



Проценко Богдан Олегович

Исследовательская лаборатории
"Микрофлюидные технологии для
ускоренного синтеза материалов"

Должность: Лаборант-исследователь

Email: bprocenko@sfedu.ru

Дата рождения: 12.10.1999 г.,
г. Красный Сулин, Россия

ORCID:

<https://orcid.org/0000-0001-7227-026X>

Образование:

2018-2021гг. :Бакалавриат,16.03.01 Техническая физика,Физический факультет ЮФУ.
2022-2024 гг.: Магистратура «Nanoscale structure of materials», 03.04.02 Физика, МИИ
ИМ ЮФУ.

Направления исследований (ключевые слова):

Катализ, Функциональные материалы, XANES, EXAFS, Density Functional Theory, Wave Function Theory, Molecular Dynamics, Monte Carlo, Machine learning, Deep Learning, Zeolites, Infrared, Raman, *in situ*

Исследовательская активность:

Спектроскопия (XAS, FTIR, RAMAN), перво- и второпринципное моделирование (DFT, MD), машинное обучение (Zeolite project, PyFitIt) в приложении к катализу и функциональные материалы (гетеро- и гомогенный катализ, цеолиты).

Область научных интересов:

- Гомо- и гетерогенный катализ, нанесённые и single-site катализаторы: нанесённые наночастицы палладия, метал-обменные цеолиты, комплексы родия и рутения, катализаторы Филлипса и Циглера-Натта.
- Микро- и мезопористые материалы: Цеолиты, металл-органические каркасы.
- Первопринципное моделирование каталитических систем и функциональных материалов методами теории функционала плотности и линейноскейляющиеся методы на основе пост-Хартри-Фоковских методов.

- Информатика материалов (Materials informatics) и дата-ориентированная наука. Мультимасштабное моделирование катализаторов и функциональных материалов методами второпринципного моделирования с применением потенциалов машинного обучения и силовых полей.
- Основанная на использовании синхротронного излучения *in situ* диагностика каталитических систем в ходе реакции (XANES, EXAFS).
- Инфракрасная спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния света, в том числе с молекулами-зондами.
- Новые подходы к анализу спектроскопических данных на основе машинного обучения (PyFitIt).
- Применение алгебраической топологии и методов топологической науки о данных для конструирования признаков спектральных и структурных данных материалов, формализации специфики структурных параметров и поведения систем.

Методы:

- *Ab initio* методы моделирования структуры и свойств функциональных материалов: DFT, WFT при использовании VASP, AMS, ORCA, GPAW.
- Методы Монте-Карло и молекулярной динамики (LAMMPS)
- Методы науки о данных в физической химии и физики конденсированного состояния. Машинное обучение, в том числе потенциалы машинного обучения.
- Рентгеновская спектроскопия (XANES, EXAFS), колебательная спектроскопия (ИК, Раман).

Награды и звания:

- Медаль имени Юрия Андреевича Жданова «за успехи в учёбе, науке, творчестве и высокую гражданскую активность за годы обучения». Приказ ректора Южного Федерального Университета № 9892 от 04 июля 2022 года.
- Награда Королевского Химического Сообщества за лучший устный доклад на III школе молодых учёных «Nanostructure materials with controllable properties» в РГУ нефти и газа (НИУ) им. И.М. Губкина, Москва, 22-24 Ноября 2021.
- Награда за лучший устный доклад на конференции «Школа молодых ученых по синхротронным методам исследования в материаловедении», 2-3 ноября 2022 г., Новосибирск
- Лучший устный доклад на II Всероссийской молодёжной конференции «Высокоточная диагностика функциональных материалов: лабораторные и синхротронные исследования», Воронеж, 12-17 сентября 2022.
- Награда за лучший постерный доклад на конференции International school for young researchers IWSN-2022, October 20-21, Ростов-на-Дону, 2022 год.
- Награда за лучший постерный доклад на конференции VII International School-Conference for Young Scientists Catalysis: from Science to Industry, October 11-15, 2022, Томск.
- 1-е место в секции «Интеллектуальные материалы и исследовательские установки мега-класса» студенческой научной конференции «Неделя науки 2023», Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, 2023 год.

- 3-е место в секции «Интеллектуальные материалы и исследовательские установки мега-класса» студенческой научной конференции «Неделя науки 2022», Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, 2022 год.
- 1-е место в секции «Техническая физика» студенческой научной конференции «Неделя науки 2022», Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, 2022 год
- 1-е место в секции «Доклады студентов на английском языке» студенческой научной конференции «Неделя науки 2022», Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, 2022 год.
- 1-е место в секции «Доклады студентов на английском языке» студенческой научной конференции «Неделя науки 2022», Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, 2022 год.
- 1-е место в секции «Физика (доклады на английском языке)» студенческой научной конференции Южного Федерального Университета «Неделя науки 2020».

Патенты и зарегистрированные программы ЭВМ:

1. Проценко Б.О., Скорынина А.А., Усольцев О.А., Гуда С.А. Теоретические инфракрасные спектры цеолитов разных типов, База данных №2023622551, 26 июля 2023 г.
2. Солдатов А.В., Пневская А.Ю., Проценко Б.О., Виртуальный тур по источникам синхротронного излучения, программа для ЭВМ №2023668223, 24 августа 2023 г.

Синхротронные эксперименты:

Принял участие в 4 экспериментах на источниках синхротронного излучения: на станции SuperXAS Швейцарского Источника Фотонов и станции СТМ Курчатовского Источника Синхротронного Излучения.

Российские гранты:

- Установление закономерностей колебательных спектров цеолитов с использованием квантово-химического моделирования и методов машинного обучения, 29.12.2021-31.12.2023.
- Управляемая искусственным интеллектом роботизированная станция на источнике синхротронного излучения для ускоренной разработки новых перспективных материалов и их диагностики в режиме реального времени, 05.10.2021-31.12.2023.
- Цифровая модель экспериментальной физической среды диагностики наноматериалов на основе синхротронного излучения для тренировки агентов глубокого обучения с подкреплением, 01.08.2022-30.06.2024.
- Программа стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (Нацпроект «Наука и университеты») МИИ ИМ ЮФУ.

Научные публикации в реферируемых журналах:

1. Skorynina, A. A., Protsenko, B. O., Usoltsev, O. A., Guda, S. A. & Bugaev, A. L. Quantitative Structural Description of Zeolites by Machine Learning Analysis of Infrared Spectra. *Inorg. Chem.* 62, 6608–6616 (2023).
2. Usoltsev, O. A. et al. Evolution of surface and bulk structure of supported palladium nanoparticles by in situ X-ray absorption and infrared spectroscopies: Effect of temperature, CO and CH₄ gas. *Applied Surface Science* 614, 156171 (2023).
3. Polyanichenko, D. S., Protsenko, B. O., Egil, N. V. & Kartashov, O. O. Deep Reinforcement Learning Environment Approach Based on Nanocatalyst XAS Diagnostics Graphic Formalization. *Materials* 16, 5321 (2023).
4. Usoltsev, O. A., Protsenko, B. O., Pnevskaya, A. Yu., Bulgakov, A. N. & Bugaev, A. L. Effect of the Hydride and Carbide Phases of Palladium Nanoparticles on the Vibration Frequencies of Adsorbed Surface Molecules. *Kinet Catal* 64, 191–200 (2023).
5. Topolov, V. Yu., Isaeva, A. N., Denisova, A. O., Bowen, C. R. & Protsenko, B. O. Effect of the Matrix Subsystem on Piezoelectric Properties and Related Parameters of Lead-Free 1–3-Type Composites Based on Domain-Engineered Single Crystals. In *Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications* (eds. Parinov, I. A., Chang, S.-H. & Soloviev, A. N.) 104–119 (Springer International Publishing, 2023). Doi:10.1007/978-3-031-21572-8_10.
6. Topolov, V. Y., Isaeva, A. N., Bowen, C. R. & Protsenko, B. O. Piezoelectric properties and related parameters of novel 1–2–2 composites based on single crystals of the PZN–xPT type. *Ferroelectrics* 591, 178–190 (2022).
7. Topolov, V. Y., Isaeva, A. N., Bowen, C. R. & Protsenko, B. O. Relationships between piezoelectric and energy-harvesting characteristics of 1–2–2 composites based on domain-engineered single crystals. *Ferroelectrics* 583, 230–242 (2021).

[RU](#)
[ENG](#)



Bogdan O. Protsenko

Born: 12.10.1999, Krasny Sulin (Russia)

Address: Southern Federal University, 178/24 Sladkova str., Rostov-on-Don, 344090 Russia.

Email: bprocenko@sfedu.ru

Website: <http://nano.sfedu.ru>

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7227-026X>

Academic positions: Laborant-researcher

Education and Degrees:

2018-2021: Bachelor's degree, 16.03.01 Техническая физика, Physical department at SFedU.

2022-2024: Masters's degree «Nanoscale structure of materials», 03.04.02 Physics, The Smart Materials Research Institute at the SFedU.

Research sectors (Keywords):

Catalysis, Functional materials, XANES, EXAFS, Density Functional Theory, Wave Function Theory, Molecular Dynamics, Monte Carlo, Machine learning, Deep Learning, Zeolites, Infrared, Raman, *in situ*.

Research activity:

Bogdan uses spectroscopy (XAS, FTIR, RAMAN), *ab initio* and semi-empirical modeling (DFT, MD) and machine learning (Zeolite project, PyFitIt) to address different problems in catalysis and functional materials (hetero- and homogeneous catalysis, microporous materials).

Fields of interest:

- Homo- and heterogeneous catalysis, applied and single-site catalysts: applied palladium nanoparticles, metal-exchange zeolites, rhodium and ruthenium complexes, Phillips and Ziegler-Natta catalysts.
- Micro- and mesoporous materials: Zeolites, metal-organic frameworks.

- First-principles modeling of catalytic systems and functional materials by density functional theory methods and linear-scaling methods based on post-Hartree-Fock methods.
 - Materials informatics and data-driven science. Multiscale modeling of catalysts and functional materials by methods of second-principles modeling with application of machine learning potentials and force fields.
 - Synchrotron radiation-based in situ diagnostics of catalytic systems during reaction (XANES, EXAFS).
 - Infrared and Raman spectroscopy, also with the use of probe molecules.
 - New approaches to analyzing spectroscopic data based on machine learning (PyFitIt).
- Application of algebraic topology and topological data science methods to the design of spectral and structural data features of materials, formalizing the specificity of structural parameters and behavior of systems.

Methods:

- *Ab initio* methods for modeling the structure and properties of functional materials: DFT, WFT using VASP, AMS, ORCA, GPAW. Методы Монте-Карло и молекулярной динамики (LAMMPS)
- Data science methods in physical chemistry and condensed matter physics. Machine learning, including machine learning and force-field potentials.
- X-ray spectroscopy (XANES, EXAFS), vibrational spectroscopy (IR, Raman).

Honor awards:

- Medal named after Yuri Andreevich Zhdanov "for successes in studies, science, creativity and high civic activity during the years of study". Order of the Rector of the Southern Federal University No. 9892 dated July 04, 2022.
- Award of the Royal Society of Chemistry for the best oral report at the III School of Young Scientists "Nanostructure materials with controllable properties" at Gubkin Russian State University of Oil and Gas (RSU), Moscow, November 22-24, 2021.
- Award for the best oral presentation at the Conference "School of Young Scientists on Synchrotron Methods of Research in Materials Science", November 2-3, 2022, Novosibirsk.
- Best oral presentation at the II All-Russian Youth Conference "High-precision diagnostics of functional materials: laboratory and synchrotron research", Voronezh, September 12-17, 2022.
- Award for the best poster presentation at the conference International school for young researchers IWSN-2022, October 20-21, Rostov-on-Don, 2022.
- Award for the best poster presentation at the VII International School-Conference for Young Scientists Catalysis: from Science to Industry, October 11-15, 2022, Tomsk.
- 1st place in the section "Intelligent Materials and Mega-Class Research Facilities" of the Student Scientific Conference "Science Week 2023", Southern Federal University, Rostov-on-Don, 2023.
- 3rd place in the section "Intelligent materials and mega-class research facilities" of the student scientific conference "Science Week 2022", Southern Federal University, Rostov-on-Don, 2022.

- 1st place in the section "Technical Physics" of the student scientific conference "Science Week 2022", Southern Federal University, Rostov-on-Don, 2022.
- 1st place in the section "Student Reports in English" of the student scientific conference "Science Week 2022", Southern Federal University, Rostov-on-Don, 2022.
- 1st place in the section "Student Reports in English" of the student scientific conference "Science Week 2022", Southern Federal University, Rostov-on-Don, 2022.
- 1st place in the section "Physics (papers in English)" of the student scientific conference of the Southern Federal University "Science Week 2020".

Scientific publications in peer-reviewed journals:

1. Skorynina, A. A., Protsenko, B. O., Usoltsev, O. A., Guda, S. A. & Bugaev, A. L. Quantitative Structural Description of Zeolites by Machine Learning Analysis of Infrared Spectra. *Inorg. Chem.* 62, 6608–6616 (2023).
2. Usoltsev, O. A. et al. Evolution of surface and bulk structure of supported palladium nanoparticles by in situ X-ray absorption and infrared spectroscopies: Effect of temperature, CO and CH₄ gas. *Applied Surface Science* 614, 156171 (2023).
3. Polyanichenko, D. S., Protsenko, B. O., Egil, N. V. & Kartashov, O. O. Deep Reinforcement Learning Environment Approach Based on Nanocatalyst XAS Diagnostics Graphic Formalization. *Materials* 16, 5321 (2023).
4. Usoltsev, O. A., Protsenko, B. O., Pnevskaya, A. Yu., Bulgakov, A. N. & Bugaev, A. L. Effect of the Hydride and Carbide Phases of Palladium Nanoparticles on the Vibration Frequencies of Adsorbed Surface Molecules. *Kinet Catal* 64, 191–200 (2023).
5. Topolov, V. Yu., Isaeva, A. N., Denisova, A. O., Bowen, C. R. & Protsenko, B. O. Effect of the Matrix Subsystem on Piezoelectric Properties and Related Parameters of Lead-Free 1–3-Type Composites Based on Domain-Engineered Single Crystals. In *Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications* (eds. Parinov, I. A., Chang, S.-H. & Soloviev, A. N.) 104–119 (Springer International Publishing, 2023). Doi:10.1007/978-3-031-21572-8_10.
6. Topolov, V. Y., Isaeva, A. N., Bowen, C. R. & Protsenko, B. O. Piezoelectric properties and related parameters of novel 1–2–2 composites based on single crystals of the PZN–xPT type. *Ferroelectrics* 591, 178–190 (2022).
7. Topolov, V. Y., Isaeva, A. N., Bowen, C. R. & Protsenko, B. O. Relationships between piezoelectric and energy-harvesting characteristics of 1–2–2 composites based on domain-engineered single crystals. *Ferroelectrics* 583, 230–242 (2021).

Synchrotron experiments :

Participated in 4 experiments at synchrotron radiation sources: at the SuperXAS station of the Swiss Photon Source and the STM station of the Kurchatov Synchrotron Radiation Source.

Patents and registered computer programs:

1. Protsenko B.O., Skorynina A.A., Usoltsev O.A., Guda S.A. Theoretical infrared spectra of zeolites of different types, Database №2023622551, July 26, 2023.

2. Soldatov A.V., Pnevskaya A.Yu., Protsenko B.O., Virtual tour on synchrotron radiation sources, Computer program №2023668223, August 24, 2023.

Russian national grants:

- Establishment of regularities of vibrational spectra of zeolites using quantum-chemical modeling and machine learning methods, 29.12.2021-31.12.2023.
- Artificial intelligence controlled robotic station at synchrotron radiation source for accelerated development of new promising materials and their diagnostics in real time, 05.10.2021-31.12.2023.
- Digital model of synchrotron radiation-based experimental physical environment of nanomaterials diagnostics for training deep reinforcement learning agents, 01.08.2022-30.06.2024.
- Strategic Academic Leadership Program "Priority-2030" (National Project "Science and Universities").