

Отчет по мероприятию

Полное наименование мероприятия

III Международная школа-конференция по хемоинформатике

Направления

Химия, фармацевтика;

Срок проведения

с 05.07.2017 по 07.07.2017

Организатор

- Химический институт им. А.М. Бутлерова

Ответственный(ые)

[Маджидов Т.И.](#)

Email

tmadzhidov@gmail.com

Телефон

+7(904)662-77-36

Количество участников

113

Краткая информация о результатах проведенного научного мероприятия:

Хемоинформатика является междисциплинарным 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. Казанская школа по хемоинформатике является основным мероприятием в области хемоинформатики в КФУ. Оно проводится раз в два года и неизменно собирает самых известных и уважаемых специалистов в области хемоинформатики, дизайна лекарств и материалов. Так, в данной школе приняли участие многие известные специалисты в данной области: А. Тропша, А. Варнек, В. Поройков, В. Соловьев, В. Сулимов, П. Васильев, представители компаний, таких как BIOCAD, Elsevier, Reaxys, IFP Energies Nouvelles, ООО Димонта. Мероприятие включало в себя лекции по базовым понятиям хемоинформатики, ключевые обзорные доклады, устные доклады, обобщающие собственные научные достижения. Кроме этого, проводились практические занятия на самом современном научном оборудовании и с использованием современных инструментов. Практические занятия проводились представителями компании - разработчика инструментов. Таким образом, участники школы имели возможность не только изучить базовые представления и концепции хемоинформатики, но также приобрести практические навыки. Состоялась также постерная сессия. По результатам выступлений были определены 3 лучших доклада. Решено, что следующее мероприятие традиционно состоится в 2019 году в Казани. Участники отметили высокий уровень проведения мероприятия, выразили желание и в дальнейшем принимать в нем участие. Можно отметить, что из года в год расширяется география конференции и увеличивается число участников. На конференции состоялась презентация новых томов учебных пособий по хемоинформатике, выпущенных в КФУ российско-французским коллективом авторов. Проведение данного мероприятия способствует продвижению бренда КФУ на мировой арене в первую очередь как одного из мировых центров хемоинформатики и центра, объединяющего российских специалистов, работающих в области хемоинформатики и дизайна соединений и материалов. Мероприятие способствовало укреплению международных научных связей и вовлечению ученых КФУ в международные научные проекты.

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

3rd Kazan Summer School on Chemoinformatics (5-7 July 2017, Kazan). - Kazan: Kazan Federal University, 2017. - 92 pp.

Резолюция и принятые решения:

Отсутствуют.