

**РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК**  
**Отделение общей и технической химии**  
**Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского**  
**Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,**  
**химический факультет**

**2-я Всероссийская конференция**  
**"Молекулярное моделирование"**

**24-26 апреля 2001 г.**

**Москва, 2001 г.**

## **ОРГКОМИТЕТ**

### **2-й Всероссийской конференции**

### **"МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ"**

#### **Сопредседатели Оргкомитета:**

Член-корр. РАН Грибов Л.А.

Академик Зефилов Н.С.

#### **Члены Оргкомитета:**

Проф. Баранов В.И.

Проф. Бачурин С.О.

Проф. Дементьев В.А.

Проф. Раевский О.А.

Проф. Эляшберг М.Е.

К.х.н. Палюлин В.А.

#### **Ученые секретари:**

К.ф.-м.н. Жогина В.В.

К.х.н. Олиференко А.А.

## ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ \*

24 апреля

### Утреннее заседание

**10.00** Открытие конференции

**10.10** Зефирова Н.С., Палюлин В.А.

*Методология QSAR: Состояние и перспективы*

**11.10** Арчаков А.И., Иванов А.С.

*Молекулярное моделирование белков как мишеней для поиска новых лекарств*

**12.10** Баскин И.И., Беленикин М.С., Тихонова И.Г., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.

*Вычислительные подходы к молекулярному моделированию глутаматных рецепторов*

**12.30** Васильев П.М.

*Компьютерная система прогноза свойств органических соединений «Микрокосм»*

**12.50-14.00** Перерыв

### Вечернее заседание

**14.00** Баранов В.И., Астахов С.А.

*Моделирование трехмерных вибронных спектров и аналитические приложения*

**15.00** Годунов И.А., Батаев В.А., Яковлев Н.Н.

*Экспериментальные и теоретические исследования строения конформационно нежестких молекул карбонильных и нитрозосоединений в основных и низших возбужденных электронных состояниях*

**15.20** Дементьев В.А., Борисов А., Котов С.В.

*Программный комплекс LEV – новые функциональные возможности и перспективы развития*

**15.40** Долгоносков А.М.

*Связь адсорбции со структурой молекул*

**16.00** Егоров В.В.

*Природа оптического перехода в полиметиновых красителях и j-агрегатах*

**16.20** Владимиров Ю.А., Измайлов Д., Васильева О.В.

*Математическое моделирование кинетики реакций цепного окисления липидов*

**16.40-18.30** Стендовая секция ( №№ 1-42 )

---

\* Время на доклады: пленарные – 40 мин + 20 мин для ответов на вопросы  
устные – 15 мин + 5 мин для ответов на вопросы

## 25 апреля

### Утреннее заседание

- 10.00** Бачурин С.О., Ткаченко С.Е., Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.  
*Молекулярное моделирование эффективных нейропротекторов в ряду разомкнутых аналогов препарата МК-801*
- 11.00** Трач С.С., Молчанова М.С., Зефирова Н.С.  
*Классификация вырожденных перегруппировок и принципы их направленного конструирования*
- 12.00** Ефремов Р.Г., Нольде Д.Е., Волынский П.Е., Арсеньев А.С.  
*Молекулярное моделирование взаимодействий белок-мембрана*
- 12.20** Морозов В.А.  
*Теоретическое моделирование действия высокоэффективных светособирающих молекулярных антенн с применением новых подходов к описанию взаимодействия их хромофоров*
- 12.40** Норман Г.Э.  
*Стохастические свойства молекулярно-динамических систем, возникновение необратимости*
- 13.00-14.00** Перерыв

### Вечернее заседание

- 14.00** Эляшберг М.Е.  
*Зачем экспертным системам нужны спектроскописты?*
- 15.00** Павлючко А.И., Кулаго И.О.  
*Спектроскопические расчеты энергий диссоциации СН связей по значениям частот основных колебаний*
- 15.20** Папулов Ю.Г., Папулов Р.Ю.  
*Перечисление и систематизация изомеров замещения*
- 15.40** Погребняк А.В.  
*Методы молекулярных орбиталей в изучении современных лекарственных средств*
- 16.00** Поройков В.В., Филимонов Д.А., Никлаус М.  
*Компьютерное предсказание биологической активности для 250000 веществ, зарегистрированных NCI*
- 16.20** Ионов С.П., Кузнецов Н.Т.  
*Моделирование внутримолекулярных превращений в клзобороводородах и других кластерных системах*
- 16.40-18.30** Стендовая секция ( №№ 43-83 )

**26 апреля**

**Утреннее заседание**

**10.00 Грибов Л.А.**

*От моделирования спектров к моделированию химических реакций*

**11.00 Скворцова М.И., Федяев К.С., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.**

*О вероятностном подходе к определению области применимости математической модели в QSAR*

**11.20 Солкан В.Н., Казанский В.Б.**

*Квантовохимическое исследование различных путей генерации карбениевых ионов из олефинов и алкилфторидов в среде жидкой фтористоводородной кислоты*

**11.40 Фурер В.Л., Коваленко В.И., Вандюков А.Е., Majoral J.P., Caminade A.M.**

*Расчет колебательных спектров элементоорганических дендримеров*

**12.00 Михеев О.В.**

*Оптимизация использования вычислительных и информационных ресурсов в химико-биологических исследованиях*

**12.30-14.00**

**Круглый стол**

## СТЕНДОВАЯ СЕКЦИЯ

1. **Абрамов А.В., Ващенко А.В., Фролов Ю.Л.** *Неэмпирические исследования конформационного строения метилвинилового эфира и метилвинилсульфида*
2. **Авакян В.Г., Назаров В.Б., Алфимов М.В.** *Структура и спектры люминесценции комплексов включения циклодекстринов с производными нафталина. Квантово-химическое моделирование и экспериментальное исследование*
3. **Айт А.О., Баскин И.И., Барачевский В.А., Строкач Ю.В.** *Молекулярное моделирование закрытой и открытой форм металлосодержащих хромонов*
4. **Айт А.О., Баскин И.И., Гальберштам Н.М.** *Прогнозирование кислотности и окислительно-восстановительных потенциалов цианиновых красителей с использованием искусственных нейронных сетей*
5. **Алимов Н.И., Злобин В.А., Кузнецов П.Е., Жиров А.А., Назаров Г.В., Щербаков А.А., Костерин П.В.** *Физическое моделирование молекулярного транспорта через биологические мембраны*
6. **Алифанова Е.Н., Субботин В.А., Куренкова Ю.В., Атрощенко Ю.М., Каминский А.Я., Гитис С.С.** *Квантовохимическое моделирование взаимодействия анионных  $\sigma$ -аддуктов полинитроаренов с солями арилдиазония*
7. **Ананиашвили В.О., Бакурадзе Р.Ш., Джапаридзе К.Г.** *Моделирование электропроводящих полимерных систем*
8. **Андрианов В.М., Жбанков Р.Г.** *Влияние объемных боковых заместителей на колебательные спектры эпоксисахаридов*
9. **Артеменко А.Г., Кузьмин В.Е., Желтвай А.И., Челомбитько В.А.** *Новый подход для 3D-QSAR исследований на основе симплексного представления молекулярной структуры*
10. **Артеменко Н.В., Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефилов Н.С.** *Прогнозирование физико-химических свойств органических соединений с использованием фрагментного подхода и методологии искусственных нейронных сетей*
11. **Астахов С.А.** *Реализация метода моделирования трехмерных вибронных спектров сложных молекул на персональных компьютерах*
12. **Бабков Л.М., Ведяева Е.С., Пучковская Г.А., Трухачев С.К.** *Моделирование ИК спектров и структура алкилциклогексанкарбоновых кислот и их фторированных аналогов*

13. **Барташевич Е.В., Белик А.В., Потемкин В.А., Гуччионе С.** *Метод определения формы и размеров полостей в системе «рецептор-лиганд»*
14. **Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** *Молекулярное моделирование ионного канала NMDA-рецептора*
15. **Беленикин М.С., Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** *Молекулярное моделирование аминоконцевых доменов метаботропных глутаматных рецепторов и их комплексов с селективными агонистами и антагонистами*
16. **Березин К.В., Березина Р.И., Зотов С.Н.** *Моделирование распределения интенсивностей в спектрах резонансной флуоресценции многоатомных молекул*
17. **Бородина Ю.В., Поройков В.В., Филимонов Д.А.** *Применение компьютерного анализа структурного сходства веществ для предсказания рецепторного профиля их биологической активности*
18. **Бублик Н.Н., Дмитрук А.Ф., Высоцкий Ю.Б., Олейник Н.М.** *Переходные состояния реакции аминолитиза галогенангидридов карбоновых кислот*
19. **Будыка М.Ф., Гавришова Т.Н., Лаухина О.Д.** *Исследование конкурентных фотохимических реакций дизамещенных триазинов*
20. **Ващенко А.В., Абрамов А.В., Фролов Ю.Л.** *Тонкие отличия в электронном строении гетероатомов в метилвиниловом эфире и метилвинилсульфиде*
21. **Венер М.В., Кюен О., Зауер И.** *ИК спектр иона  $H_5O_2^+$ . Сопоставление результатов классической молекулярной динамики и 4-мерного модельного квантового расчета*
22. **Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г., Акинфиева Н.Ю., Васильева Е.Ю., Сорокина И.Ю.** *Моделирование свойств замещенных этана и его аналогов в атом-атомном представлении*
23. **Высоцкий Ю.Б., Брянцев В.С.** *Квантовохимическое моделирование скелетных перегруппировок радикалов, бирадикалов и систем в низшем триплетном состоянии*
24. **Гальберштам Н.М., Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** *Применение методологии искусственных нейронных сетей для прогнозирования констант скоростей реакций кислотного гидролиза сложных эфиров*
25. **Гришина М.А., Потёмкин В.А., Белик А.В.** *Новый метод прогноза направлений и энергий активации реакций в ангармоническом приближении*

26. **Дубанов А.В., Иванов А.С., Арчаков А.И.** *Поиск новых молекулярных мишеней для действия противомикробных средств на основе сравнительного анализа геномов*
27. **Иванова А.А, Иванов А.А, Олиференко А.А., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** *Особенности QSPR-моделирования для разнородной выборки органических соединений*
28. **Калниньш К.К.** *Квантовохимическое моделирование процессов электронного возбуждения в мономолекулярных реакциях*
29. **Киреев А.Ф., Рыбальченко И.В., Суворкин В.Н., Холстов В.И.** *Использование трехмерной структуры молекул и нейронных сетей для моделирования хроматографических параметров*
30. **Клименко В.Г., Серов С.А., Королькова Н.В., Гаспилович Е.А.** *Вибронно-спин-орбитальные взаимодействия в молекулах с несколькими тяжелыми атомами*
31. **Кривогуз М.Н.** *Спинодаль перегретого твердого тела*
32. **Кузнецов П.Е., Назаров Г.В., Злобин В.А., Герасимова Н.И., Щербаков А.А., Костерин П.В.** *Физическое моделирование некоторых физиологических эффектов лекарств*
33. **Кузнецов П.Е., Стародубцева Л.В., Злобин В.А., Герасимова Н.И., Щербаков А.А., Костерин П.В.** *Некоторые методы математического моделирования биологических эффектов химических соединений*
34. **Кузнецов П.Е., Шантроха А.В., Щербаков А.А., Лапко Е.Ю., Костерин П.В.** *Моделирование эффектов локализации о-алкил-метилфосфонатов п,п,п-трибутил-п-бензиламмония на границе раздела фаз "вода-гидрофобная среда"*
35. **Кузьмин В.Е., Короев С.Г. Кузьмина А.В.** *Описание формы циклических молекул с помощью автокорреляционных функций*
36. **Кузьмин В.Е., Огниченко Л.Н., Артеменко А.Г., Онищенко С.В., Юданова И.В.** *Прикладные аспекты теории информационного поля молекулы*
37. **Куклин Р.Н.** *Моделирование электронной структуры линейных молекул с использованием решаемых рекурсивных уравнений*
38. **Кулаго И.О., Павлючко А.И., Орлинсон Б.С., Новаков И.А.** *Моделирование структуры и колебательных спектров поглощения бромзамещенных алканов*
39. **Лагунин А.А., Поройков В.В., Филимонов Д.А., Степанчикова А.В., Глоризова Т.А.** *Web сайт для прогнозирования спектра биологической активности химических веществ*

40. Лебедев К.С., Строков И.И. *Моделирование молекулярных спектров на основе банков фактографических данных*
41. Мельников Г.В., Косарев А.В. *Триplet-триpletный перенос энергии электронного возбуждения между молекулами красителей и полициклических ароматических углеводородов в водно-мицеллярных растворах*
42. Милов А.А. *Внутримолекулярное гипервалентное  $O \rightarrow X$  ( $X=C, Si, Ge$ ) взаимодействие в органических системах*
43. Моливер С.С. *Квантовая химия и оптические спектры молекул и кристаллов на основе фуллерена  $C_{60}$*
44. Молчанова М.С., Трач С.С., Зефирова Н.С. *Моделирование задач дизайна органических реакций: основные возможности и перспективы системы ARGENT*
45. Морозик Ю.И., Фоменко П.В., Седунов С.Г., Щербаков А.А. *Разработка подхода к идентификации гомологических рядов на основе методологии искусственного интеллекта*
46. Морозов И.В. *Стохастические свойства неидеальной плазмы. Молекулярно-динамические расчеты*
47. Муравьев Г.А. *Парный потенциал для описания взаимодействия атомов на близких и промежуточных расстояниях*
48. Мухина Т.В., Бачурин С.О., Ткаченко С.Е., Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефирова Н.С. *Нейросетевое моделирование биологической активности аналогов МК-801*
49. Нестерова Е.Г. *Теоретическое изучение внутримолекулярного гипервалентного  $X \dots X$  ( $X=O, S$ ) взаимодействия в гетеропенталеновых соединениях*
50. Новаков И.А., Павлючко А.И., Орлинсон Б.С., Кулаго И.О., Корольков В.В. *Спектральное и квантово-химическое изучение реакционной способности адамантансодержащих моно- и диаминов в синтезе полиимидов*
51. Новосадов Б.К. *Моделирование электронного распределения молекулы линейной комбинацией одноцентровых распределений и решение проблемы вычисления многоцентровых матричных элементов квантовой химии в базисе экспоненциальных атомных орбиталей*
52. Новосадов Б.К., Тарасов Ю.И., Кочиков И.В., Курамшина Г.М., Спиридонов В.П., Пентин Ю.А. *Совместное использование неэмпирических расчетов и электронографических данных для моделирования колебаний большой амплитуды на примере молекулы тетрафторборана ( $B_2F_4$ )*

53. Опейда И.А., Дмитрук А.Ф., Заречная О.М. *Реакционная способность алкоксирадикалов в реакциях  $\beta$  – расщепления и H – отрыва*
54. Панкратов А.Н. *Количественные соотношения структура - свойство в рядах неорганических, органических, элементоорганических, координационных соединений*
55. Перельгин И.С., Шатохин С.А. *Моделирование колебательных спектров комплексов ортофосфатов с катионами щелочных элементов*
56. Поролло А.А., Петухова Т.В., Ившин В.П., Пивина Т.С., Смоленский Е.А. *Компьютерное моделирование путей термического распада нитрогуанидина*
57. Потёмкин В.А., Гришина М.А., Русинов Г.Л., Федорова О.В., Чупахин О.Н., Гуччионе С. *Новый 3D-QSAR алгоритм ViS для моделирования ориентации и прилегания молекул к рецептору. Анализ противотуберкулезной активности подандов*
58. Радченко Е.В., Палюлин В.А., Зефирова Н.С. *Отбор дескрипторов и качество PLS-моделей "структура-активность" в методе анализа топологии молекулярного поля*
59. Русин Л.Ю., Севрюк М.Б. *Особенности расчетов корреляционных связей методом квазиклассических траекторий*
60. Сеченых А.А., Дубанов А.В., Скворцов В.С., Иванов А.С., Арчаков А.И. *Компьютерная модель трехмерной структуры цитохрома P450 2B4*
61. Скворцова М.И., Федяев К.С., Палюлин В.А., Зефирова Н.С. *Обратная задача в проблеме связи "структура - свойство" для индекса Хосоя*
62. Скворцова Н.С., Лабазова О.Н., Пурыгин П.П. *Исследование взаимосвязи «структура – биологическая активность» ряда 1,1' - карбонимидоил-, 1,1' -карбонил-, 1,1' -тионил-азолов*
63. Смоленский Е.А., Зефирова Н.С., Пивина Т.С., Шпилькин С.А., Маслова Л.К. *Геометрические свойства алканов*
64. Смоленский Е.А., Молчанова М.С., Маслова Л.К., Чуваева И.В. *Классификация алканов по поколениям нормальных изомеров*
65. Смоленский Е.А., Шпилькин С.А., Чуваева И.В., Серегина М.В. *Вычисление индекса Винера с помощью редуцированной матрицы расстояний для алканов*
66. Соловьев А.Н., Баранов В.И. *Моделирование возбужденных состояний и вибронных спектров полиенов*
67. Станкевич И.В., Чистяков А.Л. *Моделирование методами квантовой химии структуры и электронного строения  $\eta^n$ - $\pi$ -комплексов фуллеренов ( $n \geq 3$ )*

68. **Стегайлов В.В.** *Время динамической памяти в молекулярно-динамических системах*
69. **Сударушкин С.К., Гусакова Н.Н.** *Квантово-химическое моделирование взаимодействия первичных ароматических аминов с ароматическими альдегидами*
70. **Суханов Л.П., Железняков В.В., Закамская Н.Л., Набиев Ш.Ш.** *Особенности динамического моделирования донорно-акцепторных молекулярных комплексов*
71. **Тен Г.Н., Баранов В.И.** *Моделирование структуры молекулы биацетила в возбужденном состоянии и анализ спектров поглощения и флуоресценции*
72. **Тен Г.Н., Бурова Т.Г.** *Спектроскопическое исследование структурной модели поликристаллического урацила*
73. **Тихонова И.Г., Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефилов Н.С.** *Молекулярное моделирование доменов NMDA-рецепторного ионофорного комплекса и молекулярный докинг агонистов и антагонистов*
74. **Трофимов М.И., Смоленский Е.А.** *Комбинированный индексный подход к моделированию параметров ЯМР для циклических молекул*
75. **Трушков И.В.** *Механизмы окисления органических соединений цитохромом P450 и его аналогами. Анализ на основе метода многомерных диаграмм реакций*
76. **Туровский Н.А., Опейда И.А., Антоновский В.Л., Николаевский А.Н.** *Супрамолекулярная модель реакции распада пероксида бензоила, активированного ониевыми солями*
77. **Халиуллин Р.З., Солкан В.Н.** *Квантовохимические расчеты колебательных спектров метана в каналах цеолита H-ZSM5 в рамках простой электростатической модели*
78. **Чистяков А.Л., Станкевич И.В., Гамбарян Н.П., Ахрем И.С.** *Реакции пропана с суперэлектрофилами*
79. **Чубанов В.А., Айт А.О., Баскин И.И., Файн В.Я.** *Прогнозирование положений длинноволновых полос поглощения 9,10-антрахинонов с использованием искусственных нейронных сетей*
80. **Чувылкин Н.Д., Беленький Л.И., Мартынкин А.Ю., Иванов С.Н., Ширинян В.З., Краюшкин М.М.** *Сравнительный анализ геометрии, электронного строения и реакционной способности 1,2-ди(3-тиенил)этенa с различными этеновыми фрагментами, обладающих и не обладающих фотохромными свойствами*
81. **Шпилькин С.А., Зефилов Н.С., Смоленский Е.А., Маслова Л.К., Захарова М.В.** *Моделирование величин Tпл. алканов. Расчеты и прогноз Tпл. диалканов*

**82. Элькин М.Д., Ведяева С.Ю., Пулин В.Ф.** *Информационная технология "Vibration-2000" в молекулярном моделировании*

**83. Ярощук А.И.** *Стохастические свойства динамики полимеров*