



Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского
Российской Академии Наук

Научная конференция-школа
**ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ
В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ**

Artificial Intelligence in Chemistry and Materials Science

18-19 декабря 2023, Москва

[Zioc.ru/AIChem2023](https://zioc.ru/AIChem2023)

Приглашаем к участию. Ждем Ваших докладов!

Уважаемые коллеги!

Приглашаем вас на уникальное событие, посвященное пересечению передовых технологий и химической науки! Вы когда-нибудь задумывались, как искусственный интеллект может внести революцию в химические исследования? Хотите узнать, как машинное обучение может помочь в разработке новых материалов и ускорении химических экспериментов?

Мы создаем платформу для обмена идеями и опытом между исследователями, студентами и научными сотрудниками. На нашей конференции вы узнаете о последних инновациях в области AI, которые могут стать настоящим прорывом в вашей научной деятельности.

Почему стоит посетить?

- Узнайте о новейших алгоритмах, применяемых в химии и материаловедении.
- Обменяйтесь опытом с ведущими экспертами в данной области.
- Найдите партнеров для совместных исследований и проектов.
- Поднимите свои исследования на новый уровень благодаря применению AI.
- Не упустите возможность стать частью научного будущего, откройте для себя новые горизонты развития с помощью искусственного интеллекта.

КЛЮЧЕВЫЕ ДАТЫ

01.11.2023 – последний срок предоставления тезисов устных докладов;

08.11.2023 – уведомление участников о принятии устных докладов;

15.11.2023 – последний срок предоставления тезисов стендовых докладов (решение о стендовых докладах будут приниматься по мере их поступления);

18.12.2023 – 19.12.2023 – работа конференции.

НАПРАВЛЕНИЯ РАБОТЫ КОНФЕРЕНЦИИ-ШКОЛЫ

Некоторые интересные направления, демонстрирующие потенциал AI в ускорении и улучшении исследований в области химии и материаловедения:

- Прогнозирование свойств молекул: Используя AI, можно предсказать физические, химические и биологические свойства молекул без необходимости проведения реальных экспериментов.
- Оптимизация свойств: Модели машинного обучения могут помочь в создании новых соединений с желаемыми свойствами, минимизируя количество необходимых экспериментальных тестов.
- Автоматизированный поиск реагентов: AI может анализировать большие наборы данных для выявления оптимальных реагентов для химических реакций.
- Дизайн материалов: с помощью AI можно разрабатывать новые материалы с желаемыми свойствами.
- Распознавание и анализ спектров: Модели машинного обучения могут анализировать сложные спектры, для быстрого определения состава образца.
- Оптимизация процессов: AI может помогать в управлении и оптимизации производственных процессов, уменьшая отходы и повышая эффективность.
- Прогнозирование стабильности соединений: Оценка термодинамической стабильности и реакционной способности различных химических соединений.
- Квантовые вычисления: Использование AI для интерпретации и оптимизации квантово-химических вычислений, что делает их быстрее и точнее.

- Создание биоактивных молекул: Применение AI для дизайна молекул с определенной биологической активностью, например, для разработки новых лекарственных средств.
- Устойчивость и экологичность: Использование AI для разработки более экологичных методов производства и создания материалов, которые меньше воздействуют на окружающую среду.

НАУЧНАЯ ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ-ШКОЛЫ

Программа конференции включает 2 научные сессии:

Научная сессия «Современные методы и подходы AI для научных исследований»

Специалисты в области AI поделятся с химиками своими знаниями и опытом в применении искусственного интеллекта в исследовательской работе. Участники сессии узнают о последних разработках в алгоритмах машинного обучения и глубокого обучения, а также о специфике их использования. Ведущие эксперты расскажут о успешных кейсах интеграции AI в лабораторные исследования, об оптимизации процессов и предсказательной силе. Сессия предоставит уникальную возможность для налаживания междисциплинарного взаимодействия, что позволит химикам лучше понимать возможности AI.

Научная сессия «Междисциплинарные перспективы в химии и материаловедения»

Участников ожидает увлекательное погружение в мир химии и материаловедения через призму междисциплинарного взаимодействия. Данная сессия предоставит площадку для обсуждения ключевых областей химии, где анализ больших объемов данных стоит на переднем крае научных исследований. Химики поделятся с аудиторией проблемами и вопросами, требующими новаторских подходов и методов решения. Они расскажут о сложностях, возникающих при изучении новых соединений, анализе реакций и механистических исследованиях. Представленные кейсы позволят глубже понять уникальность и сложность химических задач, выявить потенциальные точки пересечения двух дисциплин и определить области совместной работы.

ФОРМАТ ПРОВЕДЕНИЯ КОНФЕРЕНЦИИ-ШКОЛЫ

Конференция-школа включает *пленарные* (40 мин), *приглашенные* (30 мин), *устные* (20 мин) и *стендовые* доклады по следующим тематикам:

- Научная сессия «Современные методы и подходы AI для научных исследований» - доклады по применению AI в химии, или об интересных алгоритмах и подходах, которые могут найти применение в химии в будущем.
- Научная сессия «Междисциплинарные перспективы в химии и материаловедения» - доклады на любую тему, связанную с органическим синтезом, катализом и материаловедением. Если вы еще не пользуетесь методами AI, но хотите найти партнеров, расскажите о своих данных и актуальных научных задачах.

Приветствуем доклады от молодых ученых, аспирантов и студентов по самым широким тематикам. Присылайте заявку, с удовольствием рассмотрим! Конференция будет проводиться в очном формате, заочное и дистанционное участие не предусмотрено. Материалы конференции будут опубликованы в **Сборнике тезисов докладов** на web-сайте конференции в электронном виде. Образцы оформления тезисов можно найти по адресу: Zioc.ru/AIChem2023. В онлайн-сборнике будут опубликованы тезисы докладов только очных участников.

Адрес проведения конференции-школы: г. Москва, Ленинский пр., 47, ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН.

Рабочий язык конференции – русский.

Организационный взнос отсутствует для сотрудников научно-образовательных организаций.

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

академик Анаников В.П. – *председатель*

н.с., к.х.н. Архипова Д.М. – *секретарь*

с.н.с., к.х.н. Гордеев Е.Г.

асп. Корабельникова В.А.

асп. Провоторова Д.В.

Адрес оргкомитета:

119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47, ИОХ им. Н.Д. Зелинского, оргкомитет научной конференции-школы «Искусственный интеллект в химии и материаловедении» (“Artificial Intelligence in Chemistry and Materials Science”).

e-mail: conf-alab@ioc.ac.ru

О КОНФЕРЕНЦИИ

Конференция проводится Научной Школой академика В.П.Ананикова.

Годовой отчет Научной Школы: <https://zioc.ru/ananikovlab-report-2022.pdf>

Публикации по проекту “AI в химии”: <https://zioc.ru/ML-in-chemistry-2023.zip>

Ранее проведенные конференции:

«НОВЫЕ ГОРИЗОНТЫ КАТАЛИЗА И ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ», 19-20 мая 2022 г
Zioc.ru/NewHorizons2022

«ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОТКРЫТИЯ, ФОРМИРУЮЩИЕ ХИМИЮ СЕГОДНЯ»
(Fundamental discoveries shaping chemistry today), 24-25 ноября 2022 г
Zioc.ru/ChemToday2022

«ЛУЧШИЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА»
(Best in Catalysis: Representative OrgSyn Achievements), 12-14 апреля 2023 г
Zioc.ru/BestCatalysts2023