

Список основных публикаций работников ИФХЭ РАН по теме диссертации

1. Obradović D., Stavrianiđi A., Fedorova E., Bogojević A., Shpigun O., Buryak A., Lazović S. A comparative study of the predictive performance of different descriptor calculation tools: molecular-based elution order modeling and interpretation of retention mechanism for isomeric compounds from metlin database // *Journal of Chromatography A*. 2024. Т. 1719. С. 464731.

2. Чикурова Н.Ю., Горбовская А.В., Ставрианиди А.Н., Фёдорова Е.С., Шемякина А.О., Буряк А.К., Ужель А.С., Чернобровкина А.В., Шпигун О.А. Новые сорбенты для определения аминокислот в почвенных экстрактах методом гидрофильной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием // *Журнал аналитической химии*. 2023. Т. 78. № 7. С. 637-647.

3. Матюшин Д.Д., Буряк А.К. Применение машинного обучения для газохроматографического анализа органических молекул и предсказания их токсичности // *Известия Академии наук. Серия химическая*. 2023. Т. 72. № 2. С. 482-492.

4. Fedorova E.S., Matyushin D.D., Stavrianiđi A.N., Buryak A.K., Plyushchenko I.V. Deep learning for retention time prediction in reversed-phase liquid chromatography // *Journal of Chromatography A*. 2022. Т. 1664. С. 462792.

5. Matyushin D.D., Sholokhova A.Yu., Buryak A.K. Deep learning based prediction of gas chromatographic retention indices for a wide variety of polar and mid-polar liquid stationary phases // *International Journal of Molecular Sciences*. 2021. Т. 22. № 17.

6. Grinevich O., Khesina Z., Buryak A. Abnormal retention of s-triazine herbicides on porous graphitic carbon // *Reviews in Analytical Chemistry*. 2021. Т. 41. № 1. С. 1-9.

7. Karnaeva A., Buryak A., Kulikova O., Mazlova E. Investigation of man-caused contaminated sites in the arctic region // *Environmental Science and Engineering (Subseries: Environmental Science)*. 2021. С. 661-664.

8. Milyushkin A.L., Matyushin D.D., Buryak A.K. A peculiar chromatographic selectivity of porous graphitic carbon during the separation of dileucine isomers // *Journal of Chromatography A*. 2020. Т. 1613. С. 460724.

9. Sholokhova A.Y., Buryak A.K., Patrushev Y.V., Sidelnikov V.N. Analysis of light components in pyrolysis products by comprehensive two-dimensional gas chromatography with plot columns // *Talanta*. 2020. Т. 209. С. 120448.

10. Matyushin D.D., Sholokhova A.Y., Buryak A.K. Deep learning driven GC-MS library search and its application for metabolomics // *Analytical Chemistry*. 2020. Т. 92. № 17. С. 11818-11825.

11. Шолохова А.Ю., Малкин А.И., Буряк А.К. Масс-спектрометрическое исследование продуктов деструкции тефлона методом поверхностно-активированной лазерной десорбции/ионизации // *Журнал физической химии*. 2020. Т. 94. № 10. С. 1561-1566.

12. Паренаго О.О., Костенко М.О., Устинович К.Б., Хесина З.Б., Буряк А.К. Оценка эффективности экстракции малорастворимых примесей из водных растворов сверхкритическими флюидами в динамическом проточном режиме хромато-масс-спектрометрическим методом // *Сорбционные и хроматографические процессы*. 2020. Т. 20. № 6. С. 658-673.

13. Matyushin D.D., Sholokhova A.Y., Buryak A.K. A deep convolutional neural network for the estimation of gas chromatographic retention indices // *Journal of Chromatography A*. 2019. Т. 1607. С. 460395.

14. Matyushin D.D., Buryak A.K. Simulation of the adsorption of polychlorinated aromatic hydrocarbons on graphitized thermal carbon black for predicting chromatographic retention values // *Journal of Analytical Chemistry*. 2019. Т. 74. № 2. С. 47-51.

15. Матюшин Д.Д., Буряк А.К. Моделирование адсорбции ароматических полихлорзамещенных углеводородов на графитированной термической саже для предсказания величин хроматографического удерживания // *Журнал аналитической химии*. 2019. Т. 74. № 7S. С. S57-S62.