



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

II Научная конференция
**ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ
В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ**

Artificial Intelligence in Chemistry and Materials Science

17-21 ноября 2025, Москва

ai2025.zioc.ru

Приглашаем к участию. Ждем Ваших докладов!

Приглашаем вас на уникальное событие, посвященное пересечению передовых технологий и химической науки! Вы обратили внимание, как применение искусственного интеллекта стремительно меняет химические исследования? Хотите узнать, как машинное обучение применяется в разработке новых материалов и ускорении химических экспериментов? На конференции мы создаем платформу для обмена идеями, знаниями и опытом. Приглашаем к активному участию исследователей, аспирантов, студентов, сотрудников компаний и разработчиков. Вы узнаете о последних инновациях в области AI, которые могут стать настоящим прорывом в вашей научной деятельности и технологических разработках.



Уважаемые коллеги!

От имени Отделения химии и наук о материалах РАН рад приветствовать участников II Научной конференции «Искусственный интеллект в химии и материаловедении». Эта встреча проходит в особое время, когда мы становимся свидетелями глубокой трансформации науки и технологий. Если еще совсем недавно искусственный интеллект рассматривался как самостоятельная цель исследований, то сегодня мы уверенно вступаем в эпоху «ИИ для химии».



Впервые о наступлении этой эпохи сказал в своем выступлении акад. В. П. Анаников на Форуме будущих технологий 21 февраля 2025 г. С тех пор этот прогноз нашел яркое подтверждение в многочисленных научных работах и практических приложениях по всему миру. Международное сообщество демонстрирует единую тенденцию: искусственный интеллект перестает быть отвлечённым инструментом, а становится интеллектуальным ядром

химических исследований, разработок новых материалов, роботизации лабораторий, цифрового моделирования и устойчивых технологических решений.

Для отечественной науки этот вызов особенно важен. Россия обладает сильными школами в области химии и материаловедения, и интеграция ИИ в эти области открывает перед нами уникальные возможности. Не менее значимым является и вклад ИИ в подготовку кадров для науки и промышленности: персонализированная исследовательская траектория, цифровые подходы, интеллектуальные системы наставничества помогут подготовить новое поколение исследователей, готовых к работе в условиях стремительно меняющейся научно-технологической картины мира.

Выбор тематики конференции отражает глобальные тренды и стратегические задачи. Сегодня мы не только обсуждаем научные идеи, но и формируем интеллектуальную инфраструктуру XXI века, где химия и искусственный интеллект становятся взаимно усиливающими партнерами.

Желаю участникам конференции плодотворной работы, смелых идей и новых открытий. Убеждён, что совместными усилиями мы внесём значимый вклад в развитие мировой науки и в укрепление технологического лидерства нашей страны.

С уважением,
акад. М. П. Егоров
Академик-секретарь ОХНМ РАН



КЛЮЧЕВЫЕ ДАТЫ

- 15.08.2025** – открытие регистрации участников и приёма тезисов;
01.10.2025 – окончание приёма тезисов устных докладов;
15.10.2025 – окончание приема тезисов стендовых докладов;
01.11.2025 – окончание приема ранних регистрационных взносов;
15.11.2025 – окончание регистрации и приема регистрационных взносов;
17.11.2025 – 21.11.2025 – работа конференции.

ТЕМАТИЧЕСКИЕ БЛОКИ КОНФЕРЕНЦИИ

Цифровизация и стратегии ИИ в науке ИИ в химии, материаловедении и устойчивом развитии	Открытие, лекции, панельная дискуссия; Пленарные доклады, научные сессии, постеры, круглый стол;
ИИ в производстве и промышленных приложениях	Индустриальные доклады, технологические кейсы, круглый стол;
Цифровая трансформация компаний и сервисов	Сессии от компаний и представителей бизнеса;
Образование, кадры, стартапы	Панельные дискуссии, молодежная секция, обсуждения.

НАПРАВЛЕНИЯ РАБОТЫ КОНФЕРЕНЦИИ

AI в науке:

- Открытие и предсказание новых химических реакций с помощью ML-моделей;
- Автоматизированный анализ больших массивов экспериментальных данных;
- Интеграция AI в роботизированные и автономные лаборатории;
- Алгоритмы для поиска корреляций между структурой и свойствами веществ;
- AI-инструменты для научных публикаций и обработки литературы;
- Генеративные модели в проектировании молекул, материалов и катализаторов;
- AI как инструмент ускоренного перехода от фундаментальных идей к прикладным разработкам.

AI в образовании:

- Персонализированные траектории обучения студентов и исследователей;
- AI-помощники в преподавании химии и смежных дисциплин;
- Автоматическая проверка знаний и интеллектуальные системы тестирования;
- Создание цифровых учебников и интерактивных образовательных платформ;
- Обучающие симуляции и виртуальные лаборатории на базе AI;
- Поддержка научного наставничества и развитие soft skills с помощью AI;

- AI в образовательных процессах и академической аналитике.

AI в разработке промышленных решений:

- Усовершенствование существующих технологий;
- Разработка новых технологических решений;
- Оптимизация производств;
- Мониторинг и предиктивная аналитика;
- Цифровые двойники процессов и предприятий;
- AI в индустрии: от прототипа до внедрения;
- Как бизнес оценивает эффективность AI-проектов.

Междисциплинарные темы: технологии – химия – биология – медицина:

- AI в моделировании сложных физических явлений в наноматериалах;
- AI-дизайн промышленных реакторов и подходы к масштабированию процессов;
- Умные биосовместимые материалы;
- AI-дизайн биоактивных молекул и лекарств;
- Структурная химия, биология и биофизика с AI-инструментами;
- Квантово-химическое моделирование для материалов в химии и биомедицине;
- Анализ клеточных изображений, биомедицинских спектров.

ФОРМАТ ПРОВЕДЕНИЯ КОНФЕРЕНЦИИ

Конференция включает *пленарные и ключевые доклады* (30-45 мин), *устные* (15-20 мин), *стендовые доклады*, круглые столы/панельные дискуссии на стыке дисциплин и молодёжная секция по следующим тематикам:

- Секция 1 «Молекулярный дизайн и предсказание свойств»
- Секция 2 «ИИ в спектроскопии и аналитике»
- Секция 3 «Материалы и катализ»
- Секция 4 «Автономные лаборатории и роботизация»
- Секция 5 «Квантовая химия + ИИ»
- Секция 6 «Зеленая химия и устойчивость»
- Секция 7 «Другие приложения ИИ в химии, материаловедении, медицине, биотехнологиях и смежных дисциплинах»

РЕГИСТРАЦИЯ, ПОДАЧА ТЕЗИСОВ, ПОДРОБНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Информация представлена на сайте: ai2025.zioc.ru

Приветствуем доклады от молодых ученых, аспирантов и студентов по самым широким тематикам. Присылайте заявку, с удовольствием рассмотрим! Материалы конференции будут опубликованы в **Сборнике тезисов докладов** на web-сайте конференции в электронном виде.

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

Рабочий язык конференции: русский.

Контакты: aichem@ioc.ac.ru

За обновлениями следите в тг-канале конференции https://t.me/AI_and_science

