проблема подробно описывается в статье «Цифровые технологии в химии и материаловедении», где необходимость цифровизации обосновывается низкой скоростью ручной обра-

ботки химических данных, потребностью в преодолении барьеров для трансфера знаний в области микро- и малотоннажной химии и потребностью создания полного цифрового цикла производства химической реакции¹⁷. Показательно, что речь идет о специализированных алгоритмах именно для химии, а не о переносе универсальных ИИ-сервисов без учета специфики химических процессов, экспериментальных данных и рисков. Данная концепция в полной мере была впервые представлена в обзорной статье о 20 наиболее влиятельных ИИ-технологиях в химии¹⁶, где цифровая химия представлена как набор взаимосвязанных технологических траекторий – от аналитики и хемоинформатики до технологии цифровых двойников, высокопроизводительного экспериментирования (HTE), обработки естественных языков (NLP) и виртуальных лабораторий.

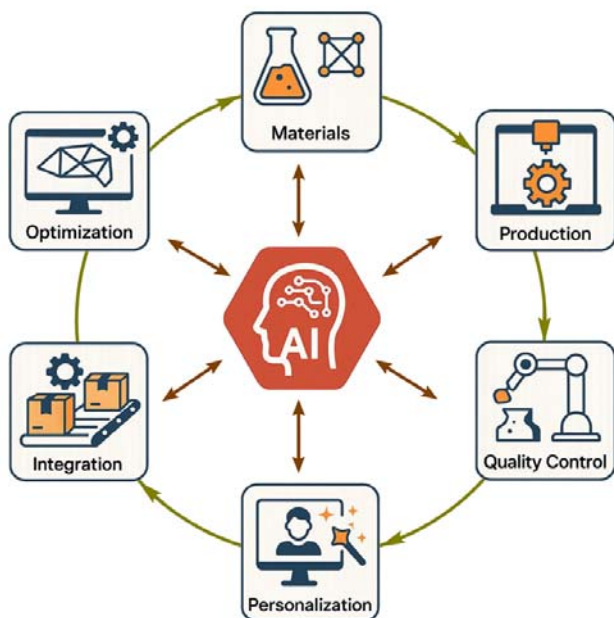


Рис. 3. Применение искусственного интеллекта в аддитивных технологиях – традиционная последовательная цепочка технологических этапов (круговая стрелка) и сквозная объединяющая технология с обратной связью на основе ИИ (прямые стрелки). Воспроизводится из работы⁴⁴

Работы последних лет переносят методологию цифровой химии в инженерный контур (рис. 3). ИИ здесь действует не как инструмент для решения локальных задач, а как сквозной механизм обратной связи, объединяющий этапы разработки материалов, производства, контроля качества, персонализацией, интеграцией и оптимизацией процессов. Для химической технологии это особенно важно, поскольку цифровой цикл способен радикально сократить путь от идеи и рецептуры до готового изделия или настройки технологичес-

кого процесса. В результате цифровая химия интегрирует в себя не только исследовательскую, но и проектно-производственную логику^{17, 26, 51}.

Концептуальные исследования последних лет позволяют увидеть, как из серии экспериментальных статей складывается общая стратегия применения ИИ в химии и переход от отдельных приложений к осознанию цифровой химии как самостоятельного направления¹⁹. В статье, посвященной роли искусственного интеллекта в химии, подчеркивается, что ИИ не заменяет химика, а изменяет требования к качеству подготовки данных, их воспроизводимости, а также к открытости кода и исходных массивов информации²⁰. Наконец, классификация применения ИИ в химии от автоматизации к цифровому научному мышлению дает рабочую иерархию уровней его внедрения и вводит представление об ИИ как активном участнике научного процесса¹⁸. В совокупности это превращает цифровую химию из набора частных случаев в методологически структурированную программу.

Сопоставление этих работ с мировыми тенденциями показывает, что обсуждаемая программа находится в русле глобальных трендов «AI for science», но при этом имеет собственную структуру. Если в международной литературе основной фокус направлен на такие темы как соревновательные проекты и бенчмарки, агенты на основе больших языковых моделей (LLM), молекулярный дизайн и компьютерное материаловедение^{4, 9, 10, 29, 52, 53}, то в российской химической науке в центре внимания оказались, прежде всего, качественные данные, связь с экспериментом, катализ, проблема потерянных данных и перенос цифровых алгоритмов в реальную химическую инфраструктуру. Именно это сочетание и определяет специфику обсуждаемого вклада.

Таким образом, проведенный анализ демонстрирует, что публикации проекта цифровой химии и работы научной школы В.П. Ананикова формируют последовательную и внутренне согласованную программу модернизации современной химии. Логика программы последовательно выстраивается от подготовки качественных химических данных и создания специализированных датасетов к машинному анализу спектров, изображений и видеоданных; далее – к цифровым картам каталитических состояний, оцифровке эвристических химических понятий и, наконец, к постановке вопроса о новой роли ИИ в генерации гипотез и организации полного цифрового цикла химического исследования.

Важнейшая особенность этой программы состоит в том, что цифровая химия рассматривается

как дисциплина с глубокой химической спецификой. В центре внимания находятся не пользовательские ИИ-сервисы, а специализированные алгоритмы, адаптированные для задач масс-спектрометрии, электронной микроскопии, катализа, дизайна материалов, организации малотоннажных процессов и аддитивным технологиям. Благодаря этому обсуждаемые работы имеют не только методологическую новизну, но и высокую практическую значимость.

Сопоставление с мировой научной практикой показывает, что развитие цифровой химии в России происходило синхронно с глобальным движением «AI for science», но с отчетливым акцентом на экспериментальную химию, интерпретацию приборных данных и инфраструктурные

потребности реальной лабораторной практики. Именно поэтому обсуждаемая серия публикаций может рассматриваться как одна из первых целостных формулировок цифровой химии.

Перспективы дальнейшего развития этой области связаны с тремя направлениями: стандартизацией и повторным использованием химических данных; интеграцией алгоритмов в экспериментальные и производственные контуры; формированием методологических правил для систем, которые переходят от анализа к участию в научном поиске. Для химической науки в целом это означает переход от локальной цифровой поддержки к новой архитектуре исследования, в которой данные, алгоритмы и эксперимент работают как единая система.

Литература

1. Back S., Aspuru-Guzik A., Ceriotti M., Gryn'ova G., Grzybowski B., Gu G.H., Hein J. et. al. Accelerated chemical science with AI // *Digit. Discov.* – 2024. – V.3, №1. – Pp.23-33.
2. Tkatchenko A. Machine learning for chemical discovery // *Nat. Commun.* – 2020. – V.11, №1. – Art.no.4125.
3. Von Lilienfeld O.A., Burke K. Retrospective on a decade of machine learning for chemical discovery // *Nat. Commun.* – 2020. – V.11, №1. – Art.no.4895.
4. Segler M.H.S., Preuss M., Waller M.P. Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI // *Nature.* – 2018. – V.555, №7698. – Pp.604-610.
5. Zhu Q., Zhang F., Huang Y., Xiao H., Zhao L., Zhang X. et. al. An all-round AI-Chemist with a scientific mind // *Natl. Sci. Rev.* – 2022. – V.9, №10. – Art.no.nwac190.
6. Ha T., Lee D., Kwon Y., Park M.S., Lee S., Jang J. et. al. AI-driven robotic chemist for autonomous synthesis of organic molecules // *Sci. Adv.* – 2023. – V.9, №44. – Art.no.eadj0461.
7. Seifrid M., Pollice R., Aguilar-Granda A., Morgan Chan Z., Hotta K., Ser C.T., Vestfrid J., Wu T.C., Aspuru-Guzik A. Autonomous chemical experiments: challenges and perspectives on establishing a self-driving lab // *Acc. Chem. Res.* – 2022. – V.55, №17. – Pp.2454-2466.
8. Tom G., Schmid S.P., Baird S.G., Cao Y., Darvish K., Hao H., Lo S. et. al. Self-driving laboratories for chemistry and materials science // *Chem. Rev.* – 2024. – V.124, №16. – Pp.9633-9732.
9. Boiko D.A., MacKnight R., Kline B., Gomes G. Autonomous chemical research with large language models // *Nature.* – 2023. – V.624, №7992. – Pp.570-578.
10. Bran A.M., Cox S., Schilter O., Baldassari C., White A.D., Schwaller P. Augmenting large language models with chemistry tools // *Nat. Mach. Intell.* – 2024. – V.6, №5. – Pp.525-535.
11. Roch L.M., Hase F., Kreisbeck C., Tamayo-Mendoza T., Yunker L.P.E., Hein J.E., Aspuru-Guzik A. ChemOS: Orchestrating autonomous experimentation // *Sci. Robot.* – 2018. – V.3, №19. – Art.no.eaat5559.

References

1. Back S., Aspuru-Guzik A., Ceriotti M., Gryn'ova G., Grzybowski B., Gu G.H., Hein J. et. al. [Accelerated chemical science with AI]. *Digit. Discov.*, 2024, vol.3, no.1, pp.23-33.
2. Tkatchenko A. [Machine learning for chemical discovery]. *Nat. Commun.*, 2020, vol.11, no.1, art.no.4125.
3. Von Lilienfeld O.A., Burke K. [Retrospective on a decade of machine learning for chemical discovery]. *Nat. Commun.*, 2020, vol.11, no.1, art.no.4895.
4. Segler M.H.S., Preuss M., Waller M.P. Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI // *Nature.* – 2018. – vol.555, no.7698. – pp.604-610.
5. Zhu Q., Zhang F., Huang Y., Xiao H., Zhao L., Zhang X. et. al. [An all-round AI-Chemist with a scientific mind]. *Natl. Sci. Rev.*, 2022, vol.9, no.10, art.no.nwac190.
6. Ha T., Lee D., Kwon Y., Park M.S., Lee S., Jang J. et. al. [AI-driven robotic chemist for autonomous synthesis of organic molecules]. *Sci. Adv.*, 2023, vol.9, no.44, art.no.eadj0461.
7. Seifrid M., Pollice R., Aguilar-Granda A., Morgan Chan Z., Hotta K., Ser C.T., Vestfrid J., Wu T.C., Aspuru-Guzik A. [Autonomous chemical experiments: challenges and perspectives on establishing a self-driving lab]. *Acc. Chem. Res.*, 2022, vol.55, no.17, pp.2454-2466.
8. Tom G., Schmid S.P., Baird S.G., Cao Y., Darvish K., Hao H., Lo S. et. al. [Self-driving laboratories for chemistry and materials science]. *Chem. Rev.*, 2024, vol.124, no.16, pp.9633-9732.
9. Boiko D.A., MacKnight R., Kline B., Gomes G. [Autonomous chemical research with large language models]. *Nature*, 2023, vol.624, no.7992, pp.570-578.
10. Bran A.M., Cox S., Schilter O., Baldassari C., White A.D., Schwaller P. [Augmenting large language models with chemistry tools]. *Nat. Mach. Intell.*, 2024, vol.6, no.5, pp.525-535.
11. Roch L.M., Hase F., Kreisbeck C., Tamayo-Mendoza T., Yunker L.P.E., Hein J.E., Aspuru-Guzik A. [ChemOS: Orchestrating autonomous experimentation]. *Sci. Robot.*, 2018, vol.3, no.19, art.no.eaat5559.

12. MacLeod B.P., Parlane F.G.L., Morrissey T.D., Hase F., Roch L.M. et. al. Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials // *Sci. Adv.*– 2020.– V.6, №20.– Art.no.eaaz8867.
13. Ament S., Amsler M., Sutherland D.R., Chang M.-C., Guevarra D., et. al. Autonomous materials synthesis via hierarchical active learning of nonequilibrium phase diagrams // *Sci. Adv.*– 2021.– V.7, №51.– Art.no.eabg4930.
14. Strieth-Kalthoff F., Hao H., Rathore V., Derasp J., Gaudin T., Angello N.H. et. al. Delocalized, asynchronous, closed-loop discovery of organic laser emitters // *Science*.– 2024.– V.384, №6697.– Art.no.eadk9227.
15. Бuryкина Ю.В., Бойко Д.А., Ильюшенкова В.В., Еремин Д.Б., Анаников В.П. Масс-спектрометрическая идентификация химических соединений для развития алгоритмов машинного обучения и искусственного интеллекта // Докл. Рос. акад. наук. Хим., науки о материалах.– 2020.– V.492-493, №1.– Pp.116-122.
16. Ananikov V.P. Top 20 influential AI-based technologies in chemistry // *Artif. Intell. Chem.*– 2024.– V.2, №2.– Art.no.100075.
17. Анаников В.П. Цифровые технологии в химии и материаловедении // Вестн. Рос. акад. наук.– 2025.– V.4.– Pp.35-38.
18. Анаников В.П. Классификация применения искусственного интеллекта в химии: от автоматизации к цифровому научному мышлению // *ANALYTICS Russia*.– 2025.– V.15, №4.– Pp.246-260.
19. Анаников В. П. На пороге цифровой химии // *ANALYTICS Russia*.– 2024.– V.14, №6.– Pp.434-440.
20. Ananikov V.P. Will artificial intelligence (AI) replace chemists? // *Chem. Today*.– 2024.– V.42, №4.– Pp.14-15.
21. Boiko D.A., Pentsak E.O., Cherepanova V.A., Ananikov V.P. Electron microscopy dataset for the recognition of nanoscale ordering effects and location of nanoparticles // *Sci. Data*.– 2020.– V.7, №1.– Art.no.101.
22. 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.– V.12, №21.– Pp.7428-7441.
23. Kashin A.S., Boiko D.A., Ananikov V.P. Neural network analysis of electron microscopy video data reveals the temperature-driven microphase dynamics in the ions/water system // *Small*.– 2021.– V.17, №24.– Art.no.2007726.
24. 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.– V.144, №13.– Pp.6071-6079.
25. Boiko D.A., Kozlov K.S., Burykina J.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.– V.144, №32.– Pp.14590-14606.
26. Boiko D. A., Korabelnikova V. A., Gordeev E. G., Ananikov V. P. Integration of thermal imaging and neural networks for mechanical strength analysis and fracture prediction in 3D-printed plastic parts // *Sci. Rep.*– 2022.– V.12, №1.– Art.no.8944.
12. MacLeod B.P., Parlane F.G.L., Morrissey T.D., Hase F., Roch L.M. et. al. [Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials]. *Sci. Adv.*, 2020, vol.6, no.20, art.no.eaaz8867.
13. Ament S., Amsler M., Sutherland D.R., Chang M.-C., Guevarra D. et. al. [Autonomous materials synthesis via hierarchical active learning of nonequilibrium phase diagrams]. *Sci. Adv.*, 2021, vol.7, no.51, art.no.eabg4930.
14. Strieth-Kalthoff F., Hao H., Rathore V., Derasp J., Gaudin T. et. al. [Delocalized, asynchronous, closed-loop discovery of organic laser emitters]. *Science*, 2024, vol.384, no.6697, art.no.eadk9227.
15. Burykina J.V., Boiko D.A., Ilyushenkova V.V., Eremin D.B., Ananikov V.P. [Comprehensive mass spectrometric mapping of chemical compounds for the development of algorithms for machine learning and artificial intelligence]. *Doklady Physical Chemistry*, 2020, vol.492, no.1, pp.51-56.
16. Ananikov V.P.[Top 20 influential AI-based technologies in chemistry]. *Artif. Intell. Chem.*, 2024, vol.2, no.2, art.no.100075.
17. Ananikov V.P.*Tsifrovyye tekhnologii v khimii i materialovedenii* [Digital technologies in chemistry and materials science]. *Vestnik Rossiyskoy akademii nauk* [Herald of the Russian Academy of Sciences], 2025, vol.4, pp.35-38.
18. Анаников В.П. *Klassifikatsiya primeneniya iskusstvennogo intellekta v khimii: ot avtomatizatsii k tsifrovomu nauchnomu myshleniyu* [Classification of Artificial Intelligence Applications in Chemistry: From Automation to Digital Scientific Thinking]. *ANALYTICS Russia*, 2025, vol.15, no.4, pp.246-260.
19. Ananikov V.P. *Na poroge tsifrovoy khimii* [On the threshold of digital chemistry]. *ANALYTICS Russia*, 2024, vol.14, no.6, pp.434-440.
20. Ananikov V.P. [Will artificial intelligence (AI) replace chemists?]. *Chem. Today*, 2024, vol.42, no.4, pp.14-15.
21. Boiko D.A., Pentsak E.O., Cherepanova V.A., Ananikov V.P. [Electron microscopy dataset for the recognition of nanoscale ordering effects and location of nanoparticles]. *Sci. Data*, 2020, vol.7, no.1, art.no.101.
22. 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, vol.12, no.21, pp.7428-7441.
23. Kashin A.S., Boiko D.A., Ananikov V.P. [Neural network analysis of electron microscopy video data reveals the temperature-driven microphase dynamics in the ions/water system]. *Small*, 2021, vol.17, no.24, art.no.2007726.
24. 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, vol.144, no.13, pp.6071-6079.
25. Boiko D.A., Kozlov K.S., Burykina J.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, vol.144, no.32, pp.14590-14606.
26. Boiko D.A., Korabelnikova V.A., Gordeev E.G., Ananikov V.P. [Integration of thermal imaging and neural networks for mechanical strength analysis and fracture prediction in 3D-printed plastic parts]. *Sci. Rep.*, 2022, vol.12, no.1, art.no.8944.

27. Jumper J., Evans R., Pritzel A., Green T., Figurnov M., Ronneberger O., Tunyasuvunakool K. et.al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold // *Nature*.– 2021.– V.596, №7873.– Pp.583-589.
28. Abramson J., Adler J., Dunger J., Evans R., Green T., Pritzel A. et.al. Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3 // *Nature*.– 2024.– V.630, №8016.– Pp.493-500.
29. Merchant A., Batzner S., Schoenholz S.S., Aykol M., Cheon G. et.al. Scaling deep learning for materials discovery // *Nature*.– 2023.– V.624, №7990.– Pp.80-85.
30. Kozlov K.S., Boiko D.A., Burykina J.V., Ilyushenkova V.V., Kostyukovich A.Y., Patil E.D., Ananikov V.P. Discovering organic reactions with a machine-learning-powered deciphering of tera-scale mass spectrometry data // *Nat. Commun.*.– 2025.– V.16, №1.– Art.no.2587.
31. Schneider N., Lowe D.M., Sayle R.A., Landrum G.A. Development of a novel fingerprint for chemical reactions and its application to large-scale reaction classification and similarity // *J. Chem. Inf. Model.*.– 2015.– V.55, №1.– Pp.39-53.
32. Schwaller P., Probst D., Vaucher A.C., Nair V.H., Kreutter D., Laino T., Reymond J.-L. Mapping the space of chemical reactions using attention-based neural networks // *Nat. Mach. Intell.*.– 2021.– V.3, №2.– Pp.144-152.
33. Strieth-Kalthoff F., Sandfort F., Kuhnemund M., Schafer F.R., Kuchen H., Glorius F. Machine learning for chemical reactivity: the importance of failed experiments // *Angew. Chem. Int. Ed.*.– 2022.– V.61, №29.– Art.no.e202204647.
34. Ucak U.V., Ashyrmamatov I., Ko J., Lee J. Retrosynthetic reaction pathway prediction through neural machine translation of atomic environments // *Nat. Commun.*.– 2022.– V.13, №1.– Art.no.1186.
35. Tyurin A.S., Boiko D.A., Kolomoets N.I., Ananikov V.P. Digitization of molecular complexity with machine learning // *Chem. Sci.*.– 2025.– V.16, №16.– Pp.6895-6908.
36. Boiko D.A., Kashin A.S., Sorokin V.R., Agaev Y.V., Zaytsev R.G., Ananikov V.P. Analyzing ionic liquid systems using real-time electron microscopy and a computational framework combining deep learning and classic computer vision techniques // *J. Mol. Liq.*.– 2023.– V.376.– Art.no.121407.
37. Boiko D.A., Sulimova V.V., Kurbakov M.Y., Kopylov A.V., Seredin O.S., Cherepanova V.A., Pentsak E.O., Ananikov V.P. Automated recognition of nanoparticles in electron microscopy images of nanoscale palladium catalysts // *Nanomaterials (Basel)*.– 2022.– V.12, №21.– Art.no.3914.
38. Kozlov K.S., Boiko D.A., Detusheva E.V., Detushev K.V., Pentsak E.O., Vereshchagin A.N., Ananikov V.P. Digital biology approach for macroscale studies of biofilm growth and biocide effects with electron microscopy // *Digit. Discov.*.– 2023.– V.2, №5.– Pp.1522-1539.
39. Holicheva A.A., Kozlov K.S., Boiko D.A., Kamanin M.S., Provotorova D.V., Kolomoets N.I., Ananikov V.P. Deep generative modeling of annotated bacterial biofilm images // *NPJ Biofilms Microbiomes*.– 2025.– V.11, №1.– Art.no.16.
40. Boiko D.A., Arkhipova D.M., Ananikov V.P. Recognition of molecular structure of phosphonium salts from the visual appearance of material with deep learning can reveal subtle homologs // *Small*.– 2024.– V.20, №48.– Art.no.2403423.
27. Jumper J., Evans R., Pritzel A., Green T., Figurnov M., Ronneberger O., Tunyasuvunakool K. et.al. [Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold]. *Nature*, 2021, vol.596, no.7873, pp.583-589.
28. Abramson J., Adler J., Dunger J., Evans R., Green T., Pritzel A. et.al. [Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3]. *Nature*, 2024, vol.630, no.8016, pp.493-500.
29. Merchant A., Batzner S., Schoenholz S.S., Aykol M., Cheon G. et.al. [Scaling deep learning for materials discovery]. *Nature*, 2023, vol.624, no.7990, pp.80-85.
30. Kozlov K.S., Boiko D.A., Burykina J.V., Ilyushenkova V.V., Kostyukovich A.Y., Patil E.D., Ananikov V.P. [Discovering organic reactions with a machine-learning-powered deciphering of tera-scale mass spectrometry data]. *Nat. Commun.*, 2025, vol.16, no.1, art.no.2587.
31. Schneider N., Lowe D.M., Sayle R.A., Landrum G.A. [Development of a novel fingerprint for chemical reactions and its application to large-scale reaction classification and similarity]. *J. Chem. Inf. Model.*, 2015, vol.55, no.1, pp.39-53.
32. Schwaller P., Probst D., Vaucher A.C., Nair V.H., Kreutter D., Laino T., Reymond J.-L. [Mapping the space of chemical reactions using attention-based neural networks]. *Nat. Mach. Intell.*, 2021, vol.3, no.2, pp.144-152.
33. Strieth-Kalthoff F., Sandfort F., Kuhnemund M., Schafer F.R., Kuchen H., Glorius F. [Machine learning for chemical reactivity: the importance of failed experiments]. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2022, vol.61, no.29, art.no.e202204647.
34. Ucak U.V., Ashyrmamatov I., Ko J., Lee J. [Retrosynthetic reaction pathway prediction through neural machine translation of atomic environments]. *Nat. Commun.*, 2022, vol.13, no.1, art.no. 1186.
35. Tyurin A.S., Boiko D.A., Kolomoets N.I., Ananikov V.P. [Digitization of molecular complexity with machine learning]. *Chem. Sci.*, 2025, vol.16, no.16, pp.6895-6908.
36. Boiko D.A., Kashin A.S., Sorokin V.R., Agaev Y.V., Zaytsev R.G., Ananikov V.P. [Analyzing ionic liquid systems using real-time electron microscopy and a computational framework combining deep learning and classic computer vision techniques]. *J. Mol. Liq.*, 2023, vol.376, art.no.121407.
37. Boiko D.A., Sulimova V.V., Kurbakov M.Y., Kopylov A.V., Seredin O.S., Cherepanova V.A., Pentsak E.O., Ananikov V.P. [Automated recognition of nanoparticles in electron microscopy images of nanoscale palladium catalysts]. *Nanomaterials (Basel)*, 2022, vol.12, no.21, art.no.3914.
38. Kozlov K.S., Boiko D.A., Detusheva E.V., Detushev K.V., Pentsak E.O., Vereshchagin A.N., Ananikov V.P. [Digital biology approach for macroscale studies of biofilm growth and biocide effects with electron microscopy]. *Digit. Discov.*, 2023, vol.2, no.5, pp.1522-1539.
39. Holicheva A.A., Kozlov K.S., Boiko D.A., Kamanin M.S., Provotorova D.V., Kolomoets N.I., Ananikov V.P. [Deep generative modeling of annotated bacterial biofilm images]. *NPJ Biofilms Microbiomes*, 2025, vol.11, no.1, art.no.16.
40. Boiko D.A., Arkhipova D.M., Ananikov V.P. [Recognition of molecular structure of phosphonium salts from the visual appearance of material with deep learning can reveal subtle homologs]. *Small*, 2024, vol.20, no.48, art.no.2403423.

41. Yao L., Ou Z., Luo B., Xu C., Chen Q. Machine learning to reveal nanoparticle dynamics from liquid-phase TEM videos // *ACS Cent. Sci.*– 2020.– V.6, №8.– Pp.1421-1430.
42. Madsen J., Liu P., Kling J., Wagner J.B., Hansen T.W., Winther O., Schiotz J. A deep learning approach to identify local structures in atomic-resolution transmission electron microscopy images // *Adv. Theory Simul.*– 2018.– V.1, №8.– Art.no.1800037.
43. Chen M., Dai W., Sun S.Y., Jonasch D., He C.Y., Schmid M.F., Chiu W., Ludtke S.J. Convolutional neural networks for automated annotation of cellular cryo-electron tomograms // *Nat. Methods.*– 2017.– V.14, №10.– Pp.983-985.
44. Анаников В.П. Эпоха «ИИ для» и интеллектуальная инфраструктура науки и инженерии XXI века // *Аддитив. технол.*– 2025.– V.3.– Pp.10-13.
45. Galushko A.S., Boiko D.A., Pentsak E.O., Eremin D.B., Ananikov V.P. Time-resolved formation and operation maps of Pd catalysts suggest a key role of single atom centers in cross-coupling // *J. Am. Chem. Soc.*– 2023.– V.145, №16.– Pp.9092-9103.
46. Galushko A.S., Ananikov V.P. 4D catalysis concept enabled by multilevel data collection and machine learning analysis // *ACS Catal.*– 2023.– V.14, №1.– Pp.161-175.
47. Grebennikov N.O., Boiko D.A., Prima D.O., Madiyeva M., Minyaev M.E., Ananikov V.P. Boosting the generality of catalytic systems by the synergetic ligand effect in Pd-catalyzed C-N cross-coupling // *J. Catal.*– 2024.– V.429.– Art.no.115240.
48. Ivanova N.M., Kashin A.S., Ananikov V.P. Lost data in electron microscopy // *Chemistry.*– 2025.– V.7, №5.– Art.no.160.
49. Hart E.M., Barmby P., LeBauer D., Michonneau F., Mount S. et.al. Ten simple rules for digital data storage // *PLoS Comput. Biol.*– 2016.– V.12, №10.– Art.no.e1005097.
50. Goodman A., Pepe A., Blocker A.W., Borgman C.L., Cranmer K. et.al. Ten simple rules for the care and feeding of scientific data // *PLoS Comput. Biol.*– 2014.– V.10, №4.– Art.no.e1003542.
51. Erps T., Foshey M., Lukovic M.K., Shou W., Goetzke H.H. et.al. Accelerated discovery of 3D printing materials using data-driven multiobjective optimization // *Sci. Adv.*– 2021.– V.7, №42.– Art.no.eabf7435.
52. Han R., Yoon H., Kim G., Lee H., Lee Y. Revolutionizing medicinal chemistry: the application of artificial intelligence (AI) in early drug discovery // *Pharmaceuticals (Basel).*– 2023.– V.16, №9.– Art.no.1259.
53. Pitt W.R., Bentley J., Boldron C., Colliandre L., Esposito C. et.al. Real-world applications and experiences of AI/ML deployment for drug discovery // *J. Med. Chem.*– 2025.– V.68, №2.– Pp.851-859.
41. Yao L., Ou Z., Luo B., Xu C., Chen Q. [Machine learning to reveal nanoparticle dynamics from liquid-phase TEM videos]. *ACS Cent. Sci.*, 2020, vol.6, no.8.– pp.1421-1430.
42. Madsen J., Liu P., Kling J., Wagner J.B., Hansen T.W., Winther O., Schiotz J. [A deep learning approach to identify local structures in atomic-resolution transmission electron microscopy images]. *Adv. Theory Simul.*, 2018, vol.1, no.8, art.no.1800037.
43. Chen M., Dai W., Sun S.Y., Jonasch D., He C.Y., Schmid M.F., Chiu W., Ludtke S.J. [Convolutional neural networks for automated annotation of cellular cryo-electron tomograms]. *Nat. Methods*, 2017, vol.14, no.10, pp.983-985.
44. Ananikov V.P. *Epokha «II dlya» i intellektual'naya infrastruktura nauki i inzhenerii XXI veka* [The Era of "AI for" and the Intelligent Infrastructure of Science and Engineering in the 21st Century]. *Additiv. tekhnol.* [Additive Technology], 2025, vol.3, pp.10-13.
45. Galushko A.S., Boiko D.A., Pentsak E.O., Eremin D.B., Ananikov V.P. [Time-resolved formation and operation maps of Pd catalysts suggest a key role of single atom centers in cross-coupling]. *J. Am. Chem. Soc.*, 2023, vol.145, no.16, pp.9092-9103.
46. Galushko A.S., Ananikov V.P. [4D catalysis concept enabled by multilevel data collection and machine learning analysis]. *ACS Catal.*, 2023, vol.14, no.1, pp.161-175.
47. Grebennikov N.O., Boiko D.A., Prima D.O., Madiyeva M., Minyaev M.E., Ananikov V.P. [Boosting the generality of catalytic systems by the synergetic ligand effect in Pd-catalyzed C–N cross-coupling]. *J. Catal.*, 2024, vol.429, art.no.115240.
48. Ivanova N.M., Kashin A.S., Ananikov V.P. [Lost data in electron microscopy]. *Chemistry*, 2025, vol.7, no.5, art.no.160.
49. Hart E.M., Barmby P., LeBauer D., Michonneau F., Mount S. et.al. [Ten simple rules for digital data storage]. *PLoS Comput. Biol.*, 2016, vol.12, no.10, art.no.e1005097.
50. Goodman A., Pepe A., Blocker A.W., Borgman C.L., Cranmer K. et.al. [Ten simple rules for the care and feeding of scientific data]. *PLoS Comput. Biol.*, 2014.– vol.10, no.4, art.no.e1003542.
51. Erps T., Foshey M., Lukovic M.K., Shou W., Goetzke H.H. et.al. [Accelerated discovery of 3D printing materials using data-driven multiobjective optimization]. *Sci. Adv.*, 2021, vol.7, no.42, art.no.eabf7435.
52. Han R., Yoon H., Kim G., Lee H., Lee Y. [Revolutionizing medicinal chemistry: the application of artificial intelligence (AI) in early drug discovery]. *Pharmaceuticals (Basel)*, 2023, vol.16, no.9, art.no.1259.
53. Pitt W.R., Bentley J., Boldron C., Colliandre L., Esposito C. et.al. [Real-world applications and experiences of AI/ML deployment for drug discovery]. *J. Med. Chem.*, 2025, vol.68, no.2, pp.851-859.