

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Российская секция Международного общества по хемоинформатике и анализу количественных соотношений "структура-активность" и Татарстанское отделение Российского химического общества им. Д.И. Менделеева приглашаем Вас и Ваших коллег принять участие в [Первой](#)

[летней школе-конференции по хемоинформатике](#)

, которая состоится 26-29 августа 2013 года в г. Казань (Республика Татарстан, Россия).

[Регистрация](#)

уже открыта на сайте Школы-конференции (

<http://kssci.kpfu.ru>

) и продлится до 15 мая.

Летняя школа-конференция по хемоинформатике предназначена как для людей только начинающих изучение хемоинформатики и не знакомых даже с базовыми ее понятиями, так и для тех, кто желает углубить и расширить свои познания в данной области, систематизировать знания, презентовать собственные достижения и ознакомиться с успехами других ученых в данной области.

Хемоинформатика – это новое и крайне востребованное мультидисциплинарное направление современной химической науки, находящееся на пересечении химии, биологии, математики и информатики. Основными целями данной дисциплины являются хранение и организация доступа к химической информации, а также ее использование для создания соединений, реакций, материалов, обладающих заданными характеристиками. Основное применение хемоинформатика находит в создании новых лекарственных препаратов для медицины и ветеринарии, а также широко используется для создания инновационных материалов, катализаторов, реагентов для химической промышленности. При наличии большого потенциального спроса на специалистов по хемоинформатике, в России обучение хемоинформатике находится в самом начале пути. Только в последнее время в МГУ и МФТИ открылись соответствующие учебные курсы, а в 2012 г. в [Казанском университете открылась магистерская программа по хемоинформатике](#), ставшая третьей в мире действующей образовательной программой по данной специальности.

Летняя школа-конференция по хемоинформатике, которая планируется как регулярное мероприятие, ставит своей целью создание условий для подготовки в России специалистов по хемоинформатике мирового уровня, а также формирование учебно-научной среды, объединяющей представителей академической науки, фармацевтической и химической промышленности, IT-специалистов и девелоперов.

**Научная составляющая занятий** покрывает следующие аспекты хемоинформатики:

- Базовые понятия и представления хемоинформатики,
- Создание химических баз данных и оперирование ими,
- Создание и валидация SAR/QSAR/QSPR моделей,
- Дизайн лекарственных препаратов,
- Виртуальный скрининг с использованием докинга и фармакофорного поиска.

**Научная программа школы включает:**

- лекции ведущих российских и мировых ученых по различным аспектам хемоинформатики и дизайна лекарств
    - пленарные доклады о достижениях, успехах и современном состоянии науки
    - устные доклады участников школы
    - практические занятия с использованием современного программного обеспечения (ChemAxon, OChem, Ligand Scout, LeadIt)
    - стендовую сессию
    - конкурс молодых ученых на лучший устный и стендовый доклад
- 

В числе приглашенных преподавателей:

1. **Александр ВАРНЕК** (*Université de Strasbourg, Франция*): “Chemoinformatics: basic concepts and areas of application”, “Obtaining, validation and application of SAR/QSAR models”

2. **Артем ЧЕРКАСОВ** (*University of British Columbia, Канада*): “The Use of Cheminformatics

Approaches for Minimizing Off-Target Effects of Drug Candidates”

3. **Александр ТРОПША** (*University of North Carolina in Chapel Hill, США*): “SAR/QSAR Modelling: state of the art”

4. **Игорь БАСКИН** (*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Россия*):  
“Machine-Learning methods”

5. **Драгош ХОРВАТ** (*Centre National de la Recherche Scientifique, Франция*):  
“Conformational sampling”

6. **Тьерри ЛАНГЕР** (*Prestwick Chemical, Франция*): “Pharmacophores and its applications”

7. **Жиль МАРКУ** (*Université de Strasbourg, Франция*): “Molecular docking methods”

8. **Владимир ПОРОЙКОВ** (*Институт биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича, Россия*):  
“Drug Design & Discovery in Academia”

9. **Игорь ТЕТКО** (*Helmholtz Zentrum München, Германия*): “ADME/Tox Prediction Approaches”

10. **Константин БАЛАКИН** (*Московский физико-технический институт, Россия*):  
“Computational Mapping Tools for Drug Discovery”

11. **Тимур МАДЖИДОВ** (*Казанский федеральный университет, Россия*): “Chemical databases: encoding, storage and search of chemical structures”

12. **Шерон БРАЙАНТ** (*Inte:Ligand GmbH, Австрия*): “Ligand-based and structure-based pharmacophors in virtual screening”

13. **Маркус ГАСТРАЙШ** (*BioSolveIT GmbH, Германия*): “Molecular docking approach for virtual screening”

---

Более подробная информация может быть найдена в [данном файле](#) и на странице Школы-конференции:

<http://kssci.kpfu.ru>

По всем вопросам касательно проведения конференции Вы можете обратиться к ученому секретарю.

С уважением, Тимур Исмаилович Маджидов,  
ученый секретарь Школы-конференции E-mail: [timur.madzhidov@kpfu.ru](mailto:timur.madzhidov@kpfu.ru) Тел./факс:  
+7(904)662-77-36

Веб-адрес:

<http://kssci.kpfu.ru>