



**КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ)  
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**РОССИЙСКАЯ СЕКЦИЯ  
МЕЖДУНАРОДНОГО ОБЩЕСТВА ПО  
ХЕМОИНФОРМАТИКЕ И QSAR**

**РОССИЙСКОЕ ХИМИЧЕСКОЕ  
ОБЩЕСТВО ИМ. Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА**

**ПЕРВАЯ ЛЕТНЯЯ  
ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ ПО  
ХЕМОИНФОРМАТИКЕ**

**KAZAN SUMMER SCHOOL ON  
CHEMOINFORMATICS**

**КАЗАНЬ  
26-29 АВГУСТА 2013**



### **Уважаемые коллеги!**

**Открылась регистрация участников на первую Летнюю школу-конференцию по хемоинформатике, которая пройдет в период 26-29 августа 2013 года в г. Казани.**

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.

#### **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

**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.

### **ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ**

чл.-корр. РАН, проф. Игорь АНТИПИН (Казань)  
проф. Александр ВАРНЕК (Страсбург)  
проф. Владимир ПОРОЙКОВ (Москва)  
**Уч. секретарь:** к.х.н. Тимур МАДЖИДОВ

#### **Локальный комитет:**

М.Д. Миссаров	Ю.Г. Штырлин
В.А. Бурилов	М.А. Казымова
Л. Косолапова	А.Р. Курбангалеева
Д. Чубукаева	Т. Гимадиев
А. Петровский	М. Зелди
Р. Нугманов	П. Сидоров
Ф. Ширшиков	А. Бодров

### **ОСНОВНЫЕ ДАТЫ**

**15 февраля** – второй циркуляр

**15 февраля - 15 мая** – регистрация участников

**15 февраля - 15 мая** – прием тезисов

**1 июля** - окончание приема оргвзносов

**25 августа** - день заезда, экскурсия за город

**26 августа** - открытие школы

**30 августа** - отъезд участников

### **МЕСТО ПРОВЕДЕНИЯ**

Местом проведения Школы является кампус Казанского (Приволжского) федерального университета: Казань, ул. Кремлевская 18.

### **РАБОЧИЕ ЯЗЫКИ ШКОЛЫ**

Основным рабочим языком Школы является английский. Возможность представления отдельных докладов на русском языке будет определяться составом участников.

### **РЕГИСТРАЦИЯ**

Регистрация участников проходит на сайте Школы-конференции: <http://kssci.kpfu.ru>. **Регистрация участников будет открыта до 15 мая 2013 года.** Тезисы докладов принимаются до 15 мая 2013 г. Количество мест для устных докладов ограничено. Отбор устных докладов происходит на конкурсной основе.

## ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ ВЗНОС

составляет:

- 2000 рублей (50 €) для студентов и аспирантов,
- 4000 рублей (100 €) для участников из вузов и академических институтов,
- 10000 рублей (250 €) для участников из коммерческих структур.

Оргвзнос включает участие во всех мероприятиях, набор участника, издание сборника тезисов, кофе-брейки, фуршет, культурную (экскурсионную) программу. Подробная информация о способах перечисления денег опубликована на сайте Школы <http://kssci.kpfu.ru> в разделе “Оргвзнос”.

## ПРОЖИВАНИЕ

Проживание обеспечивается участниками Школы самостоятельно. Оргкомитет предлагает к размещению следующие гостиницы:

- [Отель «Татарстан»](#), стоимость номеров 900-2400 руб. за ночь
- [Отель «Ибис»](#), стоимость номеров 2500 руб. за ночь
- [Отель «Хаяль»](#), стоимость проживания 3500 руб. за ночь
- [Отель «Колви»](#), стоимость проживания – от 1900 руб.
- Гостиничные номера Общежитий Казанского федерального университета, 15 минут на автобусе от места проведения Школы, стоимость проживания 500-800 руб. за ночь, количество мест ограничено, необходимо предварительное бронирование.

Оплата проживания обеспечивается участниками Школы самостоятельно (за счет направляющей стороны). О необходимости бронирования номера просим сообщить заранее (указать гостиницу, категорию номера, сроки пребывания). **Оргкомитет имеет определенные договоренности с гостиницами и может предоставить скидки для участников Школы-конференции** при условии предварительного бронирования (минимум за месяц). **Цены выше указаны без учета скидок.** Более подробную информацию просим уточнять у ученого секретаря Школы-конференции.

## ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ НАУЧНАЯ ПРОГРАММА

**Пленарные доклады (указаны темы докладов, названия будут опубликованы позднее):**

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”

**Практические занятия (указаны темы, названия будут опубликованы позднее):**

1. **Жиль МАРКУ** (*Université de Strasbourg, Франция*), **Драгош ХОРВАТ** (*CNRS, Франция*): “Database management” (с использованием программных инструментов от компании ChemAxon)

2. **Игорь ТЕТКО** (*Helmholtz Zentrum München, Германия*): “Structure-property relationships modeling” (с использованием инструментов ресурса OEChem)

3. **Шерон БРАЙАНТ** (*Inte:Ligand GmbH, Австрия*): “Ligand-based and structure-based pharmacophors in virtual screening” (с использованием программы LigandScout)

4. **Маркус ГАСТРАЙШ** (*BioSolveIT GmbH, Германия*): “Molecular docking approach for virtual screening” (с использованием инструментов программного комплекса LeadIt)

**Устные доклады участников:**

Планируется презентация 9-12 устных докладов участниками Школы. Доклады отбираются на конкурсной основе по присланным тезисам участников. Среди прочтенных докладов будет организован конкурс на лучший устный доклад.

**Стендовые доклады участников:**

Планируется организация стендовой сессии для презентации докладов участниками Школы. Среди представленных докладов будет организован конкурс на лучший стендовый доклад.

## КОНТАКТНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

**Председатель локального организационного комитета**, чл.-корр. РАН, проф. И.С. Антипин  
e-mail: [igor.antipin@ksu.ru](mailto:igor.antipin@ksu.ru)

**Ученый секретарь Школы-конференции**,  
к.х.н. Т.И. Маджидов  
e-mail: [Timur.Madzhidov@kpfu.ru](mailto:Timur.Madzhidov@kpfu.ru);  
[tmadzhidov@gmail.com](mailto:tmadzhidov@gmail.com)

Тел. раб.: (843) 2337462  
Тел. моб.: +79046627736

Секретариат Школы размещается в здании Химического института им. А.М. Бутлерова (420018, Казань, ул. Лобачевского, 1/29), ауд.218

Веб-страница Школы: <http://kssci.kpfu.ru>.  
Последние обновления о различных аспектах проведения Школы будут публиковаться на веб-странице Школы-конференции.