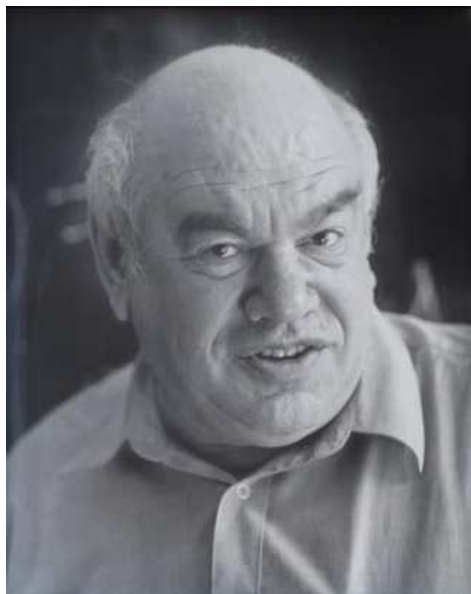


DOI: 10.15643/mmcct-2023-1



Семён Израилевич Спивак (1945–2020) – известный математик, долгие годы возглавлявший лабораторию математической химии Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН и кафедру математического моделирования Башкирского государственного университета (ныне – Уфимский университет науки и технологий). С. И. Спиваком и его учениками были разработаны оригинальные подходы, применяемые для оценки информативности эксперимента, анализа кинетических схем сложных химических процессов, моделирования строения и превращений химических соединений. Среди его учеников 10 докторов и 50 кандидатов наук.

С. И. Спивак – организатор лаборатории математической химии ИНК УФИЦ РАН. Примечательно, что лаборатория была создана в 1994 году – можно сказать, до широкого распространения вычислительной техники в нашей стране. Использование математических методов в химии долгое время требовало от ученых, работавших в этой области, преодоления трудностей, связанных с отсутствием вычислительных мощностей, и, часто, скептическим отношением экспериментаторов, считавших неэффективным применение вычислительных методов в химии – казалось бы, сугубо эмпирической дисциплине. Однако сейчас математическая химия представляет собой одно из «мейнстримных» направлений, изменяющих облик химии современной.

Конференция «*Математические методы в химии и химической технологии*» посвящена использованию математики и компьютерного моделирования для решения фундаментальных и прикладных химических задач. Доклады затрагивают вопросы решения обратной кинетической задачи, исследования сложных химических реакций, прикладную квантовую химию, молекулярный докинг и молекулярную динамику, исследования QSAR, автоматизированную классификацию молекул и схем синтеза, теорию гомодесмотических реакций, химические приложения теории информации и теории графов, а в качестве химических объектов выступают биологически активные органические соединения, белки, полимеры и фуллерены, ароматические углеводороды, катализаторы.

Оргкомитет конференции