

Отчет по мероприятию

Полное наименование мероприятия

Международный симпозиум От эмпирической к предсказательной химии, сателлитный симпозиум (дополнительная секция) в рамках XX Менделеевского съезда по общей и прикладной химии

Направления

Химия, фармацевтика;

Срок проведения

с 26.09.2016 по 30.09.2016

Организатор

- Химический институт им. А.М. Бутлерова

Ответственный(ые)

[Антипин И.С.](#)

[Маджидов Т.И.](#)

Email

mendeleev2016@gmail.com

Телефон

+7(904)662-77-36

Количество участников

88

Краткая информация о результатах проведенного научного мероприятия:

Хемоинформатика является мультидисциплинарным направлением в химии, объединяющая химию, информатику, биологию и статистику. Одной из основных задач ее является разработка подходов для дизайна новых веществ с заданными свойствами с использованием различных вычислительных подходов. Считается, что использованием средств хемоинформатики на этапе поисковых исследований и оптимизации позволяет сократить на 30% разработку новых лекарственных препаратов. Симпозиум была посвящен использованию различных подходов хемоинформатики и молекулярного моделирования к решению различных актуальных задач химии. Акцент был сделан на использовании этих технологий к дизайну лекарств и материалов. На Симпозиуме выступили выдающиеся российские и зарубежные ученые - специалисты в области компьютерной химии, в том числе А. Оганов (State University of New York, МФТИ, Сколтех), А. Тропша (University of North Carolina), А. Варнек (University of Strasbourg), В. Поройков (ИБМХ им. Ореховича), А. Чугреев (МГУ, Institut für Anorganische Chemie von Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule) и другие. Было показано, что использование средств вычислительной химии позволяет существенно упростить разработку новых соединений, веществ и материалов с интересующими свойствами. Данный подход позволяет перейти от эмпирической химии к химии предсказательной, когда прецизионный расчет позволяет направить исследователей, упростить синтез и снизить вероятность ошибки. В последний день Симпозиума состоялся круглый стол по проблемам и перспективам использования мультимасштабного моделирования в дизайне веществ и материалов. Симпозиум предварялся Школой по хемоинформатике, на которой молодым исследователям и студентам объяснялись основы хемоинформатики как науки. Мероприятие способствовало развитию международного и междисциплинарного сотрудничества в области хемоинформатики, а также повышению престижа КФУ на мировой арене. #65279

Библиографическое описание сборника тезисов докладов (статей), изданного по итогам работы НТМ:

XX Mendeleev Congress on general and applied chemistry. Five-volumes book. Vol.5: abstracts. - Ekaterinburg: Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 2016. - 272 p.